2008－MPS－69　(2)
2008／5／16

DIRECT法の多目的最適化問題への拡張

廣安 知之[†]，王 路易[††]，石田 裕幸[††]，三木 光範[‡]

[†] 同志社大学生命医科学部　[††] 同志社大学大学院　[‡] 同志社大学理工学部

多目的最適化問題の目標はパレート最適解を導出することである．しかしながら，実問題などの多くの多目的最適化問題において，パレート最適解が未知であるため，得られたパレート解が最適であるかどうかを判断できない．そこで，本論文では信頼性の高いパレート解を導出できる多目的最適化手法の開発を目指す．導出されたパレート解の信頼性を向上させるには，探索空間のランドスケープが重要となるため，探索空間の情報を得られる探索が必要と考えられる．そこで，探索空間のランドスケープを得られる単一目的最適化手法 DIRECT（DIviding RECTangle）が注目されている．本論文では DIRECT を多目的最適化に適用した多目的 DIRECT 手法 NSDIRECT（Non-dominated Sorting DIRECT）を提案する．NSDIRECT はパレート的アプローチを用いた手法であり，その特徴として非優越ソート (Non-Dominated Sort) によるランキングと混雑距離 (Crowding Distance) が挙げらる．NSDIRECT の性能を検証するために Angelo らの MODIRECT（Multi-Objective DIRECT）と比較し数値実験を行った．その結果，NSDIRECT は MODIRECT より正確に探索空間のランドスケープを表すことができ，また解集合の精度に改善が見られた．

Tomoyuki HIROYASU[†]，Luyi WANG[††]，Hroyuki ISHIDA[††]，Mitsunori MIKI[‡]

[†] Department of Life and Medical Sciences, Doshisha University
[††] Graduate School of Engineering, Doshisha University
[‡] Department of Science and Engineering, Doshisha University

The goal of multi-objective optimization problems is to obtain pareto optimal solutions. However, in many optimization problems like real world problems, optimal solutions are unknown, so it is hard to judge whether the obtained solutions are truly optimal or not. In this paper we propose an optimization method that is capable of obtaining pareto solutions with high reliability. The landscape of the search space is important to improve the reliability of the obtained solutions, therefore a search that obtains information of the search space becomes necessary. From this reason a single objective optimization method called DIRECT has attracted much attention in this field. In this paper, we propose a multi-objective DIRECT algorithm called NSDIRECT (Non-dominated Sorting DIRECT), which adapts DIRECT to multi-objective optimization. NSDIRECT is a method that uses pareto approach and utilizes Non-dominated Sort and Crowding Distance. The effectiveness of NSDIRECT was examined through numerical experiments comparing with MODIRECT (Multi-Objective DIRECT) proposed by Angelo. From the conducted numerical experiments, it was found out that the landscape information of the search space obtained by NSDIRECT is more accurate, and the accuracy of the obtained solutions are also improved.

1　はじめに

複数の評価基準を同時に考慮しながら最適化を行う問題を多目的最適化問題という.[1)] 多目的最適化問題では，複数の評価基準は互いに競合する場合が多く，全ての評価基準が同時に最適となる解は存在しないため，他の解に劣らない解であるパレート最適解の集合を求めることが目標の１つとなる．

しかしながら，多くの多目的最適化問題ではパレート最適解が未知であるため，得られたパレート解が最適であるかを判断することは困難である．そこで，導出されたパレート解は高い信頼性を有することが求められる．導出されたパレート解の信頼性を向上させるためには，探索空間のランドスケープを把握することが重要である．ランドスケープの情報を得られる手法として DIRECT[2)] (DIviding RECTangle) が知られている．DIRECT を多目的最適化に適用した手法として Angelo らの MODIRECT(Multi-Objective DIRECT) がある．

DIRECT は超立方体の分割の際の判断基準として Lipschitz 係数を用いる．Lipschitz 係数は目的

関数によって計算され，各超立方体に対して１つが決定される．そのため，MODIRECT は複数存在する目的関数によって得られた複数の Lipschitz 係数各々に重み付けを行い，それらの重み和を用いることで対応している．しかしながら，このような方法では各目的を平等に扱えないため，部分的なパレート解しか導出できず，正確な設計変数空間のランドスケープを把握することが困難である．

上述した MODIRECT の問題点を解決するため，本論文では解の優越関係に基づいて適合度を割り当てるパレート的アプローチを用い，DIRECT を多目的最適化に適用した NSDIRECT（Non-dominated Sorting DIRECT）を提案する．また，数値実験を行い，NSDIRECT の有効性について検証する．

