

ネットワークインバージョンの利用による 多様性維持メカニズムを有する多目的遺伝的アルゴリズム

小林 賢二[†], 廣安 知之^{††}, 三木 光範^{††}

[†] 同志社大学大学院 ^{††} 同志社大学工学部

近年, 多目的遺伝的アルゴリズムの実問題への適用が盛んになってきている. このような実問題への適用の際に考慮すべき事項として, 高い計算コストへの対処がある. コスト削減の方法の一つとして, 小数個体での探索が考えられる. ただし小数個体での探索は, 計算コストの削減は図れるものの, 探索過程において多様性の低下が生じるため, 計算時間の確保が不十分な場合には多様性が低い解しか得られないという問題が生じる. これに対して, 目的関数空間において探索個体が数点に集中した場合には, 解を均等に再配置することで, 高い多様性を持った解集合を得られる可能性がある. しかしながら, この場合, 再配置の対象となる空間が目的関数空間であるため, 目的関数値から設計変数値を推定する逆解析を行う必要がある. そこで本論文では, 従来の多目的遺伝的アルゴリズムに, ニューラルネットワークの技術の一つであるネットワークインバージョン (Network Inversion: NI) を併用することで, 探索過程における多様性の維持を図る新しいメカニズムの提案を行う. 本メカニズムを代表的な多目的遺伝的アルゴリズムの手法である NSGA-II に組み込み, テスト関数及びディーゼルエンジン燃料噴射スケジューリング問題に適用した結果, 提案メカニズムは多様性の維持に対して有効な結果を示した.

Mechanism of Multi-Objective Genetic Algorithms for Maintaining Solution Diversity using Network Inversion

Kenji KOBAYASHI[†], Tomoyuki HIROYASU^{††}, and Mitsunori MIKI^{††}

[†] Graduate School of Knowledge Engineering, Doshisha University

^{††} Faculty of Engineering, Doshisha University

Recently, many multi-objective genetic algorithms have been developed and applied to real-world problems. An important issue in resolving this type of problems is how to handle the high calculation cost. One possible solution to this problem is the search with a small population size. However, with this search, the diversity of solutions is often lost, while the calculation cost can be reduced. Therefore, the solutions that only have a low degree of diversity can be obtained with insufficient calculation time. Our approach to resolve this issue is to relocate the converged solutions uniformly in the objective space, when solutions are converged to certain points. In this relocation, it is necessary to perform an inverse analysis that presumes the values of design variables according to the fixed values of objective functions, because the relocation is conducted in the objective space. In this paper, we propose a new mechanism, which applies not only multi-objective genetic algorithms but also Network Inversion, that can preserve the diversity of solutions. The proposed mechanism was introduced to NSGA-II, and its effectiveness was examined on mathematical test functions and diesel engine emission and fuel economy problem. In both types of problems with high dimensionality, the proposed mechanism provided solutions with a high degree of diversity even when the search was performed with a small number of solutions. In addition, the effectiveness of the clustering before inverse analysis was also discussed through the experiments.

1 はじめに

最適化問題の中でも複数の評価基準について考慮する問題を多目的最適化問題という. 多目的最適化問題では, 目的間にトレードオフ関係の関係があることが多く, このような場合は唯一つの最

適解を得ることはできない. そのため, 互い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本問題の一つの目標となる. これに対して, 遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithms: GA)¹⁾ は, 多点探索により一度の探索でパレート最適解集合

を求められることから、よく用いられる。GAを用いた多目的GA手法は数多く研究され、そして近年、実問題にも盛んに適用されている²⁾。しかしながら、GAを用いた探索は非常に多くの評価計算回数を必要とすることから、一度の評価に時間を要するような実問題では大きな問題となる。このような問題に対して、並列化処理による計算時間短縮の方法とアルゴリズムの改良による方法が提案されている。本論文では、後者のようなアルゴリズムの改良により、探索時間の削減を図りつつも良好な解を導出可能なメカニズムについて検討する。

