

最悪ケースの多数目的最適化問題に対する 差分進化の適用

原田 翔一¹ 田川 聖治²

概要：現実的な最適化問題を考えると、多くの場合に目的関数が複数存在し、目的関数値はノイズを含んでいる。この様な問題では同一の解を繰り返し評価することで、その解の良し悪しを判断する必要がある。そこで、上記の多数目的最適化問題を対象とした差分進化（DE : Differential Evolution）に基づくアルゴリズムを提案する。提案するアルゴリズムでは予測区間の上限値による U カットと、カットオフ点による C カットにより、良くない解を判定してサンプリングを中止することで無駄な処理を削減している。

1. はじめに

現実の世界では様々な多数目的最適化問題が存在し、その多くが目的関数値にノイズを含んでいる。このため、同じ解であっても評価するたびに異なる結果が得られる。

本稿では、ノイズを含んだ複数の目的関数について、それらの最悪の場合の値を改善する問題を考える。すなわち、解を繰り返し評価することで目的関数値の予測区間を統計学的に求め、その上限値を最小化する。ここで、非劣解であっても幾つかの目的関数値が非常に悪いような極端な解は不要である。そこで、極端な解を除くため、多数目的最適化問題では目的関数値に制約条件を設定する。

次に、上記の多数目的最適化問題を解くために進化計算の一種である差分進化（DE : Differential Evolution）を用いたアルゴリズムを提案する。各目的関数の予測区間を求めるには同一の解を何度も評価する必要がある。そこで、提案するアルゴリズムでは、予測区間の上限値に基づく U カットと、カットオフ点による C カットを用いて、良くない解であると判断できた時点で、その解の評価を止める。これにより、不良な解の評価回数を削減している。

2. ノイズを含んだ多数目的最適化問題

2.1 ノイズを含んだ目的関数

ノイズを含んだ目的関数の評価値 $f_m^n(\mathbf{x})$ を式(1)で定義する。 $f_m(\mathbf{x})$ は目的関数値、 κ_1 と κ_2 は定数、 ε_1 と ε_2 は標準正規分布に従う互いに独立な確率変数である。

¹ 近畿大学総合理工学研究科
Graduate School of Science and Engineering Research, Kinki University

² 近畿大学理工学部
School of Science and Engineering, Kinki University

$$f_m^n(\mathbf{x}) = f_m(\mathbf{x}) + \kappa_1 f_m(\mathbf{x}) \varepsilon_1 + \kappa_2 \varepsilon_2 \quad (1)$$

式(1)より、 $f_m^n(\mathbf{x})$ は正規分布に従う。

$$\begin{aligned} f_m^n(\vec{\mathbf{x}}) &\sim \mathcal{N}(\mu_m(\mathbf{x}), \sigma_m(\mathbf{x})^2) \\ &= \mathcal{N}(f_m(\mathbf{x}), \kappa_1^2 f_m(\mathbf{x})^2 + \kappa_2^2) \end{aligned} \quad (2)$$

式(1)の正規分布の平均 $\mu_m(\mathbf{x})$ と分散 $\sigma_m(\mathbf{x})^2$ は分からぬ。そこで、解 \mathbf{x} を N 回評価して得られた標本を $\{f_m^1(\mathbf{x}), \dots, f_m^n(\mathbf{x}), \dots, f_m^N(\mathbf{x})\}$ とし、標本平均 $\bar{f}_m(\mathbf{x})$ と不偏分散 $v_m(\mathbf{x})^2$ で $\mu_m(\mathbf{x})$ と $\sigma_m(\mathbf{x})^2$ を推定する。

$$\bar{f}_m(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f_m^n(\mathbf{x}) \quad (3)$$

$$v_m(\mathbf{x})^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N (f_m^n(\mathbf{x}) - \bar{f}_m(\mathbf{x}))^2 \quad (4)$$

次に、すでに N 個の目的関数値の標本が得られている状態で、有意水準 α とすると、 $N+1$ 個目の標本 $f_m^{N+1}(\mathbf{x})$ の値は、確率 $(1-\alpha)$ で以下の範囲にあると予測される。

$$-\infty < f_m^{N+1}(\mathbf{x}) \leq f_m(\mathbf{x}) + t(N-1, \alpha) v_m(\mathbf{x}) \sqrt{1 + \frac{1}{N}} = f_m^U(\mathbf{x}) \quad (5)$$

2.2 問題の定式化

決定変数 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_j, \dots, x_D)$ を D 次元のベクトルとし、目的関数 $f_m^U(\mathbf{x})$ は M 個とする。また、極端な解を除くために、カットオフ点 $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_M)$ を設定して、カットオフ点を優越する解は実行可能、それ以外の解を実行不可能とする。ここで、本稿で対象とするノイズを含む多数目的最適化問題を式(6)のように定式化する。

$$\begin{cases} \text{minimize} & \mathbf{f}^U(\mathbf{x}) = (f_1^U(\mathbf{x}), \dots, f_M^U(\mathbf{x})) \\ \text{subject to} & (\mathbf{x} \in \mathbf{X}) \wedge (\forall m : f_m^U(\mathbf{x}) \leq \gamma) \end{cases} \quad (6)$$

