進化型多目的最適化の一手法

—Multiple Coding GA—[†]

西川 郁子*・西出 恵介**

A Method of Multiobjective Genetic Algorithms

—Multiple Coding GA—[†]

Ikuko NISHIKAWA* and Keisuke NISHIDE**

Multiple Coding Genetic Algorithm (MCGA) is proposed as a multi-objective GA method, in which each individual specializes on one of many objectives and has a different decoding according each objective. The proposed method is applied to 2-objective knapsack problems and 2-objective flowshop scheduling problem, and its performance is compared with the ordinal parallel selection. In the application to knapsack problems, the data sets with different correlation coefficients are generated in a systematic way to control the distribution of a Pareto set. Quantitative evaluations of the obtained solutions are given by relative accuracy, cover ratio, diversity and the number of acquired solutions. In the application to flowshop scheduling, heuristic decoding methods are proposed for each objective. Simulation result shows that the proposed method is effective to obtain diverse solutions especially in the problem with a large Pareto set, which results either from a statistical character of a given problem, or from a largeness of a problem scale, or from a high dimensionality of a solution space.

Key Words: GA, multiobjective optimization, Multiple coding, quantitative evaluation, correlation

1. はじめに

近年、多点並列探索法である遺伝的アルゴリズム（以下、GA）を用いた多目的最適化手法やその適用事例が多く報告されている^{2)~4)}。問題の大規模化や目的数の増加により、解空間内のパレート最適解数は飛躍的に増大するため、そこで求められる探索は単に多数のパレート解を得ることではなく、より多様で広範な解を得ることである。

多目的最適化問題に対する代表的なGA手法である並列選択法では、各目的ごとに独立に個体群を選択する¹⁾。これも含めて従来のGAでは、全個体に対して共通のコーディングを用いる。本研究では、GAを多目的最適化問題に適用するにあたり、個体ごとに特定の目的に特化させ、その特化目的ごとに異なるデコーディングを行なうMultiple Coding GAを提案する。これによって、より多様な、すなわち、より広

範かつ均一に分布したパレート最適解の獲得を目指す。ここでは、並列選択法と同様に目的ごとに個体群を選択するが、表現型へ変換する際に特定の目的値をより改善するようなデコーディングを施し、それによりパレート解集合の特に先端領域を広げる。遺伝子型空間における交叉操作によって、各目的に特化した個体間で互いの優良形質が交換され、複数目的に対する妥協解の探索が進むことは、従来の並列選択法と同様である。

以下の2章でまず、提案するMultiple Coding GA（以下、MCGA）を2目的ナップザック問題を例に示し、予備実験により従来の並列選択法と比較しその特質をみる。並列選択法と相補的な探索傾向が見られることより、両手法を融合したハイブリッド法とも比較する。つぎの3章では、性能検証用の対象問題をより系統的に作成するために、問題データの統計性、具体的には目的間の相関係数を随意に与える方法を示す。目的間の相関に応じて、パレート解集合の分布形状が変わり、それにより探索課題の定性的性質や各探索手法の性能が変わると考えられ、それを実験的に確認するためである。本稿では、2目的がそれぞれ独立にGauss分布、あるいは、一様分布にしたがう確率変数の場合に、所望の相関係数をもつデータの作成方法を示す。続く4章では、GA手法ごとに得られたパレート解集合を定量比較する指標として、今回用いた3つの量を説明する。そして5章で、2つの問題に対す

[†] 第11回インテリジェント・システム・シンポジウムで一部発表 (2001・9)

* 立命館大学理工学部 草津市野路東 1-1-1

** トヨタ自動車（株）愛知県渥美郡田原町緑が浜字 3-1

* Department of Computer Science, Ritsumeikan University, 1-1-1, Nojihigashi, Kusatsu

** Toyota Motor Corporation, 3-1 Midorigahama, Tahara, Atsumi-gun, Aichi

(Received April 6, 2001)

(Revised October 12, 2001)

るシミュレーション結果を示す。まず、範例の問題として2目的ナップサック問題で、各種の相関を持つ2目的データに対して、並列選択法、Multiple Coding GA、および、両者のハイブリッド法を適用し、4章で示した諸量によりその性能を評価する。つぎに、スケジューリング問題への適用例として、2目的フローショップ問題でのデコーディング法を示し、特に大規模問題での有効性をみる。最後の6章をまとめとする。

2. Multiple Coding 法

本章では、2目的ナップサック問題を例にとり、提案するMultiple Coding法を説明する。予備実験により並列選択法と比較し、両者の特質を生かしたハイブリッド法も考える。以下の表式は、3目的以上でも同様に表わせるが、MCGAの特徴であるコーディング法は対象問題に応じて変わり、ここでは説明が容易なナップサック問題を範例として用いた。

2.1 並列選択法

並列選択法としてパレート解保存戦略を組み合わせた以下の手順を用いた。

2.1.1 コーディング法と手順

荷物数 N のナップサック問題に対して、各個体の遺伝子型をつぎのコード列で表わすものとする。

$$x_1 x_2 \dots x_i \dots x_N \quad (1)$$

x_i は i 番目の荷物を袋に詰めるかどうかを示す2値の決定変数である(1なら詰め、0なら詰めない)。

デコーディングには欲張り法を用いる。すなわち、荷物を重量当りの価値の大きい順に、制限重量 W を越えるまで袋に詰める。2目的ナップサック問題では、各荷物 i は二つの価値 V_{ji} ($j = 1, 2$) を持つため、両価値を加えた次式の大きい順に詰めることにする。

$$\text{重量当の価値} \equiv \frac{V_{1i}/m_1 + V_{2i}/m_2}{w_i}$$

w_i は荷物 i の重量、 m_1, m_2 はそれぞれ V_{1i}, V_{2i} の平均値で両価値の規格化に用いた。

これより、以下を決められた世代数繰り返す。

手順1 初期個体群を生成する。

手順2 各個体を評価し、暫時パレート最適個体を選び次世代に残す。

手順3 全個体群から目的ごとの個体群を並列に選択する。

手順4 交叉と突然変異を行ない、手順2に戻る。

2.1.2 パレート解保存

パレート解保存戦略を用いる際、パレート解数が多く多様性保持の障害となることを避けるため、以下の方法をとった。

- (1) 全目的関数値が同じ2つ以上の個体は、表現型が異なるものであれ、いずれかの1個体のみを次世代に残す。
- (2) 前世代までで保存されたパレート解集合と新世代のパレート解集合の和から、さらにパレート解を抽出する。
- (3) 個体数以上のパレート解を保存しうるプールを用意

