

多目的最適化を利用したパラメータチューニング

廣安 知之[†], 石田 裕幸^{††}, 三木 光範[‡] 横内 久猛[†]

[†] 同志社大学生命医科学部 ^{††} 同志社大学大学院 [‡] 同志社大学理工学部

本稿では、多目的最適化において有効な探索が可能な多目的最適化手法を用い、新たなパラメータチューニング手法を提案した。実世界における事象やシステムを模倣したモデルのパラメータをチューニングする研究では、観測値との誤差同士のトレードオフの度合いを把握することができるように、多目的最適化の概念を利用したパレートのアプローチが注目されている。しかし、パラメータチューニングでは考慮すべき観測値が数多く存在するのに対し、一般的な多目的最適化手法は、目的数が多くなれば性能が著しく悪化してしまう。そこで、意思決定者の選好情報を利用する多目的最適化を適用したパラメータチューニング手法を提案した。意思決定者の選好情報を利用する多目的最適化では、探索する目的関数空間を意思決定者が好む領域周辺に限定することで、多目的最適化問題に対しても有効な探索を可能にする。ディーゼルエンジン燃焼モデルであるHIDECSのパラメータをチューニングする数値実験を通して、本手法を用い、観測値との誤差が小さく、観測値周辺に多様性のある解集合を得られることを確認できた。

Parameter Tuning Using Evolutionary Many-Objective Optimization

Tomoyuki HIROYASU[†], Hiroyuki ISHIDA^{††}, Mitsunori MIKI[‡] Hisatake YOKOUCHI[†]

[†] Faculty of Life and Medical Sciences, Doshisha University

^{††} Graduate School of Engineering, Doshisha University

[‡] Faculty of Knowledge Engineering, Doshisha University

In this paper, we proposed a parameter tuning method using Evolutionary Multi-objective Optimization (EMO) algorithms modified for an efficient search in many-objective problems. In researches to tune parameters of models that imitate real world phenomena and systems, the Pareto approaches using concepts of EMO have been studied because Decision Maker (DM) can understand the degree of trade-off among errors to observation values from two or more sets of parameters obtained by EMO. However, the performance of well-known EMO algorithms such as NSGA-II and SPEA2 is poor with many-objective problems even though there are many observation values in parameter tuning. Therefore, we applied a method using the preferences of DM to parameter tuning. In EMO using DM's preferences, efficient search in many-objective problems is achieved by limiting the search area around the region that DM prefers. Through the numerical experiments with HIDECS, which is a sophisticated phenomenological spray-combustion model, it was confirmed that the proposed method could obtain sets of parameters with accuracy and diversity in the vicinity of reference points.

1 はじめに

近年、様々な分野において、複雑な事象やシステムがモデル化され、コンピュータを用いてシミュレーションが行われている。本研究では、内部変数によって結果が異なるようなシミュレーションを対象とする。このようなシミュレーションの利用の1つとして、実験結果や観測値にシミュレーション結果が合うように内部変数を変化させ、未知の結果をシミュレーションにより得ることが挙げられる。このような場合、シミュレーション結果と実世界における観測値との誤差が小さければ小さい程、適切なパラメータを用いていると言える。しかし一般的に、比較すべき観測値の数は1つではなく複数であり、これら全ての基準を考慮しなければならない。また、これらの基準は互いに競

合する関係（トレードオフの関係）にある場合が多いため、パラメータチューニングは非常に困難な課題となる。この課題の対処方法として、以下の2つのアプローチが挙げられる。

- 1つの指標の導入
複数の基準を基に、重みなどを用いることにより1つの指標を導出し、その指標を最小化または最大化する方法¹⁾。
- パレートのアプローチ
複数の基準をそれぞれ目的と捉えることで、パラメータチューニングに進化的多目的最適化 (Evolutionary Multi-objective Optimization : EMO) を適用し、複数のパレート最適解を導出する方法²⁾。

1つの指標を導入するアプローチでは、最終的に得られた解（パラメータセット）を利用する意思決定者（Decision Maker :DM）が、各基準ついて重みを付与する必要があり、重みの付け方は最終的に得られる解に大きく影響を及ぼしてしまう。また、基準間に競合関係が存在すれば、実世界の全ての観測値と一致する解を得ることは不可能であるため、幾つかの基準については誤差を許容する必要がある。しかし、1つの指標を導入するアプローチでは、最終的に1つの解しか得られないため、得られた解がそれぞれの基準についてどの程度の誤差を有しているのかを把握できない。

それに対し、パレートのアプローチでは、様々なパレート最適解の導出が探索の目標の1つになるため、上記の重み付けの問題を回避することができる。更に、同程度の精度を有する様々な解の導出が可能のため、それらの解同士を比較することにより、各解がそれぞれの基準についてどの程度の誤差を有しているのかを相対的に把握することが可能になる。従って、近年ではパレートのアプローチの研究が注目されている。

しかし、パラメータチューニングでは、考慮すべき基準は2~3程度の少数ではないのに対し、パレートのアプローチの研究では、数多くの基準を取り扱っていない。多目的最適化問題において、全ての誤差をそれぞれ目的として捉えるパラメータチューニングのように、5個以上の目的関数が存在するような問題は特に“多目的最適化問題”と呼ばれる。多目的最適化では、取り扱う問題の真のパレート最適解を求めることができない問題が存在する。そこで本稿では、数多くの基準を考慮することが可能なパレートのアプローチのパラメータチューニング手法を提案する。

