

(2) 人工生命技術の最適化問題への適用に関する基礎的研究

BASIC STUDY ON APPLICATION OF ARTIFICIAL-LIFE TECHNIQUES TO OPTIMIZATION PROBLEMS

松保 重之*

Shigeyuki MATSUHO

* 工博 阿南工業高等専門学校助教授 専攻科 (〒774 阿南市見能林町青木 265)

In this study, several methods of artificial life (AL) are introduced, and their characteristics and applicability to optimization problems are discussed. As AL methods, we consider the genetic algorithm (GA), the Hopfield (HF) neural network model, the Boltzmann machine (BM) neural network model, the randomized algorithm (RA), and the neural network model using the self-organizing map (SOM). These methods are used to solve the Nondeterministic Polynomial (NP) complete problem and the optimization problem with discretized parameters. Through a numerical example, the effectiveness of the RA and GA models is demonstrated.

Key Words: artificial life techniques, combinatorial optimization problem, efficiency and applicability

1. まえがき

人工生命(ALife)技術の手法は、組合せ最適化問題を解くのに有効であり、土木工学における多くの問題も組合せ最適化問題として定式化することができる。しかしながら、土木工学においては種々の ALife の手法について比較検討がなされた文献が少ないのが現状である。そこで、本論文では、種々の代表的な ALife 技術の手法を紹介するとともに、それらを比較し、それらの効率性と組合せ最適化問題への適用性と言う側面から検討する。

ALife の手法としては、(1)ホップフィールド型ニューラルネットワーク(HF モデル)、(2)ボルツマン型ニューラルネットワーク(BM モデル)、(3)極の緩和の手法を利用したニューラルネットワーク¹⁾(RA モデル)、(4)自己組織化特徴マップの手法を用いたニューラルネットワーク²⁾(SOM モデル)、および、(5)遺伝的アルゴリズム(GA モデル)を考えた。GA は生物学的進化を模擬した手法で、最近、盛んに研究されはじめている。それ以外の手法はニューラルネットワークに関連した手法で、特に、HF モデルは、エネルギー最小化の概念をフィードバック型ニューラルネットワークに取り入れたものである^{3),4)}。BM モデルは、HF モデルに確率論的操作を加えることによって探索が局所的な(極値)解に陥るのを避ける手法である。RA モデルは、BM モデルに基づいているが、焼きなまし法を用いて探索を収束させるのではなく、探索中に得られた極値解の間で最適解(目的関数が最大あるいは最小の解)を求めようとするものである。SOM モデルは、多数の入力データから潜在的な特徴を自動的に見出して、2次元の出力層上に配置することができるものである。数値計算例では、種々の ALife 手法の有効性と効率

性を比較検討するために、組合せ最適化問題として代表的な巡回セールスマン問題への適用を考える。数値計算例により各 ALife 手法の特徴を明らかにする。

2. 各手法の基本的概念

本節では、種々の ALife 手法について概説する。

2.1 ホップフィールド型(HF)モデル

このモデルは、出力ユニットから入力ユニットへのフィードバックループを有する相互結合型ネットワークの一種である。N 個のニューロンは相互に重み付けされ結合している。実際には、ニューロン間の重み不変のもとで、各ニューロンの入出力値が変化し、ついにはある一定の状態に収れんしシステムが完成する。このような学習の過程は、時刻 $t+1$ でのニューロン i の入力信号値 $u_i(t+1)$ の関数 f を用いて

$$x_i(t+1)=f(u_i(t+1)), \quad u_i(t+1)=\sum x_j(t)w_{ij}-h_i \quad (1)$$

として表される。入力信号値 $u_i(t+1)$ は、上式の第2式のように、時刻 t での各ニューロン j の出力値 $x_j(t)$ の重み付き総和で表される。式中、 w_{ij} はニューロン j からニューロン i への重みを表し($w_{ii}=0$)、 h_i はニューロン i の閾値を表す。関数 $f(\cdot)$ としては、単位階段関数 $\text{sgn}(\cdot)$ 等がよく用いられ 1 か 0 (あるいは 1 か -1) がニューロンから出力される。このようなシステムの挙動はエネルギー関数

$$E=-0.5 \sum \sum w_{ij}x_i x_j - \sum h_i x_i \quad (2)$$

を用いて表すことができ、 $dE/dt \leq 0$ 、すなわち、エネルギーが最小値に収れんすることが広く知られている⁹⁾。したがって、最適化問題の目的関数を上式(2)と関係付けることができれば、最適化問題に応用することができる。