し、プール中から一定数のパレート解をランダムに選び次世代に投入する。

これらの手順および方法を Fig. 1 に示す。上記の方法(1)に関しては、図中の①, ③, ⑤, ⑦すべてに適用する。方法(2)は、①から⑤で表わされ、方法(3)は⑥から⑧で表わされている。パレート解プールを最終的な解集合とする。

Fig. 1 Procedure for Pareto elite conservation

2.2 Multiple Coding GA

前節の並列選択法において、手順3で目的ごとに個体群を選択する際に、各個体がそれぞれ特定の目的値がより良くなるよう、その特定目的ごとに異なるデコーディングを行ない表現型を得るものとする。ここではこれを Multiple Coding 法と呼ぶ。

コード列(1)に加え、いずれの目的に特化するかを表わす最終ビットを付加する。

$$x_1 x_2 \dots x_i \dots x_N x_{N+1} \quad (2)$$

その個体が価値 j ($j = 1, 2$) に特化している場合、 $x_{N+1} = j$ とする。

デコーディングには前節と同じく欲張り法を用いるが、その際に各目的のみを考慮した欲張り法とする。すなわち、価値 j に特化した個体に対しては、 V_{ji}/w_i の大きい順に荷物を詰める。

これより、以下を決められた世代数繰り返す。

手順1 初期個体群を生成する。各個体は、いずれの目的に特化するかが x_{N+1} 値であらかじめ決められている。各目的への特化個体を同数生成する。

手順2 個体を目的に応じたデコーディング法で表現型に変換して評価し、暫時パレート最適個体を選び次世代に残す。

手順3 全個体群から目的ごとの個体群を並列に選択する。

手順4 以下の要領で交叉し、突然変異の後、手順2に戻る。

交叉の際、特化する目的が異なる個体間では、いずれか一方に合わせて他方のコーディングを変えたのち交叉し、得られる2つの子個体はともにその目的に特化したものとする。いずれの目的に合わせるかをともに0.5の割合で与える。このとき特化する目的の変更方法は、(1) 最終ビット x_{N+1} を反転後、新しい値にしたがって表現型に変換し、そこで選択された荷物 i に対してのみ $x_i = 1$ として遺伝子型を書き換える(ビット反転による表現型の変更を遺伝子型にも反映させる)、(2) もとの x_{N+1} 値にしたがって表現型に変換し、そこ

で選択された荷物 i に対してのみ $x_i = 1$ として遺伝子型を書き換えた後、 x_{N+1} を反転する（ビット反転前後で表現型は同じ）、(3) x_{N+1} の反転のみ；といった方法を比較し、概して安定してより良好な結果を与えた (1) の方法を本稿の実験では用いた。この変更操作の後、通常の一点交叉を最終ビット直前以外の箇所で行なう。また、同じ目的に特化した個体間の交叉では、最終ビットを特に意識せず、2つの子個体とも同じ目的に特化したものを得る。以上のもで、各組合せの交叉回数を固定し、各世代での全交叉後、両種の個体が同数になるようにする。

手順1で、各目的に特化する個体数を初期に同数生成したが、各個体数は、通常の並列選択法において目的ごとに選択する個体群サイズと同様に、各目的を重視する度合に相当し、ここではそれを同一としたわけである。実際、選択時の個体群サイズ、あるいは、各目的に特化する個体数を 1:2, 1:5 とした実験では、4章で示す各評価指標および解分布から、つぎの結果が得られた。通常の並列選択法では、個体群サイズの大きい目的側に偏った解分布となるが、MCGA で得られる解集合は、選択時の個体群サイズにはほとんど依存せず、各目的に特化する個体数に大きく依存した。それをふまえて、各世代での遺伝的操作後も初期設定の個数が保たれるよう、特に交叉において上記の配慮を行なった。目的数や各個体群サイズが異なる場合には、交叉時にもそれに応じた設定を採ることになる。

なお、最終ビットに対する突然変異は行なわない。これは、最終ビットを反転し特化する目的のみを変えた場合、個体が新たに特化した目的における評価値の増加に比べ、もと特化していた目的における評価値がより大幅に減少するからである。実験では、初期過程を除いて全般に、前者の増加幅の 1.5 倍程度後者が減少したため、最終ビットに対する突然変異操作の有効性が期待できないと考えた。

2.3 予備実験

2.3.1 予備実験 1

荷物数 50 の 2 目的ナップサック問題で並列選択と MCGA を比較する。荷物データは、重量 w_i 、価値 V_{1i}, V_{2i} それぞれを独立に生成した。GA のパラメータは、個体数 120、交叉は一点交叉で確率 100%、突然変異は各個体 1 ビット反転で確率 100%、世代数 1000 とした。また、真のパレート解を分枝限定法と ϵ 制約法により 23 組と求め、これに基づき結果を評価した。両手法を 30 回試行し、獲得した真のパレート解の最高数、平均数、完全獲得 (23 組獲得) 回数で比較した。Table 1 に示した実験結果より、MCGA の優位性がわかる。

本節および 5 章でのナップサック問題への適用において、交叉確率および突然変異確率を高く設定したのは、それぞれつぎの理由による。前述のように MCGA での交叉には、特化目的の異なる個体間の交叉が含まれる。MCGA での各個体は、並列選択法より一層各個別目的の最適化を目指す傾向が強く、妥協解の生成は特化目的の異なる個体間の交叉によっているため、この確率をある程度高く設定する必要がある。

Table 1 Comparison of Parallel selection and MCGA (Maximum number of solutions, Average number of solutions and the number of times of obtaining 23 solutions are shown.)

