遺伝的アルゴリズムと最適化

西川 禕一，玉置 久

1. 最適化の考え方

何らかの意味で望ましい「もの」あるいは「行動」を計画・設計したり実現・実行したりするのが技術の目的であり，そのための手段や方法を体系化するのが工学の役割であるとすれば，「最も望ましくする」つまり「最適化する」という命題が生まれ，その方法を探究するという工学にとって必然的な課題が現われる[1].

最適化を数理的に扱う手法は，ORの分野で昔から重要な研究課題とされてきた．いろいろなタイプの数理計画法がその典型である．数理計画問題では，まずわれわれが決定すべき，あるいは決定できる複数個の決定変数が定義され，次に最小化あるいは最大化すべき目的関数（これは決定結果の良さ，あるいは望ましさを定量化した物指）および決定変数が満たすべきいくつかの制約条件が，数式として表現される．すなわち，制約条件を満たす決定変数の組のうちで，目的関数値を最小あるいは最大にするものを求めよ，という問題である[1].

数理計画問題のうち，変数が連続値(実数値)をとり，すべての数式が線形で表わされる線形計画問題は比較的少ない手数できちんと解ける．しかし，そうでない非線形問題は近傍の連続性にもとづく逐次近似的な方法でしか扱えず，しかも凸性が保証されないと局所最適解が現われたりする厄介さを伴う．また，変数が離散値をとる組合せ最適化問題では，解候補の組数は可付番有限個ではあるが，連続値の場合のような近傍の概念が成り立たないので，原理的には全数探索（可能な場合の列挙）しか手がない．ところが問題の規模，つまり変数の数が多くなると組合せ数は爆発的に増える（たとえば変数の数に対して指数関数のオーダ）から，超高速計算機をもってしても現実には全数探索は不可能である[1,2].

したがって，非線形問題や組合せ問題に対しては，「賢い近似解法」，つまりあまり計算に手数がかからず，しかも安定的によい（必ずしも厳密な最適でなくとも，それに近く現実的に満足できる）近似解を求めうるアルゴリズムが必要とされるのである．

従来からも，問題の特徴を巧みに利用してよい近似解を求めるために，各種のヒューリスティクスがしばしば用いられてきたが，遺伝的アルゴリズム（GA）はよい近似解を求めるための，比較的一般的な枠組みを与える1つの有力なツールである[3,4]．ここでは，組合せ最適化問題へのGAの適用について種々の構成手法を整理しながら解説するとともに，組合せ最適化問題の典型例であり，実際上も重要なジョブショップ型スケジューリング問題（Jobshop Scheduling Problem, JSP）を対象として，GAの応用を紹介する[5,6,7].

2. 組合せ最適化

組合せ最適化問題とは，組合せ的な制約条件の下である目的関数を最小化（または最大化）する数理計画問題であり，一般に次のように記述される[1,2].

$$\min_{x} f(x) \tag{1}$$

$$\text{subject to} \quad x \in F \tag{2}$$

ただし，Fは組合せ条件を含むもので，特にFが整数条件を含む場合は整数計画問題と呼ばれる．

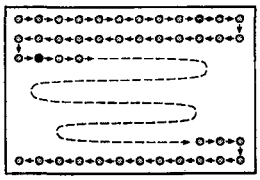
Fが組合せ集合である場合には，実数集合を対象とする場合によく用いられる，連続性や微分の概念にもとづく最適化手法は使えない．したがって，一般には可能解を列挙する方法によらざるをえないが，先にも述べたように，大型の問題に対しては列挙は事実上不可能である．たとえば，n変数の順列の数$n!$は，$n=20$の場合でも約2.4×10^{18}となる．そこで，列挙の範囲をいかに限定するかが重要になる．