2.2 ボルツマン型(BM)モデル

HF モデルは、上述のように組合せ最適化問題を解くことができるが、常に最適解を得ることができる訳ではない。この原因は、HF モデルのエネルギー式(2)が多峰性を有する場合、探索がその局所解に陥り、そこからの脱出が困難となるからである。これは、入力と閾値との大小関係によってニューロンの出力値が決まり、解の探索の方向が一意的に決められていたことに起因する。そこで、確率論的にニューロンの出力値を決め、場合によってはエネルギー増加の方向へも解の探索を可能とし、結果的に別の最適解の候補への探索を可能としたのがボルツマン型(BM)モデルである。実際には、エネルギー増加の方向への探索は、最初のうちはかなり許され、広い範囲からの解の探索がなされ、次第にそのような確率的な探索が制限されてきて最適解に落ち着きやすく操作される。このような操作は、焼きなましと呼ばれ、温度と呼ばれるパラメータによって制御される。

上述のように、BM モデルは、HF モデルにおいて、各ニューロンの1か0(あるいは1か-1)かの出力値を確率的に決めるように拡張したものである。計算の手順⁹⁾をまとめると、①組合せ最適化問題を解くために、各問題に応じたエネルギー関数から重みを設定し、焼きなましのための温度を下げるスケジュールを設定する。②各ニューロンの他のニューロンからの入力とを計算する。③ニューロンの出力値を、入力と焼きなましのスケジュールによって決められた温度 T によって定まる確率 p

$$p(x_i=1) = 1 / \{1 + \exp(-u_i/T)\} \quad (3)$$

に基づいて決め、上述の②～③の操作を繰り返し、解の探索を行う。

2.3 極の緩和によるネットワーク(RA)モデル

BM モデルは、適当な焼きなましスケジュールを用いて無限回の計算を行えば、厳密解を得ることができることが保証されている有力なアルゴリズムである。しかし、このようにして厳密解を得るためには、膨大な計算量が必要である。これは、通常の BM モデルでは、大域的な(最適)解を見つけるために温度パラメータをなるべく時間をかけて下げなければいけないことと、最適解の探索が極小解に陥った場合、そこからの脱出に、多くの計算の繰り返しが必要になるからである。そこで、一度探索した極小解周りの探索は避け、極小解同士の間で最小値を見つけることを目標に開発されたのが、極の緩和に基づくニューラルネットワーク(RA)モデルである。

RA モデルでは、以下のような仮定のもとに計算がな

される：①各極小解が最適解の候補としてメモリに記憶される、②焼きなましのスケジュールによる温度パラメータの操作はしない、③各繰り返しにおいて解が評価され、その結果により計算される確率 p

$$p = \exp(-F/T_0) \quad (4)$$

に基づきその解を採択し、次の繰り返しを行う。上式中、 T_0 は定数、 F は、その解が先の解に比べどの位改善されたかを評価する関数である。評価関数 F は、その状態遷移が望ましいものであるほど、小さな値となる。通常の BM モデルでは、現在と、その前のエネルギーの差(ΔE)が F に対応する。RA モデルでは、問題のシステムに適した評価関数 F が考えられる^{13,6)}。

2.4 自己組織化特徴マップによるニューラルネットワーク(SOM)モデル

自己組織化特徴マップは、 n 次元の入力データ空間 R^n からマップ層と呼ばれる2次元平面上のノード(ニューロン)へのマッピングとして定義される。学習によって入力データ中の似た構成データ同士をマップ層上の近くに配置することができるので、入力データ中の隠れた特徴を自動的に抽出することができるモデルである。