	Max no.	Average no.	No. of times
Parallel	20	17.9	0
MCGA	23	22.3	11

本稿の実験では交叉確率を、各個体対に対して特化目的の異同によらず等しく与えた。通常の交叉に相当するのは同じ目的に特化した個体間の交叉と考えられるが、目的数 M に対して、この交叉が全交叉に占める割合は、 $1/M^2 \times M = 1/M$ (2 目的の場合は $1/2$) となる。比較のため交叉確率を 33%、13% と下げると、突然変異確率の値によらず、4 章で示すいづれの評価指標も低下し、交叉確率を下げるほど妥協解が少なくなかつ劣化する傾向が顕著であった (たとえば突然変異確率 50% のとき、交叉確率 100%, 33.3%, 13.3% を相互比較すると、それぞれ相対精度 97.1%, 91.6%, 85.4%, カバー率 94.6%, 86.6%, 79.0%)。

また、突然変異を高確率としたのは、ナップサック問題で用いた欲張りデコーディングを生かすべく、実験では表現型で選択される荷物数の数倍の $x_i = 1$ を遺伝子型が含むよう冗長性を持たせており、遺伝的操作が表現型に反映しにくいと考えたためである。ただし突然変異確率は、50%, 5% と変えた比較実験でも、余り顕著な違いは見られなかったが、交叉確率によらず 50% が若干良く、次いで 100%, 5% の順であった。(たとえば交叉確率 100% のとき、突然変異確率 100%, 50%, 5% を相互比較すると、それぞれ相対精度 96.6%, 97.1%, 95.2%, カバー率 92.5%, 94.6%, 92.0%)。

このように高い交叉確率と突然変異確率により前世代の個体が破壊されるが、実験では並列選択法と MCGA とともに、2.1.2 節で示したパレート解プールへの相当数のパレート解保存によって補われている。

2.3.2 予備実験 2

より大規模な荷物数 100 で実験した。世代数 10000 とし、結果は最終世代の暫時パレート解分布で比較した。Fig. 2 に実験結果を示す。横軸、縦軸はそれぞれ V_1, V_2 の和である。

Fig. 2 の分布状況より、並列選択法は中央部分で優越し、逆に MCGA は、分布の両端をよく探索し広範囲の解を得ていることがわかる。そこで次節に、両手法を合わせた融合法を挙げる。また、パレート解集合の形状が異なる問題を作成するために 3 章で統計性を考慮したデータの生成法を、結果の定量的評価のために 4 章で指標を、それぞれ説明する。

2.4 並列選択法と MCGA のハイブリッド

予備実験 2 の結果から、並列選択法と MCGA を融合し、並列選択法での両価値を考慮したデコーディング個体と、MCGA での特定目的を考えたデコーディング個体を共存させる GA を考える。この手法は、3 種のデコーディング法を用いることから Multiple Coding GA の 1 種だが、2.2 節の MCGA と区別して以下では Hybrid GA (HIGA) と呼ぶ。

Fig. 2 Pareto set at the final generation obtained by Parallel selection (+) and MCGA (x)

コード列は MCGA と同様に (2) 式を用い、両価値を考慮する個体は $x_{N+1} = 0$ とする。 x_{N+1} 値に応じて 3 種のデコーディングを行ない、交叉時には MCGA と同様の処理をする。これに応じて初期個体群としては、 $x_{N+1} = 0$ の個体を全個体数の 1/2、 $x_{N+1} = 1, 2$ の各個体を 1/4 ずつ生成する。

3. 一定の相関を持つデータの作成法

2 目的ナップサック問題における 2 種の価値データを、異なる相関値で生成し、問題の統計性の違いによる各手法の性能差を検証する。そこで本章では、同じ確率分布にしたがい一定の相関値を持つ 2 つの確率変数の生成方法として、Gauss 分布と一様分布の場合について示す。

3.1 Gauss 分布

独立な Gauss 分布の和は再び Gauss 分布になることより、ごく簡単な計算により求めることができる。以下のように諸変数を定義する。

r : 相関係数を制御するパラメータ

x, y : それぞれ平均 m_x, m_y 、分散 σ_x^2, σ_y^2 の Gauss 分布にしたがい互いに独立な確率変数

X, Y : 以下の (3) 式により x, y の一次結合で与えられる確率変数。本稿のナップサック問題では、それぞれ価値 V_1, V_2 に対応する。これらもやはり Gauss 分布にしたがい、平均と分散をそれぞれ $m_X, m_Y, \sigma_X, \sigma_Y$ とする。

C : X と Y の相関係数

ここで、 i 番目の組 X_i, Y_i を次式で与える；

$$\begin{aligned} X_i &= x_i + ry_i \\ Y_i &= x_i - ry_i \end{aligned} \quad (3)$$