2　パレート解を陽に扱う DIRECT 法の多目的最適化問題への拡張

2.1　多目的 DIRECT

信頼性を有するパレート解を導出するには，探索空間のランドスケープの情報を得ることが必要と考えられる．探索空間のランドスケープを得ることにより，対象問題の特徴や性質を把握することができ，最適解が存在する領域を大まかに特定することを可能にする．従って，信頼性の高いパレート解を導出するために，探索空間のランドスケープを把握できるような探索を行うことが重要と考えられる．

探索により探索空間のランドスケープを把握できる探索手法として DIRECT が知られている．多目的最適化に DIRECT を適用したものが多目的 DIRECT であり，これまでに開発された多目的 DIRECT 手法として，Angelo らの MODIRECT(Multi-Objective DIRECT) が知られている．それに対して，本論文ではパレート解を陽に扱う多目的 DIRECT 手法 NSDIRECT（Non-dominated Sorting DIRECT）を提案する．なお，紙面の都合上，ここでは NSDIRECT の説明のみを行う．

2.2　NSDIRECT

NSDIRECT は多目的 GA 手法の NSGA-II[3] で用いられている非優越ソート (Non-Dominated Sort) によるランキングと混雑距離 (Crowding Distance) によって，解の優越関係を求め，適合度を割り当てるパレート的アプローチを用いた多目的 DIRECT 手法である．DIRECT では超立方体/超直方体の中心点の評価値を基準として分割を行うのに対して，NSDIRECT では次の２つを用いる．

1. 中心点の非優越ソートによる適合度値 (Rank)
2. 中心点の混雑距離 (CD)

また，DIRECT からの改良点として，超立方体の分割方法，超直方体の分割方法，分割すべき超立方体/超直方体の特定方法が挙げられる．以降に，改良点の詳細を述べる．

2.2.1　超立方体の分割方法

NSDIRECT では，超立方体を各次元において３等分する $c_1 \pm \delta \vec{e_i} (i = 1, 2, ..., n)$ の点を設定し評価する．このとき $\vec{e_i}$ は基底ベクトル，δ は超立方体の一辺の 1/3 の長さである．分割すべき次元の順番は各点における非優越ソートによる適合度値を用いた式 (1) の R_i で定義されており，R_i の値が小さい次元から分割が行われる．R_i が等しい場合は各点の混雑距離を用いた式 (2) の C_i によって決定され，C_i の値が大きい次元から分割が行われる．

$$R_i = \min(\mathrm{Rank}(c_1 + \delta e_i), \mathrm{Rank}(c_1 - \delta e_i)) \qquad i = 1, 2, ..., n \tag{1}$$

$$C_i = \max(\mathrm{CD}(c_1 + \delta e_i), \mathrm{CD}(c_1 - \delta e_i)) \qquad i = 1, 2, ..., n \tag{2}$$

2.2.2　超直方体の分割方法

超直方体の分割では，最も長い辺を持つ次元についてのみ分割が行われる．分割の基準となるのは，超立方体の場合と同様に，非優越ソートによる適合度値と混雑距離である．最長な辺をもつ次元が複数存在する場合，分割は式 (3) の R_j が小さい順に行われる．また，R_j が等しい場合は式 (4) の C_j の値が大きい次元から分割が行われる．

$$R_j = \min(\mathrm{Rank}(c_i + \delta_i e_j), \mathrm{Rank}(c_i - \delta_i e_j)) \qquad j \in I \tag{3}$$

$$C_j = \max(\mathrm{CD}(c_i + \delta_i e_j), \mathrm{CD}(c_i - \delta_i e_j)) \qquad j \in I \tag{4}$$

ここで I はある超直方体 i における，最長の辺をもつ次元の集合である．また，δ_i は超直方体 i の最長の辺の 1/3 の長さである．NSDIRECT では I に含まれるすべての次元に対して分割を行う．

2.2.3　分割すべき超立方体/超直方体の特定方法

NSDIRECT では次の条件を満たすすべての超立方体/超直方体を Potentially Optimal と定義し，分割する．

ϵ を $\epsilon > 0$ なる定数とするとき，次の式 (5) を満たす $K > 0$ が存在すれば，ある超立方体/超直方体 j は Potentially Optimal である．