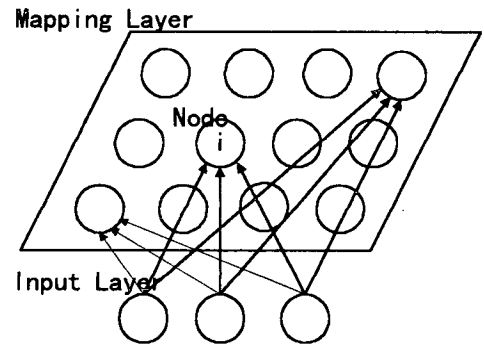


Fig.1 Structure of SOM model

SOM モデルは、Fig.1 に示されるような入力層とマップ層の2層構造のネットワークで構成され、同じ層のニューロン間には結合が無いものと仮定される。学習は、以下のように行われる⁹⁾：①まず、入力層とマップ層との間の重みの初期値を乱数を用いて小さな値に設定する。②次に、入力層に n 個のデータで構成される入力ベクトル $\underline{x}=(x_1, x_2, \dots, x_n)$ を入力する。③マップ層の j 番目のニューロンと入力ベクトルとの距離 d_j を

$$d_j = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - w_{ji})^2} \quad (5)$$

によって計算し、この d_j が最小となるニューロン j^* を選択する。式中、 w_{ji} は入力層の i 番目のニューロンとマップ層の j 番目のニューロンとの間の重みである。④ニューロン j^* とその近傍のニューロンの重みを

$$\Delta w_{ji} = \eta h(j, j^*)(x_i - w_{ji}) \quad (6)$$

$$h(j, j^*) = \exp(-|j - j^*| / \sigma^2) \quad (7)$$

に基づいて更新し、上記③④を繰り返す。学習の進行とともに、式(7)中のパラメータ σ は小さくなり、 $h(j, j^*)$ の範囲が狭くなり、重み学習の粗調整から微調整へと空間的な解像度向上が図られる。

2.5 遺伝的アルゴリズム(GA)

GAモデルでは、問題に対する解(これを表現したものは表現型とも呼ばれる)を、生物の染色体と同様の符号列(通常は1次元コードで、遺伝子型とも呼ばれる)で表し、この符号列に遺伝子進化のアルゴリズムを適用することによって問題解決を図っている。増殖・淘汰、交差および突然変異の3つの基本的な計算オペレータから構成される。流れ図をFig.2に示す⁷⁾。

