

Latin Hypercube Design の 3 次元空間への拡張

三輪 恵律也[†] 望月 大義[†] 藤井 昭宏[†] 田中 輝雄[†]

工学院大学[†]

1 はじめに

大域探索において初期点の選択は、探索効率に影響を及ぼす。良い初期点は、探索にかかる時間を減少させ効率的にする。我々が対象とするのは、離散点から成る多次元空間において、方向探索と 1 次元探索を繰り返して最適値を求める探索アルゴリズムとする[1]。そのため、初期点の候補の集合として、規則的ではない分散した配置を得る手法を考える必要がある。

このような配置を評価する手法として Latin Hypercube Design(LHD)がある。LHD には多くのパターンが存在し、LHD のすべての配置が有用であるとはかぎらない。そのため LHD では配置の分散度合いを評価する式が用いられている。

さらに目的とするアルゴリズムは配置の自由度が増す 3 次元以上を対象としており、LHD のパターンも多くなる。これにより、分散した有用な配置の LHD を見つけること自体が難しくなる。

そこで、本研究では効率的に目的とするアルゴリズムの初期点候補の配置を得るために、条件を付加することで、有用な配置を得ることを目標とする。

2 Latin Hypercube Design

LHD とは、2 次元(x,y)n×n 正方形において行および列上に複数の点が存在しない n 点の配置である。ランダムに分散している配置もあれば、条件は満たすが規則的な配置もある。

LHD では分散度合いを評価するために、点間の距離を用いた以下の式がある[2]。

$$\Phi_p = \left[\sum_{k=1}^m J_k d_k^{-p} \right]^{\frac{1}{p}}$$

Φ_p の値が小さいほど分散した配置となる。 d_k は点間の距離、 J_k は同じ距離の個数を表している。引用元の論文[3]に準じて p の値は 50 とする。ここ

Extension of Latin Hypercube Design to 3D Space
Eriya Miwa[†], Masayoshi Mochizuki[†], Akihiro Fujii[†]
and Teruo Tanaka[†]

[†]Kogakuin University

では離散点から成る、3 次元空間内を対象とする。3 次元(x,y,z)n×n×n 立方体上の n 点の配置の場合、z 軸上にも複数の点を取らない配置とする。対象の 3 次元は配置の自由度が高いため、本研究では LHD に条件を付加することで、良い評価値の分散した配置を得ることを目標とする。

3 提案手法

LHD に以下の条件を順次付加していく。

条件1 ベクトルではなく平面で点の位置を制限

ベクトルではなく xy,yz,zx 平面の 3 面に複数の点が存在しない配置とする。図 1 は立方体の中心に点を配置した場合に、他の点を配置しない範囲を示している。図 1(a),(b),(c)が条件 1 の配置制限となる。

条件2 複数の点が存在しない平面を追加

条件 1 に加えて、45 度傾けた 6 つの平面上にも複数の点が存在しないように点を配置する。図 1(d)から(i)が条件 2 の追加された配置の制限となる。よって、条件 1 と合わせて合計 9 面に複数の点が存在しない配置となる。

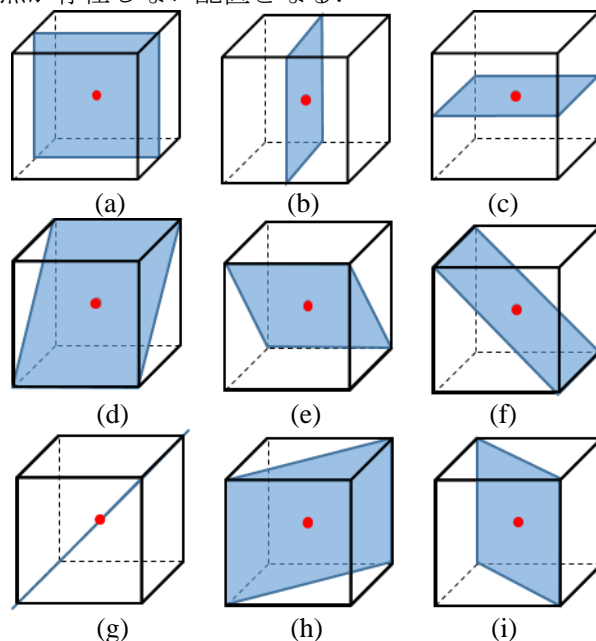


図 1 中心の赤点に対する他の点の配置禁止範囲

条件3 2点を結んだ直線上に3点以上の配置禁止

上記条件のみだと、点が直線上に規則的に並ぶ配置のパターンが存在する。本研究で想定する方向探索と1次元探索を繰り返す探索アルゴリズムは、直線上に点が並ぶと効率が悪くなる。そこで、2つの点を結んだ直線上に3点以上の配置を禁止する条件を追加する。

