

B-03

NEAT におけるトポロジ距離, 種ランク付けを用いた Niching 手法

A proposal of Niching with attaching ranks to species and using topology distance for NEAT

楠本 直輝[†]
Naoki Kusumoto

ラック・ターウォンマツト[†]
THAWONMAS Ruck

1. はじめに

進化型神経回路網は, 進化的アルゴリズムを用いてニューラルネットワークを最適化する手法であり, 現在では多くの学習問題, ベンチマーク問題に有効で成功例がいくつも挙げられている. しかし, 進化型神経回路網は, しばしば初期収束という問題に遭遇する. 初期収束とは, 進化的アルゴリズムにも共通する問題であり, 解集団が大域的最適解を発見する前に一つの局所的な解に陥ってしまい, 解探索が滞る現象である. この初期収束を回避するために Niching 手法という技術の研究が行われている.

典型的な Niching 手法としては, 探索集団内の多様性を維持することである. 多様性を維持することで解探索を分散させより大域的に探索を行えるようにする. また局所に陥った場合でも, 解探索を別の方向に向かわせ滞りを防ぐ.

本研究では, 進化型神経回路の一つである NEAT[1]を取り上げる. NEAT には, 「種分化」と「適応度共有」の二つの Niching 手法が取り入れられている. NEAT の解探索性能を上げるために, Niching 手法の改良, 交差の改良, 基底関数の導入など様々な研究が行われている.

Niching 手法の関連研究として, NEAT の種分化に用いられるトポロジ類似度の代わりに環境に対する振る舞いを用いる手法[2]が提案されている. これにより解探索の集団が既存 NEAT よりも多様な振る舞いをする事が確認された. 本論文は, 種ランク付けを用いた Niching 手法[4]における「種ランク付け」において, 種ランク付けの解探索への影響を調査し, また新たに別のアプローチを提案し NEAT の Niching 手法の改良を試みその結果の報告をする.

2. NEAT

2.1 NEAT の Niching

NEAT の Niching 手法として先ほど述べたように「種分化」と「適応度共有」の二つがある. 前者は革新的なトポロジの保護が, 後者はトポロジの多様性維持が目的である.

種分化は集団内に種を生成し, トポロジの類似する個体を種に振り分けていく. 種をまたいだ交差はできないという決まりを持っており, 個体間の生存競争は, その種の内部に限定される. そのため革新的なトポロジが生成された場合, 種分化により自身を含む新たな種を形成し, 他の種に属する個体との競争を避けることができる.

個体の種への所属基準としては, トポロジの類似度を定量的に測る尺度を用いる. 二つの個体 i, j のトポロジ距離 $\delta_T(i, j)$ は, 次式で求められる.

$$\delta_T(i, j) = \frac{c_1 E}{N} + \frac{c_2 D}{N} + c_3 \bar{W} \quad (1)$$

ここで各変数は, i, j 両個体の共有しない遺伝子の, 不足する遺伝子数 D , 超過する遺伝子数 E , そして両個体の共有する遺伝子の平均結合強度差 \bar{W} である. c_1, c_2, c_3 は定数, N は正規化項である. 本研究では[1]に準拠して慣例的に N は 1 とする.

適応度共有は各個体の適応度をペナルティとして, その個体が属している種の規模で割る. 前提として, NEAT の交叉の際の個体生成機会は, 各個体の適応度に応じて与えられる. 大規模種には適応度にペナルティを大きく与え, 小規模または新種には, 適応度のペナルティを小さくする. この適応度の補正によって, 小規模または新種に属する個体へ交叉による個体生成機会を多く与えることによって, 個体群の多様性を維持することができる.