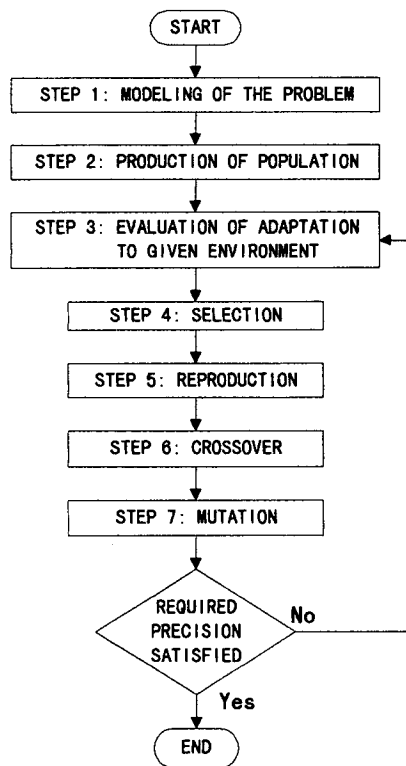


Fig.2 Flow chart of the GA

①まず、STEP 1で、問題に対する解を符号化する。このような符号化の処理は対象問題によって種々の工夫がなされる。②つぎに、STEP 2で、N個の生物個体から

なる初期生物集団を乱数を用いて発生させる。③STEP 3では、発生させた各生物個体の環境への適応度を評価する。④STEP 4とSTEP 5では、淘汰と増殖を行う。具体的には、現世代のN個の個体から、重複を許して、N個の次世代の生物個体を乱数を用いて発生させる。ただし、STEP 3で計算した現世代の各生物個体の適応度に比例してN個の個体を発生させる。⑤STEP 6では、発生させた次世代のN個の個体の中から2つの個体の組をM組だけランダムに選択し、それぞれに対して交差と呼ばれる操作を行う。交差を行う確率は、交差率と呼ばれる。交差は、2つの個体の遺伝子型をランダムな位置で部分的に入れ換える操作である。⑥さらに、STEP 7として、突然変異と呼ばれる操作を実行する。この突然変異の生起確率は突然変異率と呼ばれ、通常、各個体の遺伝子に相当する各ビットを、突然変異率の生起確率で0を1に、あるいは1を0に変更する操作が行われる。Fig.2では、STEP 7までの一連の基本計算の後に、生成された次世代の生物集団が所要の精度を満たしているかどうか判定し、満たしていなければ、さらに一連の基本計算を行い、満たしていれば計算を終了している。

3. 各手法の巡回セールスマン問題(TSP)への適用

本研究では、前節で紹介した種々の ALife 手法を組合せ最適化問題に適用する場合の比較検討をするために、組合せ最適化問題として代表的な巡回セールスマン問題(TSP)を考える。TSP では、N個の都市の間を巡回する最短距離が、最初に出発する都市と最後にたどり着く都市が一致するように探索される。本節では、ALife 手法をTSPに適用する方法を概説する。

3.1 HF、BM および RA モデルの場合

RA モデルは BM モデルを、BM モデルは HF モデルを改良したものであるから、HF モデル、BM モデルおよび RA モデルの全てにおいて用いられる目的関数は、同じである。これらの手法を用いて TSP を解く場合、 $n \times n$ 行列のニューロンが用いられる。すなわち、数値の0と1の要素で構成される行列の行で各都市を、列中の1のある場所でその都市の訪問順序を表している。たとえば、行列Xの要素を x_{Xi} で表した場合、 $x_{Xi} = 1$ はその添字によって都市Xをi番目に訪問することを意味している。ただし、行列の各行、各列には数値の1が一ヶ所にしかないことに注意すべきである。

この問題のエネルギー表現での目的関数は、

$$\begin{aligned} \varepsilon = & \frac{A}{2} \sum_X \sum_i \sum_{j \neq i} x_{Xi} x_{Xj} + \frac{B}{2} \sum_i \sum_X \sum_{X \neq i} x_{Xi} x_{iX} + \frac{C}{2} \left(\sum_X \sum_i x_{Xi} - n \right)^2 \\ & + \frac{D}{2} \sum_X \sum_{Y \neq X} \sum_i d_{XY} x_{Xi} (x_{Y,i+1} + x_{Y,i-1}) \end{aligned} \quad (8)$$

で与えられる³⁾。式中、A、B、CおよびDは定数で、 d_{XY}

は都市 X と Y との距離を表す。上式と式(2)との対応関係から重みを求めることができ³⁾、その重みを用いて式(1)の規則によってニューロンを更新学習し、問題を解くことができる。

本研究で用いた BM モデルにおいては、時刻 t とともに温度 T を減少させる焼きなましのスケジュールとして、以下の3種類のものを考えた：

$$T = k / t \quad (9)$$

$$T = k / \sqrt{t} \quad (10)$$

$$T = k / \log t \quad (11)$$

式中、 k は定数である。

RA モデルにおいては、ある都市からの距離が先の繰り返し時のものより短い場合に小さくなるような評価関数 F を用いた⁶⁾。

3.2 SOM モデルの場合

SOM モデルを用いて TSP を解くには、Angeniol のアルゴリズムを用いることができる⁸⁾が、ここでは、紙面の都合上、その流れ図のみを Fig.3 に示す。

