

多目的最適化問題における均等なパレート面探索のための 多指向性遺伝的アルゴリズム

安藤 晋[†] 鈴木 英之進[†]

[†] 横浜国立大学工学研究院

本研究では多目的最適化問題の解法として多指向性遺伝的アルゴリズム MOrGA を提案する。パレートフロントの質を考慮した適合度を用いる従来の進化的多目的最適化手法はパレートフロントにおける探索速度の偏りが存在するときフロントの一部に収束してしまい、被覆性が悪化するという問題があった。提案手法では目的変数間のトレードオフを各個体が遺伝子型に含み、これを探索の状況に応じて明示的に制御することで部分パレートフロント面への個体の過度の集中を回避する。また、提案手法は探索においてトレードオフの近さを考慮した近傍個体による交叉を利用する。従来手法との比較実験において、提案手法は非均質なパレートフロントを持つベンチマークにおいて性能を向上し、同時に既存のテスト関数について同等以上の収束性を実現した。

Multi-oriented Genetic Algorithm for Balanced Pareto Front Search in Multi-objective Optimization

Shin ANDO[†], and Einoshin SUZUKI[†]

[†] Faculty of Engineering, Yokohama National University

This paper proposes Multi-oriented Genetic Algorithm (MOrGA) for Multi-Objective Optimization. A Pareto front whose subregions differ in search efficiency are problematic for conventional multi-objective methods which consider the quality of the Pareto front in their fitness function, as it causes the population to converge to a partial Pareto front. In our proposed method, each individual includes the trade-off for each objective in its genotype. By controlling the trade-off during the optimization, the proposed method avoid convergence to a partial Pareto front. In comparison to conventional approaches, the proposed approach performed better or equal convergence speed for standard benchmarks, while achieving better coverage in the test problems with heterogeneous Pareto front.

1 はじめに

進化的多目的最適化 (EMO) 手法は、多くの多目的最適化問題において質の高いパレート最適解集合を生成することが知られている^{2, 1)}。

一方、非線形性、多峰性などの一つの目的関数に関して探索を困難にする景観の特徴が EMO 手法に与える影響については多く議論の余地がある。多目的最適化問題では複数の部分領域に集団を分布させる必要があるため、探索の重点化の制御が困難であり、進化的計算によるパレートフロントの生成が失敗するような問題クラスが存在し得る。

本稿では、まず多目的最適化問題において探索失敗の要因となる景観の構造を説明し、その際の EMO 手法の典型的な挙動を検証する。その上でそのような構造の影響を受けにくい探索手法として多指向性遺伝的アルゴリズム (Multi Oriented Genetic Algorithm: 以下 MOrGA) を提案する。

MOrGA は局所的な複製・淘汰手法を用いる。また、各個体が指向変数と呼ぶ固有のトレードオフを持ち、目的変数をスカラー値に変換した適合度として用いる。さらに複数のアーカイブを利用してパレートフロントの粗密を減らす機構を実装する。計算機実験では標準的な多目的ベンチマークに加え、複雑な景観を持つ問題において、提案手法と代表的な EMO 手法との性能比較を行う。提案手法は標準ベンチマークにおいて既存手法と概ね同等の性能をしめし、複雑な景観を持つ目的関数では被覆性が向上することを示す。

2 多目的最適化問題

多目的最適化問題では定義域 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ において目的関数ベクトル $\vec{f}$ と l 個の制約条件 $\vec{g}$

$$\begin{aligned}\vec{f} &= (f_1, f_2, \dots, f_m)^T : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \\ g_i(\vec{x}) &\leq 0 \quad (i = 1, 2, \dots, l)\end{aligned}$$

に対し、任意の $\bar{x} \in \Omega$ に非劣性なパレート最適解の集合 Π^* を求めることを目標とする。

ただし、一般にパレート最適集合の解析的な表現を得られないので、通常は目的変数空間中の有限な点集合である最適パレートフロント

$$\Phi^* = \{\bar{f}(\bar{x}) | \bar{x} \in \Pi^*\}$$

と、それに対応する非劣性解集合 Π を求める。

2.1 パレートフロントの評価

EMO の出力するパレートフロント Φ は

1. 最適パレートフロントまでの距離 (収束性)
2. 分布の幅広さ (被覆性)
3. 分布の均等さ (均等性)

の各項目に関して評価される。これらを個別に評価する指標としては General Distance(GD), Spread, Spacing などが挙げられる。

GD は $\bar{f}_i$ から最も近い最適パレートフロントへの距離を d_i としたときの d_i の平均自乗和で、真のパレートフロントに近い解集合ほど値が小さい。