適応度のペナルティを与える方法として, ある個体 i の修正後の適応度 f_i' は, 修正前の f_i を式(1)で定義したトポロジ距離による同種の規模数で割るものである.

$$f_i' = \frac{f_i}{\sum_{j=1}^n sh(\delta_T(i, j))} \quad (2)$$

ここで n は設定した個体数であり, 共有関数 $sh()$ は, 以下のように定義された関数である. ここで, δ_T はあらかじめ設定された閾値である.

$$sh(\delta_T(i, j)) = \begin{cases} 0 & \text{if } \delta_T(i, j) > \delta_t \\ 1 & \text{else} \end{cases} \quad (3)$$

2.2 Niching による解探索

図 1 は, NEAT の世代ごとの種の規模分布を表したものである. 図 1 より, NEAT の種生成は, 新種または小規模種が増えていく傾向にある. また世代が進むにつれて種の数は増加していく. 図 1 の世代の途中で種数が 1 になっている箇所は, NEAT の 50 世代以上適応度の増加が見られない場合一度種を全滅させる機構によるものである.

これらの特徴は, 個体の適応度を種に属する個体で割る適応度共有により, 新種または小規模種の個体が子を生ずる機会を多く与えられ, 中規模または大規模種は, 世代を追うことに淘汰されるためである. 中規模以上の種であっても探索を進めるうちに最適解を発見できる可能性はあるが, 適応度共有の sh 関数により早い段階で淘汰されるのである.

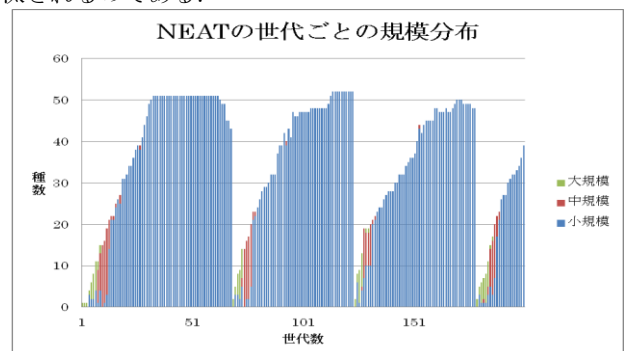


図 1: NEAT の世代ごとの種規模分布例

3. 提案手法

NEATにおける既存の適応共有の新・小規模種への偏りによる解探索の滞りの問題点を改善するために2つのNiching手法を提案する。2つの手法はそれぞれアプローチが異なるが新・小規模種への偏りを改善し解探索の効率化を図ることを根本においている。ただし、提案手法導入部分以外のその他全てのアルゴリズムは、既存NEATのものを用いる。

3.1 種ランク付けを用いたNiching

既存の適応度共有による新種または小規模種への偏りの改善と解探索が進めば解の発見に繋がる可能性のある中規模または大規模種にも次世代への子の生成機会を与えるようにするNichingが必要である。そこで種にランクを付けてランクごとに適応度のペナルティを与えることを提案する。種のランク付けの項目は、種の規模だけでなく多角的に評価するために4つの項目とする。これらは、種の規模、種の平均適応度、種の平均適応度上昇率、種の世代経過数である。4つの項目ごとに種を評価し、それぞれの項目においてランク基準を設けランクポイントを割り振る。表1にそれぞれの評価項目とランクポイントの振り分け基準を示す。

表1において、種の規模の項目の N は、世代ごとの最も規模が大きい種の値を3で割った値であり、種の平均適応度の N は、世代ごとの最も平均適応度が高い種の平均適応度の値を3で割った値である。

種の規模では、その世代の最も大きい規模の種の値を基準にその他の種がいずれかのランクポイント基準に属するかを評価する。種の規模が小さい方が高いランクポイントを得る。

種の平均適応度では、種に属する個体の適応度を合計し平均値を求め、最も高い平均値を持つ種の値と最も低い平均値を持つ種の値をもとに0~1の間で正規化し、正規化値をもとにランクポイントを振り分ける。種の平均適応度が高い方が高いランクポイントを得る。

種の平均適応度上昇率では、各種の平均適応度において前世代と現世代の平均適応度から上昇率を求め上昇率ごとにランクポイントを振り分ける。前世代よりも平均適応度が上昇すれば高いランクポイントを得る。

種の世代経過数では、種が生まれてから何世代経過したかをみる。新種は、高いランクポイントに振り分ける。NEATには15世代以上経過した種には適応度共有とは別に非常に高いペナルティを自動的に割り当てる機構を持っているためランク基準は15世代を基準として2分割した基準を設けている。