4 実験

4.1 実験対象

実験対象は以下の5つの配置とする。

- ① 条件1を付加した手法1
 - ② 条件1,2を付加した手法2
 - ③ 条件1,2,3を付加した手法3
 - ④ 条件を付加していない通常のLHD
 - ⑤ 乱数によってn点を配置するランダム配置
- 対象とする立方体は16×16×16とし、16点の配置とする。300パターンでの配置の評価値で比較を行う。

4.2 実験結果

実験結果を図2の度数分布に示す。手法2と3のLHDは300パターン全ての評価値 ϕ_{50} が0.3未満となり、他に比べて分散した配置となった。また表1から、条件を付加した方が分散した配置が得られることも確認できる。

4.3 初期値による実験結果

三次元関数の問題 Griewank において、16点のうちで最小の初期値300パターンに関する分析の結果を表2に示す。どの配置においても、最小値と平均値はほとんど同じであるが、最大値は条件を付加した手法を用いた方が小さい。このことから、条件を付加した方が分散した配置となり、良い初期値の点を含んだ配置となっていることが分かる。

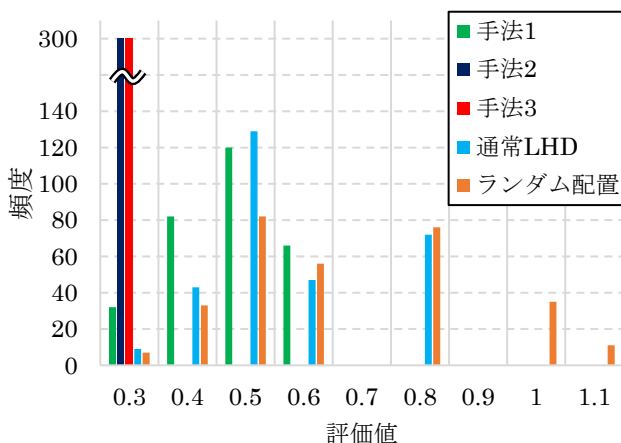


図2 実験対象による ϕ_{50} の度数分布

表1 ϕ_{50} の最大値, 最小値, 平均値

	手法1	手法2	手法3	通常LHD	ランダム配置
最大値	0.590	0.278	0.278	0.707	1.014
最小値	0.230	0.221	0.221	0.408	0.244
平均値	0.407	0.270	0.270	0.421	0.600

表2 三次元関数の問題 Griewank における選択した初期値に関する分析結果

	手法1	手法2	手法3	通常LHD	ランダム配置
最大値	-0.131	-0.148	-0.148	-0.129	-0.064
最小値	-0.890	-0.890	-0.890	-0.890	-0.890
平均値	-0.640	-0.613	-0.621	-0.629	-0.630

5 おわりに

本研究では、3次元空間の初期点の候補の集合を対象とした。方向探索と1次元探索を繰り返して最適値を求める探索アルゴリズムを想定する。初期点の候補の配置を評価する手法としてLHDが存在する。LHDでは分散度合いを評価する評価式が用いられている。本研究では効率的に目的とするアルゴリズムの初期点候補の配置を得るために、条件をLHDに付加することで、分散した配置を得ることを目標とした。

条件の付加の仕方をそれぞれ手法1,2,3とした。各手法と通常LHDと乱数によって決めた座標に配置するランダム配置の評価値を比較した。16×16×16の立方体に16点を配置する300パターンで実験を行った。実験結果から、手法2と3が他と比べて分散した配置となることが分かった。三次元関数の問題 Griewank における16点のうち最小の初期値300パターンの分析の結果では、最大値は条件を付加した方が小さい初期値となっている。このことから条件を付加したことで分散した配置となっているため、良い初期値の点を含みやすいことが分かる。

今後の課題として、直方体や4次元以降のLHDにおいても実験を行う必要がある。

謝辞 本研究の一部はJSPS科学研究費16H02823の助成を受けて行われた。

参考文献

- [1] M. Mochizuki, A. Fujii, T. Tanaka, Fast Multidimensional Performance Parameter Estimation with Multiple One-dimensional d-Spline Parameter Search, in Proc. IPDPSW2017, pp. 1426-1433, (2017).
- [2] M.D. Morris, T.J. Mitchell, Exploratory designs for computational experiments, Journal of Statistics Planning and Inference, Vol. 43(3), pp. 381-402, (1995).
- [3] R. Chen, D. Hsieh, Y. Hung, W. Wang, Optimizing Latin hypercube designs by particle swarm, Statistics and Computing, Vol. 23, pp.663-676, (2013).