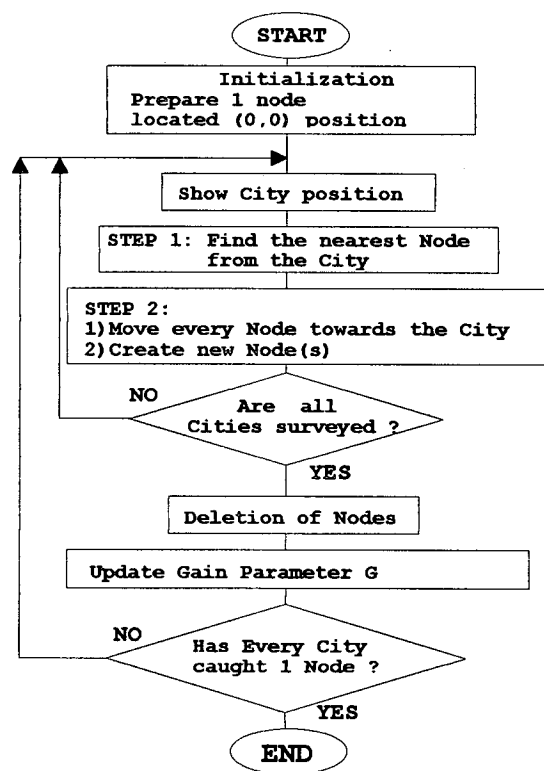


Fig.3 Angeniol's algorithm⁸⁾

3.3 GA モデルの場合

例えば8都市を名前の昇順に巡回する場合、都市訪問の順番を(12345678)で表すものとする。逆の順番に巡回

する場合には、順列(87654321)によって表す。このような記述に従う時、両親 $A=(32461|587)$ と $B=(17462|853)$ との間に記号"|"のある位置で通常の交差を考えれば、その子供として $A'=(32461|853)$ と $B'=(17462|587)$ が生ずることになる。しかしながら、例えば A' では、都市#3 を2度訪問し、都市#7 については全く訪問しないと言う矛盾が生じてくる。GA モデルを用いて TSP を解く場合には、このような矛盾を避けるために種々の手法が考えられている。本研究では、Goldberg によって提案された PMX モデル⁷⁾を用いて、この種の問題を解決した。PMX モデルでは、例えば、 $A=(138|72|456)$ と $B=(752|64|813)$ において記号"|"で示すような2ヶ所の位置を乱数を用いて決め、次のような交差を行う。すなわち、上述のように決められた2ヶ所の位置に挟まれる数字に着目し、7と6、さらに、2と4との間で数字の交換をする交差を考える。その結果は、上述の例では、子供 $A'=(13864257)$ と $B'=(65472813)$ となり、矛盾の無い結果が得られる。

上述の点に気を付け、Fig.2 の流れ図に従えば、GA モデルを用いて TSP を解くことができる。ただし、本研究では突然変異は考えなかった。

4. 数値計算例

8都市の TSP を考えた。計算は、intel 486DX4 (100MHz) の CPU 上で Turbo C++コンパイラを用いて行った。その結果は、Table 1 に示される。

Method	Valid	Optimal	CPU time
Hopfield	4	2	about 2 min.
BM	24	17	about 1 hour
RA	30	28	within 1 min.
SOM	30	27	within 1 min.
GA	30	29	within 1 min.

HF モデルでは、30 回の計算のうち収束し結果が得られた計算が4回、そのうち2回が最適解、もしくは、その近似解を得ることができた。各計算の所要の時間は平均して約2分だった。BM モデルでは、30 回の計算のうち有効な計算は24回で、さらに、その内の約70%が最適解、もしくは、その近似解を得ることができた。特に、式(10)による焼きなましのスケジュールを用いたものが、比較的良好な結果を与えた。しかしながら、BM モデルでの計算時間は、対象としたモデルの中で一番長く、30 回の内の何れの計算でも約1時間を要した。SOM モデルにおいては、Angeniol のアルゴリズムにおいてパラメータ $G=10$ および $\alpha=0.95$ を用いて計算し、100%の計算が有効で、その精度も大変良い結果を得ることができた。RA モデルと GA モデルの場合も殆ど完全な結果を得ることができた。SOM モデル、RA モデルおよび GA モデルの計算時間も、殆ど違いが無く、各計算において1分