本節の目的は、任意の $C \in [-1, 1]$ を与える r を求めることである。

まず、 x, y の独立性より、 $m_X = m_x + rm_y$ 、 $m_Y = m_x - rm_y$ 、 $\sigma_X^2 = \sigma_Y^2 = \sigma_x^2 + r^2\sigma_y^2$ 。よって特に $\sigma_x = \sigma_y$ のとき、 $\sigma_X = \sigma_Y = \sqrt{1+r^2} \cdot \sigma_x$ 。これより、

$$C = \frac{\sigma_x^2 - r^2\sigma_y^2}{\sigma_x^2 + r^2\sigma_y^2}$$

特に $\sigma_x = \sigma_y$ の場合は、

$$C = \frac{1-r^2}{1+r^2}, \quad r = \pm \sqrt{\frac{1-C}{1+C}} \quad (4)$$

となり、 $-1 \leq C \leq 1$ に対して、パラメータ $\exists r (\geq 0)$ を一意に決め、 X, Y がそれぞれ $G(m_X, \sigma_X^2)$ 、 $G(m_Y, \sigma_Y^2)$ (ただし $\sigma_X = \sigma_Y$) にしたがう、相関係数 C をとるようデータを生成できる。

3.2 一様分布

本節では、 V_1, V_2 がそれぞれ一様分布にしたがうよう生成する方法を示す。前節の Gauss 分布の場合と異なり、独立な 2 変数の単純な一次結合では、一様分布にしたがいかつ適当な相関を持つ 2 つの確率変数を与えることはできないが、ここでは、任意の確率変数において、それを自身の累積分布関数に代入して定義した新たな確率変数は、 $[0, 1]$ 区間の一様分布 $U(0, 1)$ にしたがうということを用いる。先と同様、以下の諸変数を定義する。

r : 相関係数を制御するパラメータ

x, y : いずれも $U(0, 1)$ にしたがう互いに独立な確率変数

X, Y : (3) 式により x, y の一次結合で与えられる確率変数。これがしたがう分布をそれぞれ $f_X(t)$ 、 $f_Y(t)$ とおくと、一般に Fig. 3 に示される線形の台形型関数で与えられる。

Fig. 3 Distribution functions f_X of X (left) and f_Y of Y (right) for $r \geq 2$

F_X, F_Y : それぞれ確率変数 X, Y の累積分布関数。すなわち、

$$F_X(t) = \text{Prob}(X < t) = \int_{-\infty}^t f_X(\tau) d\tau$$

$$F_Y(t) = \text{Prob}(Y < t) = \int_{-\infty}^t f_Y(\tau) d\tau$$

一般に Fig. 4 に示されるような、二つの二次関数を直線でつないだ関数で与えられる。

Z, W : X, Y からさらに次式で定義した確率変数。

$$Z = F_X(X) = \int_{-\infty}^X f_X(\tau) d\tau$$

$$W = F_Y(Y) = \int_{-\infty}^Y f_Y(\tau) d\tau$$

本稿のナップサック問題では、このように定義した Z, W が価値 V_1, V_2 に対応するが、いずれも一様分布 $U(0, 1)$ にしたがうことが、以下のようにして容易にわかる。

Fig. 4 Z or a cumulative distribution function $F_X(X)$ (left) and W or a cumulative distribution function $F_Y(Y)$ (right) for $r \geq 2$

定義より, $Z, W \in [0, 1]$ は自明である. そこで, $\forall t \in [0, 1]$ を考えると,

$$\begin{aligned} \text{Prob}(Z < t) &= \text{Prob}(F_X(X) < t) \\ &= \text{Prob}(X < F_X^{-1}(t)) \\ &= F_X(F_X^{-1}(t)) \quad (F_X(t) \text{ の定義より}) \\ &= t \end{aligned}$$

同様に $\text{Prob}(W < t) = t$ となることより, Z, W は $U(0, 1)$ にしたがう. なお, ここでは $F_X(t), F_Y(t)$ の逆関数の存在を仮定したが, (3) 式で X, Y を与える場合には明らかに常に成り立つ.

そこで, Z と W の相関係数 C を求める. 以下では, 平均操作を $E[\cdot]$ で表す. Z と W の共分散を σ_{ZW}^2 とし, Z と W の平均 $m_Z = E[Z]$, $m_W = E[W]$, 分散 $\sigma_Z^2 = E[Z^2] - m_Z^2$, $\sigma_W^2 = E[W^2] - m_W^2$ が, それぞれ $m_Z = m_W = 1/2$, $\sigma_Z^2 = \sigma_W^2 = 1/12$ であることを用いると,

$$C = \frac{\sigma_{ZW}^2}{\sigma_Z \cdot \sigma_W} = \frac{E[ZW] - \frac{1}{4}}{\frac{1}{12}} \quad (5)$$

付録 A に導出を示した $E[ZW]$ の表式 (A.1)(A.2)(A.3) を (5) 式に代入すると, 相関係数 C が制御パラメータ r の関数として次式のように得られる.

$$C = \begin{cases} -1 - \frac{61}{60r^3} + \frac{2}{r^2}, & \text{for } r \geq 2 \\ \frac{r^3}{60} - \frac{r^2}{5} + r - \frac{11}{3} + \frac{4}{r} - \frac{6}{5r^2} + \frac{1}{20r^3}, & \text{for } 1 \leq r < 2 \\ -\frac{r^3}{20} + \frac{6r^2}{5} - 4r + \frac{11}{3} - \frac{1}{r} + \frac{1}{5r^2} - \frac{1}{60r^3}, & \text{for } \frac{1}{2} \leq r < 1 \\ \frac{61r^3}{60} - 2r^2 + 1, & \text{for } 0 \leq r < \frac{1}{2} \\ -\frac{61r^3}{60} - 2r^2 + 1, & \text{for } -\frac{1}{2} \leq r < 0 \\ \frac{r^3}{20} + \frac{6r^2}{5} + 4r + \frac{11}{3} + \frac{1}{r} + \frac{1}{5r^2} + \frac{1}{60r^3}, & \text{for } -1 \leq r < -\frac{1}{2} \\ -\frac{r^3}{60} - \frac{r^2}{5} - r - \frac{11}{3} - \frac{4}{r} - \frac{6}{5r^2} - \frac{1}{20r^3}, & \text{for } -2 \leq r < -1 \\ -1 + \frac{61}{60r^3} + \frac{2}{r^2}, & \text{for } r < -2 \end{cases} \quad (6)$$

上式より, 任意の $-1 \leq C \leq 1$ に対してパラメータ $r (\geq 0)$ を一意に決め, 2つの値がそれぞれ一様分布 $U(0, 1)$ にしたがう, 相関係数 C をとるようデータを生成することができる.