従来の最適化手法を厳密性（得られる解の最適性）の観点から見れば，

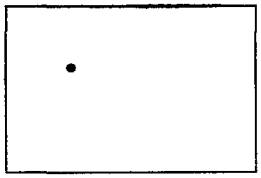
(1) 厳密解法：厳密な最適解を求める方法，

(2) 近似解法：近似最適解を高速に求める方法，

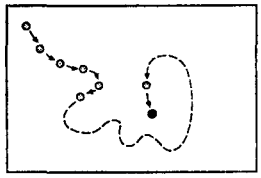
にしかわ よしかず，たまき ひさし
京都大学 工学部 電気工学教室
〒606 京都市左京区吉田本町



(a) 列挙的手法



(b) 発見的手法



(c) 探索的手法

図 1 組合せ最適化手法の基本的考え方
枠が可能領域（解の全体集合），丸が1つの解候補をそれぞれ表わす．また，黒丸は最終的に選ばれる解を表わす．

に大別される．(1)には動的計画法（ＤＰ）や分枝限定法（ＢＡＢ）などがあるが，いずれも広大な解空間をくまなく探索することが基本になり，膨大な計算量（時間）を要する．それに対して，(2)では問題に関する先験情報を利用して探索領域を絞り込むのが基本であるが，質のよい近似解を求めるにはなるべく広い領域の探索が望ましく，一方，計算量を低減するには先験情報によってできるだけ狭い領域に限ることが望ましい．これらはトレードオフの関係にあり，前者を重視するのがランダム探索法（モンテカルロ法）であり，後者に重きを置くのが逐次改善法や欲張り法である．

また，解の探索という観点から見れば，最適化手法は**図1**に示すように，次の3種類に分類される．すなわち

(1) 列挙的手法：厳密な列挙あるいは等価的な列挙によって，厳密な最適解を求める．

(2) 発見的手法：最適解あるいは近似解を生成するためのルールを用いて，ただ1つの解を求める．

(3) 探索的手法：上記2法の中間的方法で，解空間の部分領域を探索することにより近似最適解を求める．

ＧＡは(3)に属するものといえるが，通常の探索法と異なり，ＧＡでは単一の解候補でなくその集団を扱うことによって，先に述べた探索におけるトレードオフに有効な1つの解答を提供することになっている．

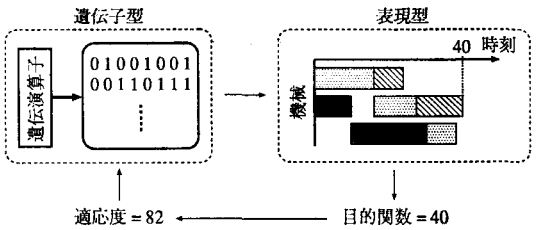


図 2 遺伝的アルゴリズムによる最適化の枠組み
スケジューリング問題を例として取り上げ，表現型としてスケジュール（ガントチャート）を示してある．

3. 遺伝的アルゴリズムによる最適化

ＧＡによる探索の枠組みを**図2**に示す．ＧＡでは，まず問題の解候補を個体の表現型と考え，それに対応する個体の遺伝子型（染色体）を０／１記号列によって表わす．便宜上，今後は個体の遺伝子型を単に個体と呼ぶ．次にM個の個体からなる集合（population）を作り，集合中の個体に対して選択(selection) 交叉(crossover)および突然変異（mutation）演算を繰り返し適用し，適応度（fitness）の高い個体（すなわち質のよい解候補）を逐次生成していく．この過程では，記号列によって表わされる個体全体のみでなく，その部分列（building block）も評価され，個体の適応度を高めるのに役立つ部分列が選択によって同時並列的に増加していくこと（implicit parallelism）も，ＧＡの大きな特徴である[3, 4]．