これら4つの項目により各種を評価し、それぞれランクポイントを各項目で計算し、それらを足し合わせ合計値に応じたペナルティを与える。表2に、各ランクポイントとランク付け基準、さらにそれぞれのランクに応じたペナルティを示す。

種ランク付けを用いたNiching手法[4]の今後の課題においてあげられていた、4項目においてどの項目が解探索性能に影響を及ぼしているのかを今回は事前に調査した。4項目の組み合わせ全15パターンにおいて、後述するAuto-MPG, Housingのベンチマーク問題において性能比較を行い性能が最も高かった項目の組み合わせを採用した。また、ランク付け基準は組み合わせる項目の数により変更する。例えば、3項目の場合は、ランクポイント3~4

をランク3、ランクポイント5~7をランク2、ランクポイント8~9をランク1とする。ランク毎のペナルティは同じである。また、この実験でのパラメータ設定は、本論文の4章の設定に従う。

4項目組み合わせの全15パターンの性能比較の実験の結果を表3に示す。ここで、 $AvgF$ は種の平均適応度、 $AvgFL$ は種の平均適応度上昇率、 SS は種の規模、 SA は種の世代経過数である。結果の値は、平均二乗誤差を示している。後述する実験と結果を算出する方法と同じである。結果より本研究では、 $AvgFL$ すなわち種の平均適応度上昇率の1項目を採用する。

表1: 評価項目とランクポイント振り分け基準

ランクポイント	種の規模	種の平均適応度	種の平均適応度上昇率	種の経過世代数
3	N 未満	0.7以上	1.0以上	1世代(新種)
2	N 以上 $2N$ 未満	0.3以上 0.7未満	1.0	2~8世代
1	$2N$ 以上	0.3未満	1.0未満	9世代以上

表2: ランク付け基準とランク毎のペナルティ

ランクポイント合計値	ランク	ペナルティ
10~12	1	世代毎の種の最小値
7~9	2	(世代毎の種の最大値+最小値)/2
4~6	3	世代毎の種の最大値

表3: 4項目組み合わせ15パターン性能比較

項目組み合わせ	Auto-MPG	Housing
$AvgF+AvgFL+SS+SA$	0.44	1.92
$AvgF+AvgFL+SS$	0.39	1.49
$AvgF+AvgFL+SA$	0.26	1.29
$AvgF+SS+SA$	0.38	1.51
$AvgFL+SS+SA$	0.35	1.44
$AvgF+AvgFL$	0.27	1.20
$AvgF+SS$	0.33	1.58
$AvgF+SA$	0.45	1.29
$AvgFL+SS$	0.4	1.54
$AvgFL+SA$	0.33	1.38
$SS+SA$	0.35	1.57
$AvgF$	0.28	1.68
$AvgFL$	0.21	1.11
SS	0.4	1.52
SA	0.43	1.49

3.2 トポロジ距離を用いたNiching

NEATにおける既存の適応共有の新・小規模種への偏りによる解探索の滞りの問題点を改善するもう一つのアプローチとして、トポロジ距離によるNiching手法を提案する。

種の規模によってペナルティを与えるのではなく適応度が高い個体とその周辺に存在する個体の探索を飛躍的に伸ばして局所的に解探索を行うものである。しかし、それでは構造的に局所解に陥ってしまう可能性があるため種の規模も考慮に入れる必要がある。これはNEATの制約

条件である種の内部のみでの交差に起因するものである。よって適応度が高い個体の探索を伸ばすのではなく種の規模も考慮する必要がある。

これを少し掘り下げると、単に世代ごとに適応度が最も高い個体と式 1 により求められるトポロジ距離を使ってその個体と近い個体を優先して探索を広げるというようにした時、最も適応度が高い個体が小規模な種に属していた場合、種に属する個体数が少ないので個体の構造的に局所解へ陥ってしまう可能性高いと推測されるため個体選出基準は、個体数が大きい大規模種でなければならない。すなわち、規模の大きい種は個体数が多いのでその中で多様性を持たせるというようなイメージである。