Fig. 5 に (6) 式より得られる $C(r)$ を, 前節のガウス分布の場合の (4) 式とあわせて示す. 図より, ほぼ同様の曲線を描くことが確認できる.

Fig. 5 Correlation coefficient C as a function of a control parameter r (solid line: uniform distribution, broken line: Gaussian)

4. パレート解分布の評価指標

2.3節の予備実験結果でも触れたように, 真のパレート解集合が未知の場合にも, 各手法で得られたパレート解集合を定量的に評価する必要がある. 本稿では評価指標として, 以下に示す相対精度, カバー率, 多様性の3つを用いる⁵⁾.

4.1 相対精度とカバー率

2つ以上の解集合に対して, それぞれの相対精度とパレート解カバー率を以下で定義する.

K 種の手法により得られた各パレート解集合を $P_k (k = 1, \dots, K)$ とし, それぞれの解の数を $N_k (N_k = \#P_k)$ とする. つぎに, K 個の解集合の和 $\bigcup_{k=1}^K P_k$ から再びパレート解を抽出し, 解集合 P (解の数 $N = \#P$) とする. 真のパレート解が未知の場合, この P をいわば暫定パレート解集合として性能比較の基準とするわけである. そこで, P_k と P の積集合を $\hat{P}_k = P_k \cap P$, その要素数を $\hat{N}_k$ とすると, 第 k 手法で得た解集合 P_k のうち, ‘真’の解集合 P に含まれるものが $\hat{P}_k$ である. $\hat{N}_k/N_k$ を P_k の相対精度, $\hat{N}_k/N$ を P_k のパレート解カバー率とする. 相対精度は P_k のうち P に含まれる割合, カバー率は P_k が P に占める割合を表わし, いずれも $[0, 1]$ の値をとる.

4.2 多様性

解の個数のみでなく, 分布の広さや均一性を表わす指標として多様性を以下で定義する. なお, 以下の表式は2目的に限定され, $M (\geq 3)$ 目的に対しては, M 次元空間内の $M-1$ 次元曲面上の点分布の広さと均一性を測る同様の指標を用い

ることになる。

まず先の解集合 P の近似曲線を求める。各 k に対して、つぎの手順で多様性 V_k を求める。 P_k の全 N_k 個の解を近似曲線上に射影し、その座標点を (s_{xi}, s_{yi}) ($i = 1, 2, \dots, N_k$) とする。また、 P の各射影点のうち曲線上の両端点を (s_{x0}, s_{y0}) , (s_{xN_k+1}, s_{yN_k+1}) とする。このとき多様性を、 $N_k + 2$ 個の点 (s_{xi}, s_{yi}) ($i = 0, 1, \dots, N_k + 1$) が均等配置されている度合で測ることにする。そこでまず、各点 (s_{xi}, s_{yi}) ($i = 0, 1, \dots, N_k + 1$) を以下のように長さ 1 の線分上に規格化して配置し、その位置を τ_i とする。

$$d_0 = 0, d_i = \sqrt{(s_{xi} - s_{x(i-1)})^2 + (s_{yi} - s_{y(i-1)})^2} \quad (i = 1, \dots, N_k + 1)$$

$$\tau_i = \frac{\sum_{j=0}^i d_j}{\sum_{j'=0}^{N_k+1} d_{j'}} \quad (i = 0, 1, \dots, N_k + 1)$$

均等分布の場合は $\tau_i = \frac{i}{N_k+1}$ であり、これからのずれを指標とする。つまり、分布曲線 $F_k(\tau)$ を次式で定義すると

$$F_k(\tau_i) = \frac{i}{N_k + 1}$$

これは均等分布の場合には傾き 1 の直線となり、均等からずれるほど、 $F_k(\tau)$ ($0 \leq \tau \leq 1$) の経路長 L_k は大きくなる。

Fig. 6 に分布曲線 $F(\tau)$ の例を示す。経路長 L_k は次式で与

Fig. 6 Distribution curve F

えられ、

$$L_k = \sum_{i=0}^{N_k} \sqrt{(\tau_{i+1} - \tau_i)^2 + \frac{1}{(N_k + 1)^2}}$$

均等分布の場合に最短の $L_k = \sqrt{2}$ (Fig. 6 中の経路 1), 全 N_k 個が 1 点に集中した場合に最長の $L_k = 2$ (同じく経路 2) となる。これより、多様性 $V_k \in [0, 1]$ を次式で定義する。

$$V_k = \frac{2 - L_k}{2 - \sqrt{2}}$$

5. シミュレーション

5.1 2 目的ナップサック問題

2 目的ナップサック問題において、目的間の相関の異なる複数データに対して、並列選択法, MCGA, HIGA を適用し、結果を相対精度, カバー率, 多様性, 解の個数により比較した。

5.1.1 問題設定

荷物数 100 個のデータは、重量、価値 1, 2 をいずれも $[1, 100]$ の一様分布にしたがう確率変数として生成した。3 章の方法で価値 1, 2 間の相関係数を $C = -1.0, -0.75, -0.5, \dots, 0.75, 1.0$ とする 9 データを作成した。制限重量は 2000, GA の諸パラメータは、個体数 200, 交叉は一点交叉で確率 100%, 突然変異は各個体 1 ビット反転で確率 100%, 世代数 10000 とした。3 手法 9 データに対して、初期個体群を変え 10 試行ずつ行なった。