ＧＡにおける探索過程は，**図3**に示すように探索近傍と探索速度（方向と速さ）によって特徴づけられる．すなわち，

(1) 近傍：表現型から遺伝子型へのコーディングのルール，および交叉演算子と突然変異演算子の実現法によって定まる．

(2) 速度：適応度の定義，定量化（スケーリング）法および選択演算子の実現法によって定まる．

探索における上記のトレードオフを適切にバランスさせ

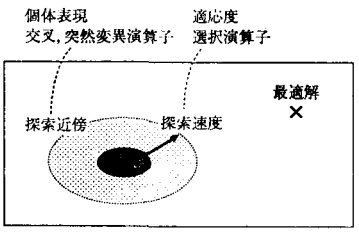


図 3 遺伝的アルゴリズムによる探索

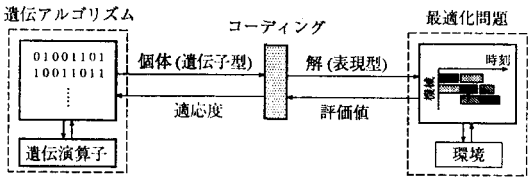


図 4 遺伝的アルゴリズムの標準型構成
解の評価方法（目的関数）などが，問題の環境に含まれると考える．

るためには，特に探索近傍の設計が重要な役割を担うことになる．いいかえれば，コーディングのルールと遺伝演算子との適合性に考慮を払うことが肝要なポイントである．

GAのいくつかの応用事例を検討してみると，対象問題の構造や解の性質の特徴が，遺伝子型へのコーディングおよび演算子の実現に巧みに組み込まれた場合に成功していることがわかる．つまり，現時点でのGAは個々の問題ごとに独自の設計を要求するものである．

3.1 アルゴリズムの標準型構成法

以上のような状況をふまえて，最適化に対するGAの構成手法を4種類に分け，それらの特徴を整理してみよう．標準的な構成手法を**図4**に示した．この過程では，個体の遺伝子型へのコーディングが最も重要であり，演算子には標準的なもの，たとえば1点交叉や1ビット反転による突然変異が用いられる．

3.2 アルゴリズムの問題依存型構成法

効率的なアルゴリズムの構成，あるいはヒューリスティクスとの融合を図るには，**図5**のように探索空間を問題の解空間そのものとし，問題固有の遺伝演算子を実現する方法が有効である．この問題依存型の構成は，問題や解について十分な知見が得られている場合には有力な手段であり，これまでの応用研究はこの手段によるものが多い．

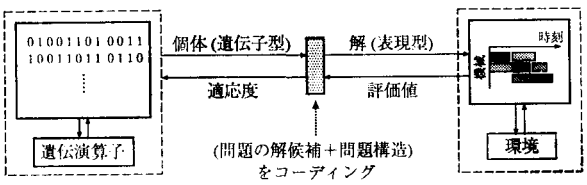


図 6 遺伝的アルゴリズムの自己組織型構成
見かけ上は標準型構成と同じであるが，問題の解候補および問題の構造を遺伝子型としてコーディングしている点が異なる．

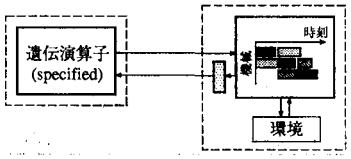


図 5 遺伝アルゴリズムの問題依存型構成

3.3 アルゴリズムの自己組織型構成法

問題について十分な予備知識がない場合には，問題の構造を表わすパラメータをも遺伝子型に含めておき，探索の過程を通して自己組織的に解に関する知見をアルゴリズムの枠内に取り込む，たとえば探索近傍の設計を自律的に行なわせるようにすることが必要である．今までのところ，このような考え方にもとづく研究はほとんどなく，構造パラメータの表現法などについても未解明の部分が多い．しかし，GAと他の探索法との違いを明確にしアルゴリズムの有効性を明らかにするうえからも，**図6**のような自己組織型構成法は今後の重要な研究課題である．

3.4 アルゴリズムの強化学習型構成法

上記の3種類の探索型GA構成法とは全く異なるものとして，GAによって最適解を求めるためのルールベースを構築する枠組み，すなわち学習型GAとも呼ぶべき方法がある．これは，強化学習と呼ばれる枠組みに属するもので，探索型GAと学習型GAの相違点は次のようにまとめられる．