2 多目的最適化

2.1 多目的遺伝的アルゴリズム

GAは自然界における生物の進化をモデル化した最適化手法である。特徴として多点探索であるため、複数のパレート最適解を一度に求めることができるという点が挙げられる。多目的GAによって導かれるパレート最適解は、精度と多様性を有していることが望ましいため、その探索方法として、精度と多様性を維持しながら解探索を進めることが重要である。代表的な多目的GAの手法であるNSGA-II³⁾は、良好な精度と多様性を持ったパレート最適解を導出できると報告されている。

2.2 計算コスト削減へのアプローチ

本論文では、多目的GAを少数個体探索で実行することにより、計算コストの削減を行う方法について検討する。少数個体での探索は計算コストの削減が可能である一方で、多様性が失われやすい。そこで、探索過程で多様性が低下した際に、探索解を目的関数空間で再配置することで低下した多様性を復元する多様性維持メカニズムを提案する。本メカニズムでは、目標個体群は目的関数空間に設定するため、目的関数値をもとに設計変数値を推定する逆解析が必要となる。本論文では、逆解析にニューラルネットワークの技術の一つであるネットワークインバージョン(Network Inversion:NI)を利用する。また、個体の再配置には近似関数の性能が非常に大きく影響するため、クラスタリングによる学習データの選別に関しても検討を行う。

3 クラスタリングとNetwork Inversionによる多様性維持メカニズム

本章ではクラスタリングとNIを用いた多様性復元メカニズムについて提案する。提案メカニズムは、多目的GAによる探索、クラスタリング、ANNの学習、再配置の4つのプロセスから成り立っている。またメカニズムの繰り返しにより多様性の維持

を実現する。適用のタイミングは2つの条件により決定される。1)最初にアーカイブに含まれる個体が全て非劣解になったとき 2)1)の世代とMOGAの実行世代数の差を取り、残り世代に対して均等に多様性復元メカニズムを適用する。提案手法の概念図を図1に示す。

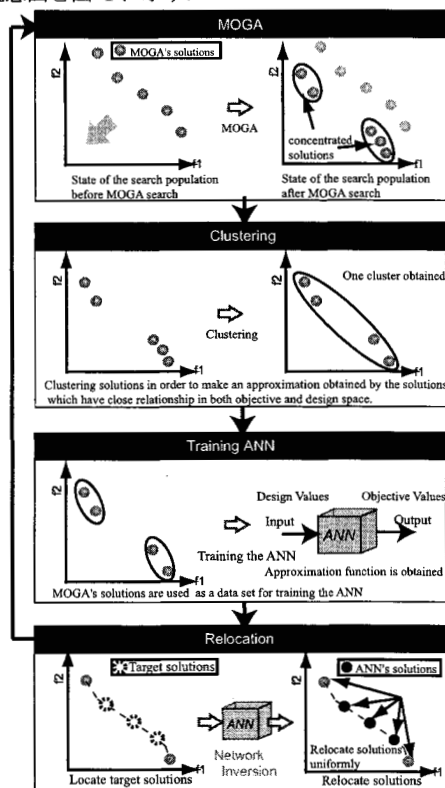


図1: 提案メカニズムの概念図

3.1 クラスタリング

本論文でのクラスタリングは、目的関数空間と設計変数空間の両空間での個体の近接性が同じ関係性をもった個体群とそうでない個体群に分けることを目的としている。このような二つの個体群が存在する例として、多峰性テスト関数ZDT4の個体分布を図1に示す。

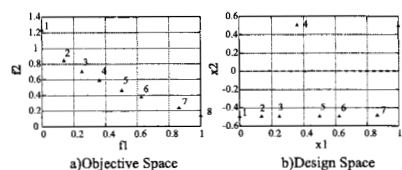


図2: 目的関数空間と設計変数空間の個体の分布

図2において、同じIDを持つものは同じ個体を示す。クラスタリングアルゴリズムを以下に示す。

基本解

$i = 0$: f1 値が最小の解.

$i = 1$: f1 値が最大の解.

Step 1: 目的関数空間において、基本解と全ての解とのユークリッド距離を計算する ($i=0$).

Step 2: 距離によって昇順ソートを行った後、各個体に昇順に ID を割り当てる.