Spread はパレートフロント中の各目的変数の値の幅で、大きいほど幅広いパレートフロントが得られることを表す。Spacing は $\bar{f}_i \in \Phi$ のパレートフロント中の最近傍への距離を D_i としたときの $\{D_i\}$ の分散で、個体が均等に分布しているほど小さい値をとる。

3 非均質なパレートフロント

本節ではパレートの一部に集団が初期収束してしまうような EMO による探索の失敗に注目し、原因となる非均質パレートフロントの構造とそこでの EMO の挙動の概要を説明する。

ここでは二目的最適化問題 $F_D = \{f_1, f_2\} : \Omega \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^2$ を考える。決定変数空間における領域 Π_A と領域 Π_B が目的変数 f_1 と f_2 に関する最適パレート解集合を構成するものとする。ここで Π_A における f_1, f_2 の探索速度が Π_B におけるそれを大きく上回り、かつ Π_A 内で f_1, f_2 の取れる値域が大きい場合、交叉により Π_A 内で非劣性な解を抽出する確率が Π_B よりも高くなる。このとき、パレートの質を考慮した適合度によって生存選択を行う場合、 Π_B 内の個体が淘汰されやすく、世代交代を重ねた結果 Π_B の個体が完全に淘汰されてしまうと、最適パレートフロントの生成に失敗する。

このような EMO による探索が失敗する要因となるような部分パレートフロントを含むものを非均質パレートフロントと呼び、 Π_A, Π_B に対応する部分をそれぞれ強部分パレートフロント、弱部分パレートフロントと呼ぶこととする。

4 テスト問題による解析

以下では前節に述べた探索速度の違いに起因する非均質パレートが存在する二つのテスト問題を用い、EMO 手法の典型的な挙動を検証する。ただし、テスト問題はともに最小化問題である。

テスト問題 1 : $DCV : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^2$

$$\bar{x} \in \Omega = [-2 : 2]^n$$

$$f_1(\bar{x}) = \exp\left(-x_n^2 - \sum_{i=1}^{n-1} (x_i + 1)^2\right)$$

$$f_2(\bar{x}) = \log\left(\sum_{i=2}^n \left\{100(x_1 - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2\right\}\right)$$

この問題では f_2 の非線形性から、相対的に弱い部分パレートフロント B (図 1) が存在する。

図 1 は NSGA-II の初期・第 4 世代および最終世代の個体の目的変数空間中における位置をそれぞれ ●, ■, ◆, ▲, ▼ によって表している。これより、NSGA-II の集団が最初の数世代で強部分パレートフロント A に初期収束し、その後は弱部分パレートフロントの近傍に個体が存在しないため、フロントを拡大させることが困難になっている。

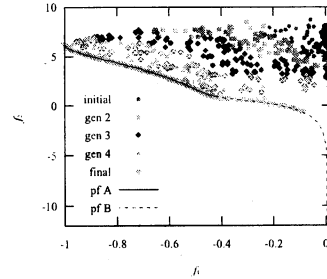


図 1: DCV における NSGA-II の初期収束

さらに、NSGA-II の評価回数を増減させたときの影響を検証する。 DCV における探索の成功/失敗は f_2 に関する Spread の値により評価することができる。表 1 に NSGA-II を個体数 100, 200, 300, 終了世代数 250, 500 として 30 回の試行を行ったときのパレートフロント Φ の f_2 に関する Spread の平均値および分散を示す。表 1 からは集団サイズや世代数の増大が探索の成功に対して有意に貢献するとはいえないことが分かる。

表 1: DCV における NSGA-II の Spread

世代数	個体数	100	200	300
250		8.05 ± 2.70	8.35 ± 2.02	7.44 ± 1.29
500		7.95 ± 2.49	8.49 ± 3.25	8.34 ± 2.28

テスト問題 2 : $VNT2: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$

$$\bar{x} \in \Omega = [-3: 3]^2$$

$$f_1(\bar{x}) = 0.5(x_1^2 + x_2^2) + \sin(x_1^2 + x_2^2)$$

$$f_2(\bar{x}) = -e^{-a(\cos(b(x_1+x_2)) - (x_1-x_2)^2) - c(x_1+x_2+1)^2}$$

$$f_3(\mathbf{x}) = \frac{1}{x_1^2 + x_2^2 + 1} - 1.1 \exp(-(x_1^2 + x_2^2))$$

$$a = 49, b = 4, c = 0.5$$

$VNT2$ は 2 変数 3 目的の標準的なテスト関数 VNT に、 f_2 を非線形な関数に変更した問題である。決定変数領域の小ささ、および非線形性から探索速度が遅く、他に対し相対的に弱い部分パレートフロントが存在する。