(1) 探索型：個体を問題の解候補に対応させる．適応度による個体の評価は比較的容易である．

(2) 学習型：個体を探索のルールあるいはルールの集合に対応させる．そのときは，個体と解候補が1対1に対応しないので，個体の評価が困難である．

学習型GAの構成を**図7**に示す．このアルゴリズムでは，各ルールはルール強化（評価）機構によってそのよさに応じた報酬を与えられ，各ルールが受け取った報酬の総量に応じてその適応度が算定される[3]．こ

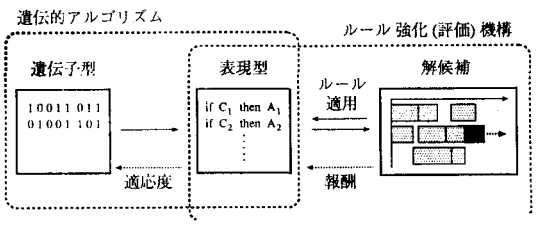


図 7 遺伝的アルゴリズムの強化学習型構成

表 1　スケジューリング問題の例

仕事	作業(機械, 処理時間)		先行仕事
J_1	$O_1(M_1, 5)$	$O_2(M_2, 4)$	—
J_2	$O_3(M_1, 3)$	$O_4(M_2, 4)$	—
J_3	$O_5(M_3, 2)$	—	J_1, J_2

の枠組みは，ルールベース・システムにおけるルールの自動評価・自動獲得を可能にするものとして注目に値するが，ルール強化機構の実現に困難を伴うので，今後の研究に待つところも多い．

4. スケジューリング問題への応用

この節では，スケジューリング問題への応用を通して，アルゴリズムの構成例を具体的に紹介しよう．

4.1 スケジューリング問題

生産や建設のプロジェクトを完成する工程では，いく種類かの機械を使って，工程の単位となるいくつかの仕事（job）を順序よく進めていかねばならない．何らかの基準（たとえばプロジェクトの完了時間）に照らして，最も適切に各機械上における各仕事の順序を決定する問題がスケジューリング問題である．なお通常，いくつかの仕事の間には，先行関係（ある仕事を始めるには，これだけの仕事が終っていなければならないという関係）が指定されている．

スケジューリング問題のうち，複数台ある機械の機能がすべて同じ場合を並列機械型，機械の機能が異なる場合をショップ型という．さらにショップ型のうち，すべての仕事で使用機械の順序が同じものをフローショップ型，仕事ごとに機械の順序が異なるものをジョブショップ型，どの仕事でも機械の順序が自由なものをオープンショップ型と呼ぶ．

4.2 GAの標準型構成の例

筆者らは，ジョブショップ型スケジューリング問題を選択グラフによって表現し，それにもとづいてGAを適用する1つの方法を提案した[5,6]．グラフによる表現は，問題の直感的理解のためにもきわめて有用である．まず，仕事を節点に対応させ，あらかじめ決められている仕事間の先行関係を節点間の有向弧で表わす．問題の決定変数に相当するのは，同一機械上で処理される2作業間の先行関係であって，それを選択弧と呼ばれる有向弧の対で表わしておく．一例として，**表1**の例題を選択グラフで表現したのが**図8**である．図中の破線が選択弧対を表わしている．

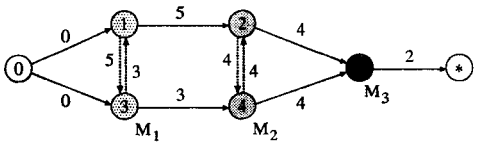


図 8　スケジューリング問題の選択グラフ表現
節点0および＊は，それぞれ開始および終了を表わすダミー節点である．

選択グラフ表現した問題では，ある選択弧対から一方の弧を除去すること（選択弧対の解消）で1つの決定変数が定まり，グラフ中に閉路が生じないようにすべての選択弧対が解消されたとき，1つの実行可能なスケジュールが与えられる．