Step 3: 設計変数空間において、基本解と全ての解とのユークリッド距離を計算する. その後、距離によって昇順ソートを行う.

Step 4: 以下の条件を満たしている間は、ソート後の個体群から個体を選択する. ($i=0$ のとき) 一つ前の個体より大きい ID を持つ. ($i=1$ のとき) 一つ前の個体より小さい ID を持つ.

Step 5: $i=0$ ならば基本解を更新して Step3 へ戻る ($i=i+1$).

Step 6: $i=0$ と $i=1$ のときに選んだ解が一致した場合は終了. 一致しなければ各々のクラスタに含まれる解を用いて Step1-1 に戻る.

多目的 GA によって得られた解をクラスタリングにかけることによって、ノイズデータを含まないデータセットを得ることが可能である.

3.2 ANN の学習と再配置

本節では、NI を用いた再配置メカニズムを述べる. 提案する再配置メカニズムのアルゴリズムを以下に示す.

Step2-3: クラスタリングを行った後の個体群を学習データとして ANN で学習し、予測関数を作成する. (入力: 設計変数値, 出力: 目的関数値)

Step2-4: NI を行い、目標個体の目的関数値に対応する設計変数値を取得する.

Step2-5: 得られた設計変数値を元に、真の目的関数で評価計算を行う.

4 NI による多様性維持メカニズムの有効性

提案手法の有効性を数値実験を通して検討する.

4.1 対象問題と評価手法

本メカニズムは多目的 GA によって得られた個体群に高い多様性を与えるものである. 本手法の有効性を検証するために、テスト関数である ZDT4⁴⁾ に対して、数値実験を行う. ZDT4 は、多峰性関数であり、一つの目的関数値に対して複数の設計変数値のセットが存在する多峰性関数である. この

問題では、ノイズデータを含まない学習データを作成するにはクラスタリングが必要となる. 本実験での性能評価に関しては、多様性を計測するための指標として Angular Cover Rate を提案する.

評価手法: Angular Cover Rate

Angular Cover Rate は目的関数空間における解の多様性を評価する手法である. Angular Cover Rate の概念図を図 3 に示す.

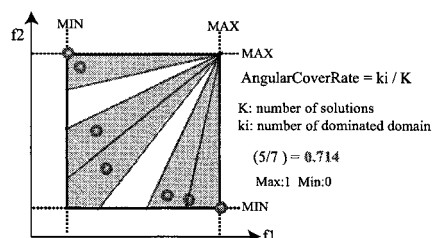


図 3: Angular Cover Rate の概念図

Angular Cover Rate は、等角度に分割した領域に解ができるだけ重複することなく存在するほど高い値を示し、1.0 に近づくほど良好な値を示している. 実験では、解の多様性の向上を、1) 分布図、2) Angular Cover Rate により確認し、また探索過程での解の多様性の変化を 3) 探索過程における Angular Cover Rate の変化 で確認する.

4.2 クラスタリングと NI による近似性能の評価

本実験では、クラスタリングの効果を検証する. 学習データを図 4 に示す. 多目的 GA には全ての実験において NSGA-II を用いた. また、個体数は 10、次元数は 2 とした.

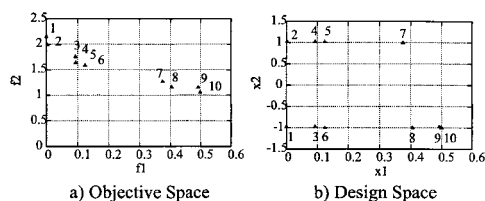


図 4: クラスタリングのためのデータセット

図 4 のデータセットに対して、クラスタリングを行った後に NI を用いた場合と、クラスタリングを行わずに NI を用いた場合の二つの場合について比較した. 実験結果を、図 5 に示す.

図 5 から、目的関数空間と設計変数空間における個体の近接性に違いが存在する場合は、NI の前にクラスタリングを適用することで近似精度を向上させられることが可能であるということがわかった.