5 多指向性遺伝的アルゴリズム

以下では多指向性遺伝的アルゴリズム (MOrGA) の概要を説明する。MOrGA において個体は決定変数 $\bar{x}$ と指向変数 $\bar{w} = (w_1, \dots, w_m)^T$ を持ち $I_i = \{\bar{x}_i, \bar{w}_i\}$ と表される。探索中はパレートフロントの質を明示的に考慮せず、適合度は正規化した個体の目的変数 $\bar{f}(\bar{x}_i)$ をスカラー化したものとする

$$fitness(I_i) = \bar{w}_i \cdot \bar{f}(\bar{x}_i)$$

さらに、探索過程で得られた個体を保持するためにアーカイブを利用する。探索過程で得られた非劣性解を保持するアーカイブ V_n と収束した個体をいったん隔離する V_c を用意し、各々の最大サイズを $\#_{max}(V_n)$ 、 $\#_{max}(V_c)$ とする。

MOrGA には以下の手順があり、そのうち 2) 以下を終了条件が満たされるまで繰り返す:

1) 集団の初期化、2) アーカイブ更新、3) 指向変数の制御、4) 世代交代、5) 終了条件判定

以下にいくつかの手順の詳細を示す。

5.1 アーカイブの更新

5.1.1 非劣性解アーカイブ

非劣性解アーカイブ V_n には毎世代集団中の非劣性の個体を追加し、同時に劣性となった解を削除する。更新後、 $\#(V) > \#_{max}(V)$ となる場合、最も Crowding Distance³⁾ の大きい個体を削除する操作を $\#(V) \leq \#_{max}(V)$ となるまで繰り返す。

5.1.2 収束解アーカイブ

収束解アーカイブ V_c には集団中の収束した個体が挿入されると同時に、状況に応じて V_c から個体が集団に戻される。ただし、個体の収束は 5.3 節に述べる個体の移動差分ベクトル $\bar{d}$ について $|\bar{d}| < v_{conv}$ をもって収束と判断する。

集団中に収束した個体がひとつ以上存在するとき、以下を実行する:

1. V_c の要素のうち V_n 内での Crowding Distance が最小となるものを集団に戻す。ただし、戻した個体は $\#(V_c)$ からは削除される。

2. 収束個体のひとつをランダムに選択し、アーカイブに追加する。

ただし、アーカイブサイズ $\#(V_c)$ が $\#_{max}(V_c)$ 未満の場合は非劣性解アーカイブ V_n の中で Crowding Distance が最小となる個体を集団に戻す。

5.2 指向変数の制御

MOrGA では各個体の指向変数を各目的変数に関する集団内の順位に応じて決定する。個体 $I_j \in P$ の指向変数は (1) により与えられる。ただし、 $R_i^P(I_j)$ は目的関数 f_i に関する P 内での I_j の順位である。

$$\bar{w}_j = \left(-\log \frac{R_i^P(I_j)}{\#(P)} \right)^T \quad (i = 1, \dots, m) \quad (1)$$

5.3 世代交代

複製・淘汰を含む世代交代の操作の概要は以下のとおりである。まず、親個体 I_p の $\bar{x}_p$ を中心とする正規分布から抽出した λ 個の決定変数ベクトル $\{\bar{c}_i\}$ を子供個体とする。さらに親個体・子供個体を併せた最良選択により親個体を置換する。

子個体を生成する分布は親個体 $\bar{x}_p$ およびその近傍個体 $\bar{p}_i (i = 1, \dots, \mu)$ から (2) 式により与えられる。ここで、 $\bar{p}_0$ に対する近傍個体は正規化した変数空間でのユークリッド近傍とする。

$$\bar{c} = \bar{x}_p + \sum_{i=0}^{\mu} N(0, \alpha) \eta_i \bar{d}_i \quad (2)$$

ただし、 $\bar{d}_0$ は親個体 $\bar{x}_p$ が最後に移動したときの決定変数空間における差分ベクトルである。さらに、置換の実行が t 世代前に起きた場合は $1/t$ する。また、 $\bar{g}$ は親個体の重心、 $\bar{d}_i$ は p_i の重心からの差分ベクトルである。ただし、 η は指向変数の相違による景観の違いを反映させるための重みとして、余弦 $\eta_i = \cos \theta_{0i}$ を用いている。

6 実験

本節では 4 に示したテスト問題と三つの標準問題ベンチマーク POL 、 SCH 、 KUR における SPEA2、NSGA-II および MOrGA の成績の比較を行う。MOrGA で用いたパラメータは以下の通り: $\#(P) = 200$ 、 $\mu = 10$ 、 $\lambda = 10$ 、 $\alpha = 0.35$ 、 $E_{max} = 100000$ 、 $\#(V_n) = 500$ 、 $\#(V_c) = \#(P)/10$ 。各手法における一試行の評価回数は等しく、それぞれ 30 回の試行を行った。