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Rank}(c_j) - Kd_j \le \mathrm{Rank}(c_i) - Kd_i, \mathrm{and} \\
&\mathrm{Rank}(c_j) - Kd_j \le 1 - \epsilon, \mathrm{and} \\
&\mathrm{if}(d_j = d_i \ \ \mathrm{and} \ \ \mathrm{Rank}(c_j) = \mathrm{Rank}(c_i)) \\
&\mathrm{then}(\mathrm{CD}(c_j) \ge \mathrm{CD}(c_i)), \forall i
\end{aligned} \tag{5}$$

ここで，c_j は超立方体/超直方体 j の中心点である．d_j には中心点 c_j から頂点までの距離を用いている．本論文では，$\epsilon = 1.0 \times 10^{-4}$ とする．この定義を図で示したものを図 1 に示す．

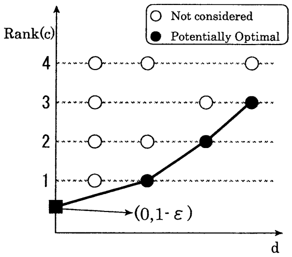


図 1: 分割すべき超立方体/超直方体の特定方法

図 1 の横軸は式 (5) における d に，縦軸は Rank(c) に相当する．つまり，Potentially Optimal な超立方体/超直方体は，この平面上のすべての超立方体/超直方体の凸包の下部を形成している．また，ϵ の値により，Rank(c) $= 1$ となる超立方体/超直方体が必ずしも Potentially Optimal とはならないことがわかる．これにより，局所探索と大域探索のバランスがとられている．

3　数値実験

提案手法である NSDIRECT の有効性を検証するために MODIRECT と比較し，数値実験を行う．導出された解集合の精度および探索履歴によって表されるランドスケープの正確さの 2 点について検討する．まず 1 つ目の検討事項では，2,3,5,10 次元における各手法によって導出された解集合の精度を比較し，検討を行う．次に，2 次元における各手法の探索履歴をテスト関数のランドスケープと比較し，得られたランドスケープの正確さを検討する．

3.1　対象問題と評価方法

本実験で用いる対象問題は，Deb の提案した 2 目的の連続最適化問題である ZDT2 と，ZDT4 である．ZDT2 は単峰性で非凸型のパレートフロントを有する問題であり，ZDT4 は多峰性で凸型のパレートフロントを有する問題である．また，得られたパレート解集合を評価する方法としては Generational Distance（GD）を用いる．GD は探索によって得られたパレートフロントが，パレート最適フロントからどれだけ離れているかを示す評価指標であり，解の精度を表す．GD 値が小さいパレートフロントほどパレート最適フロントに近く GD=0 のときにパレート最適フロントに到達していることを意味する．

3.2　実験パラメータ

本実験では 2,3,5,10 次元の対象問題を用いる．各次元における評価回数を表 1 に示す．

表 1: 各次元における評価回数

Dimension	Number of function evalutions
2	5000
3	10000
5	20000
10	30000

3.3　導出されたパレート解の精度についての検討

各手法による 2,3,5,10 次元での ZDT2 と ZDT4 の GD の結果をそれぞれ表 2，表 3 に示す．

表 2: ZDT2 での各次元における GD の結果

Dimensions	MODIRECT	NSDIRECT
$N = 2$	0.049	0.006
$N = 3$	0.167	0.032
$N = 5$	0.412	0.198
$N = 10$	1.127	0.578

表 3: ZDT4 での各次元における GD の結果

Dimensions	MODIRECT	NSDIRECT
$N = 2$	0.051	0.006
$N = 3$	0.987	0.413
$N = 5$	2.780	1.012
$N = 10$	7.912	1.836

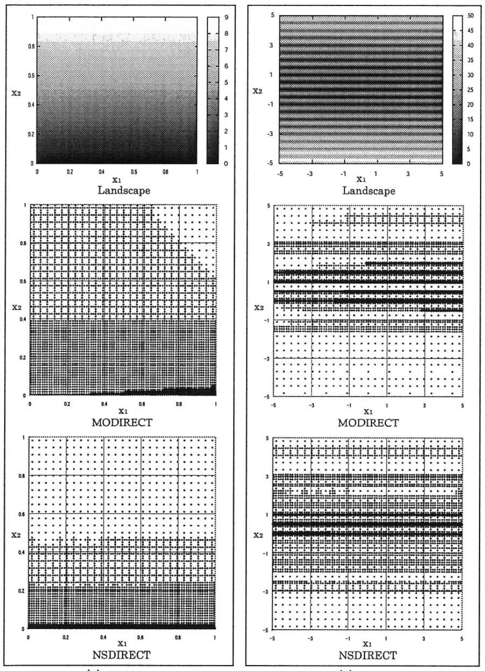
表 2 と表 3 に示した各次元における GD 値から，NSDIRECT ではパレート解の精度が改善されたことが分かった．これは，NSDIRECT がパレート的アプローチを用いるため，パレート解を適切に評価しながら探索を進めることにより，探索が偏ることなく，収束するからであると考えられる．しかしながら，次元数の増加につれ，各手法によって導出されたパレート解の精度が低下していることが分かる．これは，次元数が増えることによって探索空間が広くなり，収束に必要な評価回数が大きく増加するため，限られた評価回数の中で両手法は収束しきれていないためと考えられる．