よって基準となる個体を選出する基準は、世代ごとの最大規模種に属する個体の中で最も適応度の高い個体である。選出された基準個体 K と他全個体とのトポロジ距離を式 1 により求める。求めた他全個体とのトポロジ距離の値を距離が最小の値と距離が最大の値を基に 0~1 の間で正規化を行う。正規化を行った値を基に各個体の適応度を修正する。ある個体 i の修正後の適応度 f_i' は、以下のように求める。

$$f_i' = f_i \times (S_{\max} \times (1 - \rho^d(\text{基準個体}K, \text{個体}i\text{の正規化後の値}))) \quad (4)$$

ここで S_{\max} は世代ごとの最大規模の種の規模値である。

これにより基準個体 K と距離が遠い個体ほど与えられる重みが低くなり、逆に距離が近い個体ほど与えられる重みが大きくなる。これにより種の規模に依存した適応度共有ではなく、個体間の距離に応じた適応度共有を可能にする。これによりエリート個体とその近傍を優先して選択することができる。

4. 実験

3.1 の提案手法を導入した NEAT を以下 RankNEAT とし、3.2 の提案手法を導入した NEAT を TopologyNEAT とする。NEAT, RankNEAT 及び TopologyNEAT の性能を比較するために UCI machine Learning と Stat Lib の関数近似に関するベンチマーク問題の 5 つのデータ Auto-MPG, Housing, Bolt, Abalone, CPU Performance を用いて 10 交差検証を 3 セット行い、10 交差検証において真値との二乗誤差を性能の指数とする。問題の選択基準は問題が使われている指数と事例数である。指数は、論文等に掲載されている数が最も大きいものでそれぞれ事例数の多い問題と少ない問題を設定した。Abalone が最も事例数が多く、Bolt が最も事例数が少ない問題である。

個体数は 200, 世代数は 500 とし、ノード追加突然変異確率を 0.03, リンク追加突然変異確率を 0.08, トポロジ距離閾値を 3.0, 式 1 の係数 c_1, c_2, c_3 は [1] に基づいて、それぞれ 1.0, 1.0, 2.0 に設定した。また T 検定を用いて各手法における性能の有意差も合わせて算出する。

表 4 に各問題において算出された 10 交差の二乗誤差の平均値, 表 5 に各手法と他手法の T 検定の結果を示す。

結果より、ほとんどの問題に対して、有意傾向をもって TopologyNEAT, RankNEAT が共に既存 NEAT の性能を上回ることができた。TopologyNEAT と RankNEAT では、TopologyNEAT が全問題設定において、RankNEAT の性能を有意差をもって上回ることが示された。

表 4: 10 交差二乗誤差平均値比較

	Abalone	Housing	Auto-MPG	Bolt	CPU
NEAT	3.69	1.36	0.32	0.18	0.055
RankNEAT	3.45	1.11	0.21	0.14	0.027
TopologyNEAT	2.82	0.78	0.094	0.078	0.012

表 5: 10 交差 T 検定値

T 検定値	Abalone	Housing	Auto-MPG	Bolt	CPU
NEAT/RankNEAT	0.02	0.002	0.006	0.13	0.003
NEAT/TopologyNEAT	0	0	0.002	0.0008	0
TopologyNEAT/RankNEAT	0	0	0	0.03	0

5. 各手法の傾向

ここでは、既存 NEAT, RankNEAT, TopologyNEAT の探索の特徴について示す。特徴を示すにあたり、Housing 問題を適用した時の、各手法における種の生成傾向、種の規模分布、適応度推移を図を用いて示す。なお、Housing 問題を適用するのは、事例数が実験を行った問題の中で中間的な数で、今回最も T 検定値が NEAT に対して、RankNEAT, TopologyNEAT が有意差をもって性能を上回ったためである。