5.1.2 実験結果

最終世代でのパレート解集合に対して評価し、10 試行の平均をとった。

Fig. 7 に示したパレート解集合は、3 手法で得られた最終世代のパレート解の和集合から新たにパレート解を抽出したものである。図より、相関係数 C が大きいほど、解集合の分布が狭くなる事が確認できる。分布形状は、Gauss 分布にしたがうデータに対しても全く同様であり、一様分布のほうが解空間が広く傾向が顕著なため、ここでは一様分布の結果のみを示した。 $C = 1$ のとき解は 1 点となる。

Fig. 7 Pareto solutions for 9 data sets with different correlation coefficients

$C = -1$ のとき、解集合は複数の線分で構成される。この場合、Fig. 8 に見られるように途中世代での解集合も互いに平行な線分群で与えられ、各線分は詰める荷物数に対応する (図中右上ほど荷物数が多い)。

Figs. 9~12 に、それぞれ相対精度, カバー率, 多様性, 解個数による 3 手法の比較を示す。全般に、Multiple Coding

Fig. 8 Examples of Solutions (not optimal) for the data set with $C = -1$

を用いた MCGA や HIGA が、並列選択法より高い値を示している。特に 3 種のデコーディングを用いた HIGA の相対精度、カバー率は、データによらず高い値を示している。

Fig. 9 Comparison by the relative accuracy

Fig. 11 の多様性に関しては、いずれのデータでも MCGA と HIGA は同程度の値を示し、並列選択法より大きい。しかし相対精度においては、Fig. 9 に見られるように、パレート解集合の分布が比較的広い $C = -1 \sim -0.5$ では、並列選択法が勝っている。これはほとんどの試行で、解分布の中央部分で MCGA の解が並列選択法に優越されたためである。その場合も HIGA は、並列選択の利点も取り入れ、MCGA より高い値となっている。C 値が大きくなるにしたがってこの傾向は弱まり、分布が狭まるにつれ MCGA や HIGA も中央部分で並列選択法と同様の探索が行なえた。

5.2 2 目的フローショップ問題

目的ごとに異なるデコーディング法の例として、2 目的スケジューリング問題に MCGA を適用した。フローショップ問題において、総所要時間および終了時刻和の最小化を行なう。以下では、各目的に応じたヒューリスティック法に基づ

Fig. 10 Comparison by the cover ratio

Fig. 11 Comparison by the diversity

Fig. 12 Comparison by the number of the obtained solutions

くデコーディング法を示すが、このように適用問題とその各目的に応じたヒューリスティック法を GA と融合する方法としても、MCGA は有効である。並列選択法と MCGA を適用し、結果を比較した。さらに、規模の異なる 2 問題に適用し、問題の大規模化による影響をみた。ただし本問題では、目的間の相関を問題設定時に定量的に制御することは困難で

あり、3章で示したデータ作成法は用いていない。上記2目的は一般に正の相関が予想されるが、以下では2目的間の相関に対応する値を求めてはいない。

5.2.1 コーディング法

i 番目の遺伝子座は仕事 J_i に対応し、仕事の処理順を示す整数値 x_i を格納する。仕事数を N とすると、並列選択法の場合は、各 $x_i (i = 1, \dots, N)$ が整数値 $1, \dots, N$ を重複なくとる。MCGA の場合は、 x_{N+1} にいずれの目的に特化するかをコードし、 $x_i (i = 1, \dots, N)$ は仕事の処理順をグループ化した番号 ($< N$) をとり、仕事はグループ番号の小さい順に処理される。同一グループ番号の仕事が複数存在し、その中で処理順は特化した目的に応じて、以下のいずれかのヒューリスティックな方法で決める。

仕事 J_i の j 番目の工程を $J_{ij} (j = 1, \dots, M)$ (ただし以下では表記の簡単化のため、 $M = 2M' + 1$ とした。 M が偶数でも全く同様である)、工程 J_{ij} の処理時間を P_{ij} とする。

総所要時間最小化のデコーディングには、Johnson の定理を拡張する。すなわち、各仕事に $2M' + 1$ 個の工程があり、同一グループ番号の仕事 J_k と J_l の間で以下が成り立つとき、

$$\min \left(\sum_{j=1}^{M'+1} P_{kj}, \sum_{j=M'+1}^{2M'+1} P_{lj} \right) \leq \min \left(\sum_{j=1}^{M'+1} P_{lj}, \sum_{j=M'+1}^{2M'+1} P_{kj} \right)$$

仕事 J_k を J_l より先に処理する。

終了時刻和最小化のデコーディングには、以下で定義する影響度に基づく方法をとった。仕事 J_i が n 番目に処理される時、 J_i がそれ以降に処理される全 $N - n$ 個の仕事に与える影響度 $E_i(n)$ を次式で定義する。

$$E_i(n) = \sum_{j=1}^M \{(N - n + 1)(M - j + 1) - 1\} P_{ij}$$

$n - 1$ 番目まで処理される仕事が決定的なとき、つぎの n 番目に処理されるのは、未処理の仕事 $N - n + 1$ 個のうち、最小の $E_k(n)$ をもつ仕事 J_k とする。これは処理時間の短い順の処理を意味するが、それを後続する全工程が影響を受ける総時間で測ったものである。