6.1 実験結果

DCV における提案手法の図 1 と同様の視覚的解析を図 2 に示す。MOrGA の初期世代と第 10 世

代の個体および最終的に得られたパレートフロントをそれぞれ●, ■, ◇で表示し、矢印によってそれぞれの指向変数ベクトルを表す。ただし、見易くするためベクトルの方向は逆に表示している。

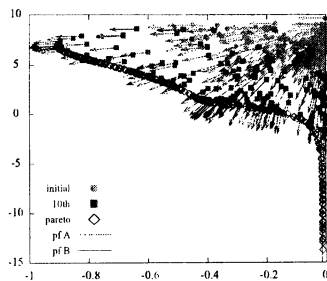


図 2: DCV における MOEGA の挙動

図 2 からは弱部分パレートフロントに向かう個体が存在し、非線形な谷においても探索が進んでいることが分かる。また、探索の途中ではパレートフロント上に粗密が存在するが、アーカイブを用いた個体の入れ替えや指向変数の摂動により、最終的に得られるパレートフロントはより均等になっている。

表 2-6 に各テスト問題における NSGA-II, SPEA2 および MOEGA の GD, Spread および Spacing の指標を示す。

表 2: DCV における各手法の性能指標

	GD	Spread	Spacing
SPEA2	0.0213±0.00230	6.4±0.873	0.478±0.0873
NSGA-II	0.0112±0.00225	8.49±3.25	0.208±0.111
MOEGA	0.00828±0.00323	20.8±4.11	1.07±0.400

表 3: VNT2 における各手法の性能指標

	GD	Spread	Spacing
SPEA2	5.12e-3±463e-4	4.92±0.310	0.0560±0.00873
NSGA-II	5.17e-4±2.61e-5	5.82±2.27	0.0676±0.00568
MOEGA	2.40e-4±4.91e-5	7.80±1.12	1.66±4.05

表 4: POL における各手法の性能指標

	GD	Spread	Spacing
SPEA2	5.46e-4±4.91e-5	39.5±0.435	1.79±0.474
NSGA-II	1.66e-4±5.73e-5	40.8±0.00868	3.01±0.648
MOEGA	5.66e-5±1.73e-5	40.8±5.68e-4	8.30±1.28

表 5: SCH における各手法の性能指標

	GD	Spread	Spacing
SPEA2	0.00737±4.48e-4	16±1.61	0.657±0.105
NSGA-II	0.00510±8.20e-4	18.0±3.03e-3	0.725±0.233
MOEGA	0.00491±2.28e-4	18.0±2.25e-3	1.02±0.528

表 6: KUR における各手法の性能指標

表 2-6 において注目すべきは以下の点である。ま

ず、Spacing の項目において NSGA-II と SPEA2 が MOEGA に対して概ね上回っていることから、提案手法は均質性において従来手法に劣ることが分かる。ただし、視覚的な解析からはこの差は致命的なものではないといえる。また、Spread に関して、DCV, VNT2 において NSGA-II と SPEA2 はパレートフロントの末端を生成できていないため、MOEGA がはつきりと優位であるといえる。ただし、標準ベンチマークでは NSGA-II もパレートフロントは末端に達している。GD に関しては MOEGA と NSGA-II が SPEA を大きく上回り、また、MOEGA と NSGA-II の比較では MOEGA がわずかに良い。提案手法の収束性能は NSGA-II と比較して同等以上であると考えられる。

7 おわりに

本稿では、多目的最適化問題における探索困難な景観の特徴として非均質なパレートフロントに着目し、それが既存 EMO 手法の探索に与える影響を示した。探索速度の偏りによってそのような構造が生じることをテスト関数を用いて検証した。

非均質パレートフロントは多目的最適化問題が探索難度の高い目的関数を含む場合に高い確率で生じ、質の高いパレートの生成を妨げるためこの現象を解析することは大変重要であると考えられる。

本論文では、EMO 手法で一般的に用いられるパレートフロントの質を考慮した指標に替えて個体固有の指向変数により目的変数ベクトルをスカラー化した適合度を用いる MOEGA を提案した。提案手法ではさらに多峰性探索の手法を導入し、目的変数空間内の状況に応じて指向変数を制御することで、非均質パレートの影響を受けずに探索が可能となっている。

参考文献

- 1) Coello Coello, C. A., Van Veldhuizen, D. A. and Lamont, G. B.: *Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems*, Kluwer Academic Publishers, Boston, MA (2002).
- 2) Deb, K.: *Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithms*, John Wiley and Sons, Chichester (2001).
- 3) Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S. and Meyarivan, T.: A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA-II, *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*, Vol. 6, pp. 182-197 (2002).