5.1 適応度推移

図 2 に各手法において縦軸に適応度、横軸に世代数ととり、Housing 問題に対する適応度推移の例を示す。

図 2 より、NEAT, RankNEAT の収束は比較的早く、それに対して TopologyNEAT の収束は遅いが、数世代ごとに適応度の上昇がみられる。NEAT と RankNEAT では収束がほぼ同じであるが、RankNEAT の性能が上回っているのは適応度上昇率によって適応度共有を行っているので最適個体を効率よく探索できていると言える。TopologyNEAT は性質上 1 つの最良個体を中心に探索を進めていくため最適な構造を探索するのに世代経過を必要とするが、最終的には RankNEAT の性能を上回ることができている。これらの傾向は、全ての問題に対して見られている。

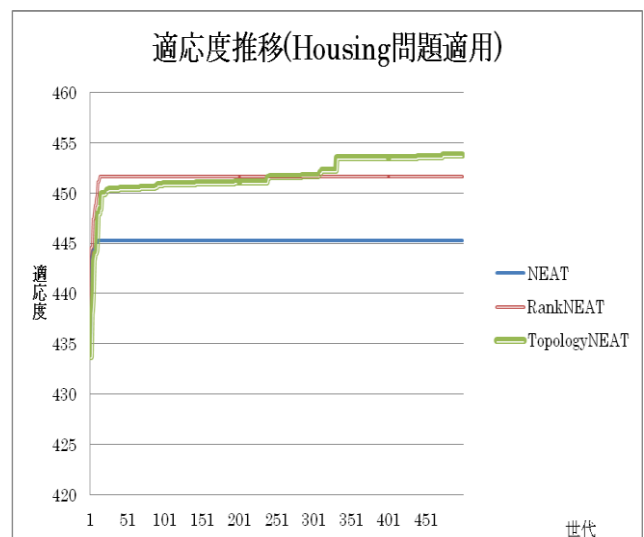


図 2 : 各手法における適応度推移比較

5.2 種生成傾向と種の規模分布

図3, 図4, 図5に縦軸に種数, 横軸に世代数を取り NEAT, RankNEAT, TopologyNEAT の世代ごとの種の規模分布と種の生成傾向を示す。

図3より NEAT は先ほどあげたように適応度共有の性質から世代経過につれ小規模種へ偏りを生じさせることが分かる。大, 中規模種は早い段階で淘汰され小規模種へ偏っていく。生成傾向をみるとある程度までは世代ごとに種を作っていく増加していくが頭打ちになることが分かる。これも適応度共有の性質によるものである。

図4より RankNEAT の種の規模分布は, 提案した適応度共有により種の規模には関係なく上昇率によってペナルティを科すため大, 中, 小規模種が満遍なく分布しているのが分かる。生成傾向を見ると NEAT に比べある程度まで増加しそこから増減を繰り返す傾向にある。これも, 提案した適応度共有において種の規模を考慮しないため上昇率が高い種が残っていくためその都度増減を繰り返すためである。

図5より TopologyNEAT の種の規模分布は一つの大規模種のみが残っていることがほとんどで, まれに新・小規模種が分布している。これは, 提案した適応度共有の個体選出基準が最大規模の種に属する個体であるのでその周辺の個体を集中的に探索するため新しい種はほとんど生成されないためである。生成傾向も提案した適応度共有の性質上一つの大きな種に属する個体へ探索を集中するためほとんど新しい種は生成されず, まれに突然変異等の進化的アルゴリズムにより新種が生成されることがある。

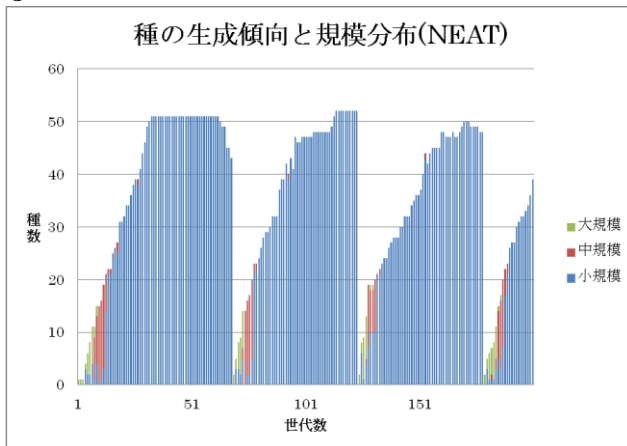


図3:種の生成傾向と規模分布(NEAT)