3. DER (DE with Resampling)

DER は N_P 個の個体 \mathbf{x}_i ($i = 1, \dots, N_P$) を保持し、式(6)の最適化問題の解候補とする。また、全ての個体 \mathbf{x}_i を N 回評価して $f^U(\mathbf{x})$ を求める。現世代の集団から次世代の集団を選択する際は、実行可能な個体を優先的に選び、残った個体は NSGA-III[2] と同様に優越関係に基づくランクと、参照点からの距離によって選択する。さらに、解の精度を上げるため、各世代で実行可能な個体のみ目的関数値の標本を 1 つずつ追加して予測区間を再計算する。

4. DEUCR (DER with U-cut & C-cut)

提案するアルゴリズムでは、予測区間の上限に基づく U カットと、カットオフ点に基づく C カットを用いて、良くない個体（解）を判別し、その評価の繰り返しを止める。また、良くない個体の上限値は、その時点で得られている標本から求める。これにより、良くない個体の無駄な評価を省略できる。また、DER と同様、各世代で実行可能な個体のみ標本を 1 つ追加して予測区間を再計算する。

5. 数値実験

DER と DEUCR を用いてノイズを含ませた DTLZ1~6 [3] を解いた。集団の個体数 N_P は 120、カットオフ点は $\gamma_m = 1.0$ 、終了条件は個体の評価回数を 100 万回とした。目的関数の数 M は 4, 6, 8 を設定し、それぞれ 30 回実行して得られたデータの平均を比較する。評価指標には実行可能解の数、Convergence Measure (CM)、Maximum Spread (MS)、Hypervolume (Hv) [4] を用いた。

表 1 に実行可能解の数、表 2 に CM の値、表 3 に MS の値、表 4 に Hv の結果をそれぞれ示す。表 1 から DEUCR の方が多くの実行可能解を求められていることが分かる。CM は個体の良さを表す評価指標である。表 2 から DTLZ1, 3, 6 で良い結果が得られていることが分かる。MS は集団の多様性の評価指標であり、表 3 から DTLZ1, 3 で良い結果が得られていることが分かる。Hv は個体の良さと多様性の両方を評価する値となっており、表 4 は有意水準 0.05 で仮説検定を行った結果を示している。DEUCR が良い結果がでたところに △ を記している。

表 1 実行可能解の数

M	DER			DEUCR		
	4	6	8	4	6	8
DTLZ1	110	8.00	0.07	118	115	59.7
DTLZ2	116	119	119	117	119	119
DTLZ3	70	15.7	0.00	116	75.1	19.7
DTLZ4	115	119	119	115	118	119
DTLZ5	104	112	116	105	110	116
DTLZ6	0.00	0.00	0.00	91.2	0.00	0.00

表 2 Convergence Measure

M	DER			DEUCR		
	4	6	8	4	6	8
DTLZ1	0.64	0.17	0.15	0.54	1.38	1.08
DTLZ2	0.29	0.39	0.43	0.29	0.39	0.42
DTLZ3	0.30	0.16	—	0.33	0.45	0.12
DTLZ4	0.29	0.39	0.43	0.29	0.40	0.42
DTLZ5	0.30	0.36	0.37	0.30	0.35	0.37
DTLZ6	—	—	—	0.48	—	—

表 3 Maximum Spread

M	DER			DEUCR		
	4	6	8	4	6	8
DTLZ1	1.48	0.13	0.01	1.49	2.01	1.26
DTLZ2	1.69	2.18	2.58	1.69	2.18	2.58
DTLZ3	1.10	0.31	—	1.69	1.38	0.43
DTLZ4	1.67	2.14	2.54	1.66	2.18	2.54
DTLZ5	1.35	1.56	1.69	1.35	1.56	1.67
DTLZ6	—	—	—	1.12	—	—

表 4 Hypervolume

M	4	6	8
DTLZ1	△	△	△
DTLZ2	—	—	—
DTLZ3	△	△	△
DTLZ4	—	—	—
DTLZ5	—	—	—
DTLZ6	△	—	—

6. おわりに

DER と提案した DEUCR を 6 種類のテスト問題で比較を行い、DEUCR が優れていることを確認した。

今後の課題は、カットオフ点の取り方を工夫して多様性を失わずに良い解を得られるようにすることである。

参考文献

- [1] R. Storn and K. Price : Differential evolution - a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces, Journal of Global Optimization, vol. 4, no. 11, pp. 341–359 (1997)
- [2] K. Deb and H. Jain: An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point-based nondominated sorting approach, part 1: solving problems with box constraints, IEEE transactions on evolutionary computation, vol. 18, no. 4, pp.577–601 (2014)
- [3] K. Deb : Scalable test problems for evolutionary multi-objective optimization, TIK-Technical Report, no. 112, pp. 1–27 (1981)
- [4] E. Zitzler: Evolutionary Algorithms for Multiobjective Optimization: Methods and Applications, PhD thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich(1999)