5.2.2 実験結果

50 仕事 10 機械問題と 100 仕事 10 機械問題で両手法を比較した。処理時間 P_{ij} のデータは、いずれも $[1, 15]$ の一様分布にしたがう確率変数として独立に生成した。GA の諸パラメータは、個体数 120、交叉は一点交叉で確率 80%、突然変異確率は 50% として、初期個体群を変え両手法を 5 試行ずつ行なった。その結果、50 仕事問題では有意な差は見られなかったが、100 仕事問題では、全 5 試行において MCGA で得た解集合が並列選択法に優越した。Fig. 13 に、そのうちの 1 試行において、両手法で得られた各パレート解集合を示す。図では、MCGA で得られたパレート解 (◆の 8 点) が、並列選択法で得られたいずれのパレート解 (■の 2 点) にも優越している。問題の大規模化により解空間が高次元化し、パ

Fig. 13 Comparison by the distribution of the solutions

レート解集合が拡大することで、広範な解を求めるのに優れた MCGA の特質が顕著になったといえる。

なお、50 仕事問題、100 仕事問題のいずれにおいても、各手法で得られたパレート解は Fig. 13 に示すように高々数個であったため、多数の解の分布を特徴付ける統計量である 4 章の評価指標は用いず、解の分布を直接図示した。特に 100 仕事問題では、全試行で MCGA の解が優越したため、相対精度、カバー率 (ともに MCGA では 1、並列選択法では 0 となる) を用いる必要がない。よってまた、相補的な傾向をもつ両手法を融合する HIGA も、相互補間による性能向上が期待できないため適用していない。

6. おわりに

本研究では、多目的最適化問題に GA を適用するにあたり、目的ごとに異なるデコーディングを行なう Multiple Coding を提案し、シミュレーションにより従来の並列選択法と比較することで性能を評価した。獲得するパレート解集合を比較すると、並列選択法は中央部分で密、MCGA は周辺でより有効な探索を行なうことを、解の分布形状のみでなく定量化指標により確認した。よって特に、データの統計性により広いパレート解分布を持つ問題や大規模な問題で、MCGA が優れていることがわかった。また、目的数が増えた場合にも同様の結果が確認されている。今後さらに適用事例を増やし、その有効性を検証したい。

参考文献

- 1) 北野宏明 (編): 遺伝的アルゴリズム 2, 第 II 部 最適化 玉置 第 3 章「遺伝的アルゴリズムと多目的最適化」77/81, 産業図書 (1995)
- 2) H. Tamaki, H. Kita and S. Kobayashi: Multi-Objective Optimization by Genetic Algorithms: A Review, Proc. of ICEC'96, 517/522 (1996)
- 3) J. Horn: Multicriterion decision making, Handbook of Evolutionary Computation, Oxford Univ. Press (1997)
- 4) C. A. C. Coello: An Updated Survey of Evolutionary Multiobjective Optimization Techniques: State of the Art and Future Trends, Proc. of CEC99, 3/13 (1999)
- 5) 三菱総合研究所: 並列オブジェクト指向言語の汎用高並列計算機向け処理系の開発とその応用実証プログラムによる評価 (1997)

《付 録》

A. (5) 式の相関係数の導出

以下に (5) 式中の $E[ZW]$ の導出を示す。 $E[\cdot]$ の計算は $U(0,1)$ にしたがう確率変数 x, y に帰着して求め、 $|r|$ 値により場合分けする。

まず、 $r \geq 2$ の場合を考える。このとき、等 X (あるいは Y) 線は、 Fig.A.1 に示すように、 xy 平面上の正方領域 $(x, y) \in [0, 1] \times [0, 1]$ 内部で、傾きが $1/r$ (あるいは $-1/r$) の直線に対応する。そこでこの正方領域を、 Fig.A.2 に示す 7 領域に分けて扱う。ここで領域を分割する 4 本の直線 $L1 \sim L4$ は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} L1: y &= \frac{1}{r} - \frac{x}{r} & L2: y &= \frac{x}{r} \\ L3: y &= 1 - \frac{x}{r} & L4: y &= 1 - \frac{1}{r} + \frac{x}{r} \end{aligned}$$

Fig. A.1 Equi- X, Y lines on xy plane ($r \geq 2$)

Fig. A.2 Partition into 7 regions on xy plane ($r \geq 2$)

また、 $r \geq 2$ の場合の X, Y の分布 f_X, f_Y を本文中 Fig.3 に、それらを積分した累積分布関数 F_X, F_Y を同 Fig.4 に示す。図中で $F_X(X)$ を構成する二次曲線と直線 $f_1(X), f_2(X), f_3(X)$ 、および $F_Y(Y)$ を構成する $f_4(Y), f_5(Y), f_6(Y)$ は、それぞれ次式で与えられる。

$$\begin{aligned} Z &= \begin{cases} f_1(X): \frac{(x+ry)^2}{2r}, & \text{for } 0 \leq X \leq 1 \\ f_2(X): \frac{x+ry}{r} - \frac{1}{2r}, & \text{for } 1 < X \leq r \\ f_3(X): -\frac{(x+ry-r-1)^2}{2r} + 1, & \text{for } r < X \leq 1+r \end{cases} \\ F_X &= \begin{cases} f_1(X): \frac{(x+ry)^2}{2r}, & \text{for } 0 \leq X \leq 1 \\ f_2(X): \frac{x+ry}{r} - \frac{1}{2r}, & \text{for } 1 < X \leq r \\ f_3(X): -\frac{(x+ry-r-1)^2}{2r} + 1, & \text{for } r < X \leq 1+r \end{cases} \\ W &= \begin{cases} f_4(Y): \frac{(x-ry+r)^2}{2r}, & \text{for } -r \leq Y \leq 1-r \\ f_5(Y): \frac{x-ry}{r} + 1 - \frac{1}{2r}, & \text{for } 1-r < Y \leq 0 \\ f_6(Y): -\frac{(x-ry-1)^2}{2r} + 1, & \text{for } 0 < Y \leq 1 \end{cases} \\ F_Y &= \begin{cases} f_4(Y): \frac{(x-ry+r)^2}{2r}, & \text{for } -r \leq Y \leq 1-r \\ f_5(Y): \frac{x-ry}{r} + 1 - \frac{1}{2r}, & \text{for } 1-r < Y \leq 0 \\ f_6(Y): -\frac{(x-ry-1)^2}{2r} + 1, & \text{for } 0 < Y \leq 1 \end{cases} \end{aligned}$$