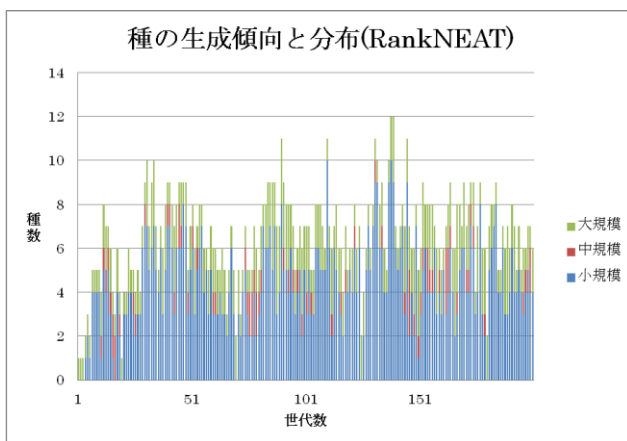


図4:種の生成傾向と規模分布(RankNEAT)

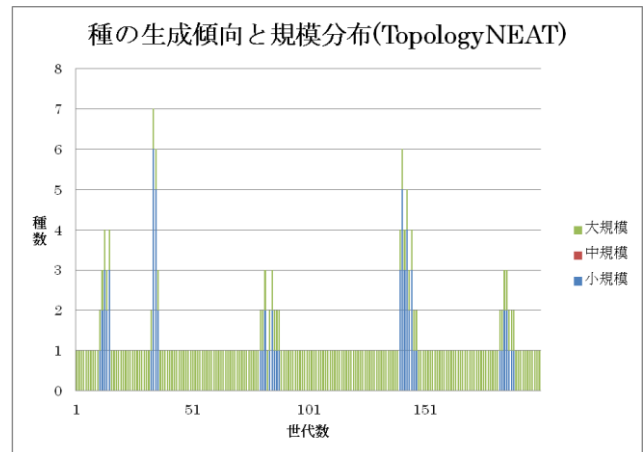


図5:種の生成傾向と規模分布(TopologyNEAT)

6. おわりに

今回 NEAT の Niching 手法の一つである「適応度共有」に, 「種ランク付け」, 「トポロジ距離」をそれぞれ適用し, 性能比較のためにベンチマーク問題を用いて 10 交差検証を行った。結果, 「トポロジ距離」を導入した TopologyNEAT が最も性能が高い結果となった。これは, 簡単にいうとエリート個体優先戦略である。しかし, 問題点として適応度の収束が他の手法と比較して遅いことが挙げられる。これは, TopologyNEAT の種の生成傾向などから分かるように構造の多様性すなわちノード間の繋がりの多様性が薄くなってしまっていたり, エリート個体優先によって突然変異や交差が NEAT の性質上, 局所的に行われることが原因であることが推測される。今後この問題点を改善するために, RankNEAT との探索の組み合わせなどが挙げられる。例えば, RankNEAT によってある程度まで最適な構造の探索を進めて TopologyNEAT に切り替えて局所的な探索にすることによって行うことなどがある。これによって, さらなる性能の向上が期待されるであろう。

参考文献

- [1] Stanley, K. and Miikkulainen, R.: Evolving neural networks through augmenting topologies, *Evolutionary, Computation* 10(2): 99-127 (2002)
- [2] 森口博貴, "NEATにおける振る舞いに基づく多様性維持", 第24回人工知能学会全国大会 2D1-1 (JSAI2010)
- [3] Trujillo, L., Olague, G., Lutton, E. and de Vega, F.: Discovering several robot behaviors through speciation, *Applications of Evolutionary Computing, LNCS:4974* pp 164-174 (2008)
- [4] 楠本 直輝, Ruck Thawonmas, "NEATにおける種ランク付けを用いたNiching手法," 情報処理学会第75回全国大会予稿集, 2S-4, pp. 343-344, 2013年3月6日(2013)