表 2 と表 3 に示した両テスト問題において GD の値は 0 となっていないことが確認できた．つまり，得られたパレート解はパレート最適フロントに到達していない．その理由として，NSDIRECT および MODIRECT によって得られる解は超直方体の中心点のみであるため，超立方体/超直方体の

辺上に位置する解は求められないことがあげられる．ZDT2 と ZDT4 のどちらのテスト問題においても，パレート最適フロントは超直方体の辺上に存在するため，求めることができない．

3.4 探索履歴によって表されるランドスケープの検討

次に，探索履歴によって表されるランドスケープについて検討する．ZDT2 と ZDT4 のランドスケープおよび各手法による 2 次元での設計変数空間における探索履歴を図 2 に示す．ZDT2 と ZDT4 のランドスケープでは色が濃くなるほどパレート最適解に近いことを意味し，良好な解が存在する領域であることを示す．これにより，ZDT2 と ZDT4 の各パレート解は x_2 の値が一定となる平行な線上に位置することがわかる．各手法によって得られた探索履歴では細かく分割されている領域ほど良好な評価値を示し，これによってランドスケープを把握することができる．



(a) ZDT2　(b) ZDT4

図 2: 2 次元おける ZDT2 と ZDT4 の探索履歴

図 2 に示した ZDT2 の結果から，MODIRECT の探索履歴では x_2 の値が小さく，x_1 の値が大きい領域が細かく分割されていることが分かる．2 次元の ZDT2 と ZDT4 では x_1 の値が f_1 に，x_2 の値が f_2 に対応しているため，MODIRECT の探索は f_2 の値が小さい領域，つまり f_2 において優れた領域に集中していることがわかる．このように，同一パレートフロントにおいて探索が特定の目的に偏り，正確なランドスケープを求めることができない．この原因として，ZDT2 では 2 つの目的のとる範囲が $f_1 \in [0,1]$，$f_2 \in [0,10]$ であり，ZDT4 においても $f_1 \in [0,1]$，$f_2 \in [0,50]$ であることから，f_2 のとる範囲が f_1 よりも広いことが考えられる．MODIRECT において，分割すべき超立方体/超直方体を特定する際に各目的における Lipschitz 係数 K の重み和を用いるため，とりうる値の範囲が広い f_2 の方が強く影響することになる．その結果，探索が f_2 に偏ったと考えられる．それに対して，NSDIRECT はパレート的アプローチを用いるため，同一パレートフロントに属する解に同じランクを与え，全ての目的を平等に扱う．したがって，探索が偏らず，正確なランドースケープを表すことができた．その結果，パレート最適解だけでなく，局所パレート解の位置も大まかに把握できた．

以上の結果より，提案手法の NSDIRECT は従来手法の MODIRECT よりも精度の高い，多様性のあるパレート解を導出することができると言える．

4 終わりに

本論文では，DIRECT を多目的最適化問題に適用した NSDIRECT を提案し，検証を行った．NSDIRECT はパレート最適解だけでなく，局所パレート解の位置も大まかに把握でき，MODIRECT よりも正確にランドスケープを把握することができた．また，導出された解集合の精度について検討した結果，NSDIRECT は MODIRECT より精度の高いパレート解集合を導出できることが確認できた．しかしながら，次元数の増加によって，導出されるパレート解の精度が低下することが，数値実験から分かった．そこで，今後は精度を維持しながら高次元にも対応していくことが課題として挙げられる．

参考文献

1) 坂和正敏. 離散システムの最適化. 森北出版, 2000.

2) D.R. C.D. Perttunen Jones and B.R. Stuckman. *Lipschitzian optimization without the Lipschitz constant.* Joural of Optimization Theory and Applications, Vol.79,No.1,pp.157-181. 1993.

3) K. Deb, S. Agrawal, A. Pratab, and T. Meyarivan. A Fast Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm for Multi-Objective Optimization: NSGA-II. In *KanGAL report 200001, Indian Institute of Technology, Kanpur, India*, 2000.