さて，選択弧対の解消方向を0と1で表わし，0あるいは1を選択弧対の数だけ並べた記号列を個体の遺伝子型とする．この遺伝子型によって直接グラフを構成すると(表現型にデコードすると)，高い割合で閉路が生じてしまう．特にGAにおいては，初期個体集合で閉路を含まないような個体ばかりを選んだとしても，交叉や突然変異演算をほどこせば，閉路を含む個体が頻繁に生まれるであろう．そこで，筆者らはデコーディングのルールに工夫を加えて閉路が発生しないようにした．そのルールによれば，遺伝子型にはデコーディングの際に参照されない記号(遺伝子)がいくつか含まれることになる[5]．つまり，遺伝子型は冗長性をもつことになり興味深い．

なお，この方法によれば，スケジュールとして望ましいアクティブ・スケジュールの1つが得られることが保証される．換言すれば，以上の標準型設計法はアクティブ・スケジュールという解の性質を利用して，GAの探索領域を限定したことになっている．

4.3 GAの問題依存型構成の例

紙数の都合で詳細は省略するが，スケジューリング問題に対する問題依存型GA構成法の例として，山田と中野によるアルゴリズム[8]を挙げることができる．このアルゴリズムの特徴は，問題の表現型であるガントチャートをそのまま個体の遺伝子型に対応させる点であり，その遺伝子型にもとづくアクティブ・スケジュール生成手順に交叉および突然変異演算子を組み込むことによって，探索領域をアクティブ・スケジュール集合に限定し得ている．さらに，標準型におけるような遺伝子型の冗長性がないので，探索効率の点ではさらに優れたものになっている．

5. おわりに

本稿では，組合せ最適化に対するＧＡの特徴を整理するとともに，考えうるアルゴリズムの構成法を分類してみた．そのうえで，組合せ最適化問題の典型例であるジョブショップ型スケジューリング問題（ＪＳＰ）を取り上げて，具体的なＧＡの適用例を紹介した．ＪＳＰの解法として常にＧＡが最も優れていると主張するつもりはないが，問題とその解の性質についての予備知識を適切に利用し，遺伝子型へのコーディング法や遺伝演算子の実現法などに工夫を加えれば，有用なツールになりうることは確かであり，興味深い．

逆にいえば，各種の問題に対して標準的あるいは万能ともいえる手法が確立されていて，誰でもいつでもそれを機械的に適用すれば問題が効率的に解けるわけではない．ＧＡは未だそれほど成熟の段階に達してはいない．ＧＡのポテンシャルを掘り起こし，その利点と欠点について見きわめるには，なお多くの興味ある研究課題が残されている．

なお，ＧＡは並列化の比較的容易なアルゴリズムであり[7]，その点についても言及すべきであるが，ここでは一切割愛した．

参考文献

[1] 西川禕一，三宮信夫，茨木俊秀：最適化，岩波書店(1982).

[2] 茨木俊秀：組合せ一最適化分枝限定法を中心として一，産業図書 (1983).

[3] D. E. Goldberg : Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning, Addison-Wesley (1989).

[4] 西川禕一：生物の進化と遺伝的アルゴリズム，科学，63巻，3号，pp.147-155 岩波書店 (1993).

[5] 西川禕一，玉置久：ジョブショップ型スケジューリング問題に対する遺伝アルゴリズムの一構成法，計測自動制御学会論文集，27巻，5号，pp.593—599 (1991).

[6] 西川禕一：ＧＡのスケジューリング問題への応用，計測と制御，32巻，1号，pp.46—51 (1993).

[7] 西川禕一，玉置久：近傍モデルによる遺伝アルゴリズムの並列化手法とそのジョブショップ・スケジューリング問題への応用，計測自動制御学会論文集，29巻，5号，pp.589—595 (1993).

[8] T. Yamada and R. Nakano : A Genetic Algorithm Applicable to Large-Scale Job-Shop Problems, Parallel Problem Solving from Nature (PPSN), 2, pp. 281—290, Elsevier (1992).