以上より、 Fig.A.2 の領域 1~7 に分割して求めた積分値 $E[ZW]$ が次式のように得られる。

$$E[ZW] = \frac{1}{6} + \frac{1}{6r^2} - \frac{61}{720r^3}, \quad \text{for } r \geq 2 \quad (\text{A.1})$$

同様に、 $1 \leq r < 2$ の場合を考える。 Fig.A.1 における $X = x + ry$ の傾き $-1/r$ は、この場合 $-1 \leq -1/r < -1/2$ 、 $Y = x - ry$ の傾きは $1/2 < 1/r \leq 1$ となり、 Fig.A.3 のような 9 領域に分けられる。後はすべて $r \geq 2$ のときと同様で

あり、ここでも先の式を用いて 9 領域に分けて求めた積分値

Fig. A.3 Partition into 9 regions on xy plane ($1 \leq r < 2$)

の和より、 $1 \leq r < 2$ のときの $E[ZW]$ が次式で得られる。

$$\begin{aligned} E[ZW] &= \frac{r^3}{720} - \frac{r^2}{60} + \frac{r}{12} - \frac{1}{18} + \frac{1}{3r} \\ &\quad - \frac{1}{10r^2} + \frac{1}{240r^3} \quad \text{for } 1 \leq r < 2 \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

さらに、 $1/2 \leq r < 1$ および $0 \leq r < 1/2$ の場合を考える。これらは、すでに得られた結果をもとに以下のように導けばよい。 $1/2 \leq r < 1$ については、 $1 \leq r < 2$ の場合の Fig.A.3 を、 $0 \leq r < 1/2$ については、 $r \geq 2$ の場合の Fig.A.2 を、いずれも $y = x$ に関して反転した図を用いて分割領域が得られる。 Z, W の表式も同様に考え、結局次式を得る。

$$\begin{aligned} Z &= \begin{cases} f_1(X): \frac{(x+ry)^2}{2r}, & \text{for } 0 \leq X \leq r \\ f_2(X): x + ry - \frac{r}{2}, & \text{for } r < X \leq 1 \\ f_3(X): -\frac{(x+ry-r-1)^2}{2r} + 1, & \text{for } 1 < X \leq 1+r \end{cases} \\ F_X &= \begin{cases} f_1(X): \frac{(x+ry)^2}{2r}, & \text{for } 0 \leq X \leq r \\ f_2(X): x + ry - \frac{r}{2}, & \text{for } r < X \leq 1 \\ f_3(X): -\frac{(x+ry-r-1)^2}{2r} + 1, & \text{for } 1 < X \leq 1+r \end{cases} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W &= \begin{cases} f_4(Y): \frac{(x-ry+r)^2}{2r}, & \text{for } -r \leq Y \leq 0 \\ f_5(Y): x - ry + \frac{r}{2}, & \text{for } 0 < Y \leq 1-r \\ f_6(Y): -\frac{(x-ry-1)^2}{2r} + 1, & \text{for } 1-r < Y \leq 1 \end{cases} \\ F_Y &= \begin{cases} f_4(Y): \frac{(x-ry+r)^2}{2r}, & \text{for } -r \leq Y \leq 0 \\ f_5(Y): x - ry + \frac{r}{2}, & \text{for } 0 < Y \leq 1-r \\ f_6(Y): -\frac{(x-ry-1)^2}{2r} + 1, & \text{for } 1-r < Y \leq 1 \end{cases} \end{aligned}$$

これらより、 $1/2 \leq r < 1$ および $0 \leq r < 1/2$ に対する $E[ZW]$ がつぎのように求められる。

$$E[ZW] = \begin{cases} -\frac{r^3}{240} + \frac{r^2}{10} - \frac{r}{3} + \frac{5}{9} - \frac{1}{12r} + \frac{1}{60r^2} - \frac{1}{720r^3}, & \text{for } \frac{1}{2} \leq r < 1 \\ \frac{61r^3}{720} - \frac{r^2}{6} + \frac{1}{3}, & \text{for } 0 \leq r < \frac{1}{2} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

最後に、 $r < 0$ の場合は、パラメータ r の符号反転が変数 X, Y の交換に相当することに注意すれば、 $E[ZW]$ が r の奇関数であることは明らかである。あるいは、 $-1/2 \leq r < 0$ 、 $-1 \leq r < -1/2$ 、 $-2 \leq r < -1$ 、 $r < -2$ の各場合に対する $E[ZW]$ の具体的表式は、それぞれ $0 \leq r < 1/2$ 、 $1/2 \leq r < 1$ 、 $1 \leq r < 2$ 、 $r \geq 2$ のときの $E[ZW]$ に対し $r \rightarrow -r$ とすることで求められる。

[著 者 紹 介]

西 川 郁 子 (正会員)

1984年京都大学理学部物理学科卒業, 90年同大学院博士課程単位取得退学. 同年神戸大学大学院自然科学研究科助手, 93年立命館大学工学部情報工学科助手を経て, 95年同情報学科助教授となり, 現在に至る. 博士(理学, 京都大学). ニューラルネットワーク, 遺伝的アルゴリズムなどの研究に従事.

西 出 恵 介

1998年立命館大学工学部情報工学科卒業. 同年同大学大学院理工学研究科情報システム学専攻博士前期課程に入学し, 遺伝的アルゴリズムの研究に従事. 2000年同卒業. 同年, トヨタ自動車(株)に入社し, 現在に至る.