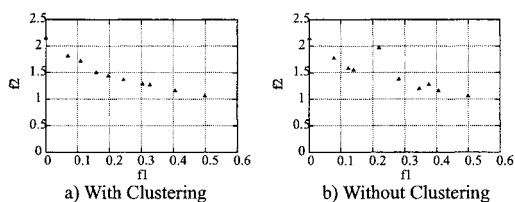


図 5: クラスタリングの効果の検証

4.3 Angular Cover Rate による提案メカニズムの効果の検証

次に提案メカニズムによる多様性の向上を数値的観点から検証する。提案メカニズムは、大きく分けると多目的 GA と多様性向上のステップの二つに分けることができる。本実験では、多目的 GA のみを行った場合と、多目的 GA を行った後に 1 回だけ多様性向上を図った場合の二つの場合を 30 試行で比較した。母集団サイズを 10、世代数を 100、次元数を 2, 5, 10 の 3 パターンとした。結果を図 6 に示す。

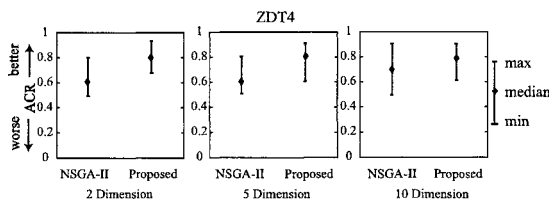


図 6: ZDT4 における Angular Cover Rate (Max, Median, Min)

図 6 から、提案メカニズムは NSGA-II だけを用いた場合よりも高い多様性を得られ、高次元でも効果があることがわかる。

4.4 提案メカニズムの繰り返しの効果の検証

提案メカニズムを探索過程で繰り返し用いることで、多様性の維持しながらの多目的 GA での探索が可能であるかを検証する。本実験では、探索途中の Angular Cover Rate の変化について検証する。母集団サイズ 10、世代数 300、次元数 10、提案メカニズムの適用回数 15 とした。Angular Cover Rate に関する結果を図 7 に示す。

図 7 において、上図は NSGA-II と提案手法によって得られた 30 試行の非劣解集合を全てプロットしたものである。下図は Angular Cover Rate の変化を示したものである。これらの図から、提案メカニズムを用いた探索では、従来手法に比べて高い多様性を維持できていることがわかる。

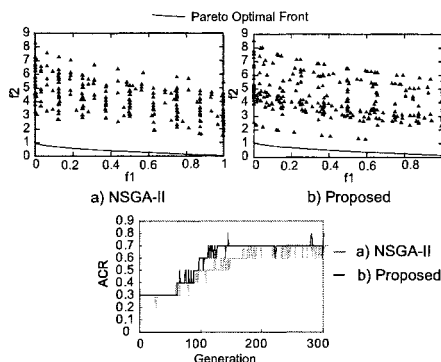


図 7: ZDT4 における Angular Cover Rate の変化

5 終わりに

本論文では、実問題に多目的 GA を適用した際にしばしば問題となる高い計算コストに対する対応策として、少数個体での多目的 GA に NI による多様性維持メカニズムを加えた方法を提案した。本メカニズムは、多目的 GA による探索、クラスタリング、ANN の学習、再配置の 4 つの処理から成っており、多目的 GA 部には様々な多目的 GA 手法を適用できるようになっている。またクラスタリングの適用により、近似関数の精度向上をはかっている。

提案メカニズムを代表的な多目的 GA 手法である NSGA-II に組みこみ、テスト関数を用いて提案メカニズムの有効性の検証を行った。数値実験の結果、NI を用いた提案メカニズムを有する手法は、多様性の向上の面において高次元においても良好な結果をえることが可能であることを確認した。

参考文献

- 1) D. E. Goldberg. *Genetic Algorithms in search, optimization and machine learning*. Addison-Wesley, 1989.
- 2) K. Chiba, S. Obayashi. High-fidelity multidisciplinary design optimization of aerostructural wing shape for regional jet. In *23rd Applied Aerodynamics Conference*, 2005.
- 3) Amrit Pratab Kalyanmoy Deb, Samir Agrawal 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.
- 4) K. Deb and T. Meyarivan. Constrained test problems for multi-objective evolutionary optimization. In *KanGAL report 200005, Indian Institute of Technology, Kanpur, India*, 2000.