以内に計算ができた。

この数値計算例を通じて、SOM モデル、RA モデルおよび GA モデルを用いれば、同様に効率的な計算ができることが分かった。これに対し、BM モデルでは、膨大な時間が必要となることが確認できた。HF モデルを用いた計算は、大半の場合、有効な結果を得ることができなかった。さらに、HF モデルおよび BM モデルを用いる場合には、多くの初期パラメータを設定する必要があることも確認できた。一方、SOM モデル、RA モデルおよび GA モデルについては、計算の前に設定すべき初期パラメータの数は比較的少なく済んだ。特に、SOM モデルと RA モデルを用いれば、GA モデルに比較し、少ない初期パラメータで計算をすることができた。これらの初期パラメータは、経験に基づき決定しなければならないので、必要となる初期パラメータは、少なければ少ないほど適用性の面で有利であると考えられる。GA モデルとニューラルネットワークモデルとのハイブリッド手法により初期パラメータを同時に最適化することも可能であるが⁹⁾、効率性の面では問題が残るものと考えられる。さらに、SOM モデルと RA モデルを用いた解法では、かなりのメモリを節約することができ、同一条件の下で、GA モデルでは余り大きな問題(たとえば 60 都市以上の TSP)をパソコン上で解くことができなかったが、SOM モデルおよび RA モデルを用いた解法では 200 都市以上の大きな TSP を解くことができた。したがって、対象とする問題に対し、まずは SOM モデルあるいは RA モデルの適用を考えべきではないかと考えられる。しかしながら、SOM モデルおよび RA モデルは、対象とする問題によっては適用困難な問題もあることを銘記すべきである。

5. あとがき

本研究では、種々の代表的な ALife 技術の手法を紹介し、それらを比較し、それらの特徴について考察した。ALife の手法としては、(1)ホップフィールド型ニューラルネットワーク、(2)ボルツマン型ニューラルネットワーク、(3)極の緩和の手法を利用したニューラルネットワーク、(4)自己組織化特徴マップの手法を用いたニューラルネットワーク、および、(5)遺伝的アルゴリズムを考えた。

巡回セールスマン問題にこれらの手法を適用する例題により、SOM モデルおよび RA モデルが効率性およびメモリの節約という観点から組合せ最適化問題に有効であることを示した。しかしながら、ここで得られた結果は、限られた条件の下に得られたものであるもので、今後、これらの手法を多くの異なる問題に適用し、各問題に対する適用性について更なる研究が必要になるものと思われる。その際、対象とする問題に対して適当な評価関数等を定める必要がある(式(4)参照)が、その関数に、システムの合理的評価法である情報積算法¹⁰⁾を適用し、効率のかつ汎用性のある手法とすることも考えられる。

謝辞： 本研究は、著者が文部省・在外研究により Colorado 大学 Boulder 校において行った研究の一部である。関係各位に謝意を表す次第である。

参考文献

- 1) 山田義朗、富田悦次、高橋治久：近似最大クリークを抽出する確率アルゴリズムとその実験的評価, Trans. IEE of Japan, Vol. J76-D-I, No.2:46-53, 1993.
- 2) Kohonen, T.: Self-Organizing Maps, Springer, 1995.
- 3) Krose, B.J.A and Smagt, P.P.: An Introduction to Neural Networks, University of Amsterdam, pp.69-75, 1993.
- 4) Matsuda, S.: The Stability of the Solution in Hopfield Neural Network, Proc. of 1993 International Joint Conference on Neural Networks, pp.1524-1527, 1993.
- 5) 萩原将文：ニューロ・ファジィ・遺伝的アルゴリズム, 産業図書, 1994.
- 6) 新田寛、別役廣：確率アルゴリズムによる巡回セールスマン問題の解法, J. of IU-T/SE 01/95, 1995.
- 7) Goldberg, D.E.: Genetic Algorithms in Search, Optimization & Machine Learning, Addison-Wesley Publishing Co., 1989.
- 8) Fujimura, K., Tokutaka, H., Ohshima, Y., Tanaka, S. & Kishida, S.: An Improvement of Algorithm Using Kohonen's Self-Organizing Feature Map for the Traveling Salesman Problem, Trans. IEE of Jpn, Vol. 116-C, No.3, pp.350, 1996.
- 9) 古田均、杉本博之：遺伝的アルゴリズムの構造工学への応用, 森北出版, 1997.
- 10) Matsuho, S. et al.: Reliability-based... Integration Method, Proc. of ICOSAR'93, vol. 1, pp.669, A.A. Balkema, 1994.