2 多目的最適化の問題点

一般的にパラメータチューニングでは数多くの観測値を考慮するため、パレートのアプローチによるパラメータチューニングは、多目的最適化の中でも、多目的最適化と捉えることができる。しかし、パレートのアプローチの研究では、全ての基準を目的として扱っていない。その理由は、NSGA-IIやSPEA2などの一般的なEMOを多目的最適化に適用した場合、探索性能が著しく低下してしまうためである。一般的なEMOを用いた多目的最適化では、探索を進めているにも関わらず、解集合の精度が悪化する現象が頻繁に起こる³⁾。更に、精度の向上と非劣解の数には密接な関わりがあるが、多目的最適化では、探索の初期段階からアーカイブ母集団は非劣解（ある解集合の中で他の

解に優越されない解）で占められてしまう。EMOは、適合度が高い解周辺に次世代の解を生成することで解の精度を向上させているが、多数目的最適化では解同士の優劣の区別が付きなくなるため、精度が向上しなくなると報告されている³⁾。

この問題に対して、選択圧を強くすることによりパレート最適フロントへの収束を促進し、精度を向上させる手法が提案されている。Average Ranking (AR), Summed Ratio, The Favour Relation, K-Optimality は、非劣解同士に異なる適合度を付与し、選択圧の強化を実現している。その中でも、ARが最も良好な探索性能を有するとDavid W. Corneらは報告している。ARは、各目的ごとにランクを計算し、全ての目的のランクを加算した値を適合度とするメカニズムである。

しかし、ARのように非劣解同士に異なる適合度を付与して選択圧を強くしたとしても、探索解集合は1点に収束してしまい、多様性が失われてしまうことが確認されている³⁾。

3 意思決定者の選好情報を利用したパラメータチューニング

本来ならば、パラメータチューニングにおいても、パレート最適フロント全域に分布する解集合を導出することが望ましい。しかし、多数目的最適化では、パレート最適フロントに敷き詰めるのに必要な解の数が莫大であるため、それは困難であると考えられる。そこで本研究では、パレート最適フロント全域に分布する解集合の導出の代わりに、限定された領域内で多様性を有する解集合の導出を多数目的最適化の目標とする。そして、精度が高く、限定された領域内で多様性を有する解集合を基にして、DMは局所的に、各目的間のトレードオフの度合いなどの対象問題や各解の特徴を把握できるようになると考えられる。この目標のための戦略として、以下の2段階のメカニズムが必要であると考えられる。

- STEP 1: パレート最適フロントへの収束
優越以外の精度向上のメカニズムとして、各解がどの程度限定した領域に即しているかを判断し、それにより選択圧を加える。
- STEP 2: 多様性の維持
限定した領域内で、多様性を維持するためにはどの解が重要であるのかを判断し、解の重要度を比較する際にその情報を利用する。
領域を限定するアプローチの一例として、DMの選好情報を用いる手法が提案されている⁴⁾。これらの手法では、DMの選好情報の基準として、希求点（目的関数空間上にDMが自由に設定する理

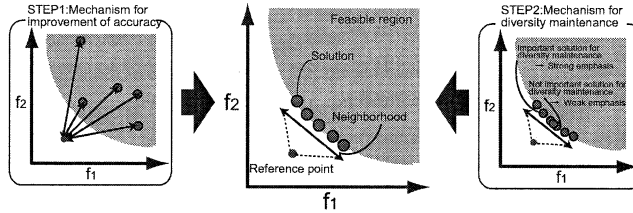


図 1: DM の選好情報を用いた多数目的最適化の探索戦略

想の点) を利用する。本戦略に希求点を適用した場合、希求点から最も近くにある 1 つの点に解集合が収束せず、その近傍にも解集合が分布すれば、目標を満たすことができると考えられる。DM の選好情報を用いた多数目的最適化の探索戦略を表す概念図を図 1 に示す。

DM の選好情報を用いた代表的な EMO である Reference point based NSGA-II (R-NSGA-II) ⁴⁾ では、優越に基づくランキングを行った後、STEP 1 として、希求点からのユークリッド距離に基づく適合度を割り当てる。その後、STEP 2 として ϵ -clearing が適用され、同一ランクの解集合の多様性を加味して適合度が更新される。

4 実問題における提案手法の有効性

本章では、ディーゼルエンジンの燃焼モデルである HIDECS^{5, 6)} のパラメータをチューニングする数値実験を行った。提案手法を、1 つの指標を導入する方法、一般的な EMO を適用する方法、選択圧を高める EMO を適用する方法と、精度および多様性の観点から比較した。

4.1 パラメータチューニング手法

- 1 つの指標の導入
全ての重みを 1 とし、Root Mean Square (RMS) エラーが最小の解を Distributed Genetic Algorithm (DGA) により導出した。
- 一般的な EMO の適用
代表的な EMO である NSGA-II をパラメータチューニングに適用した。
- 選択圧を高める EMO の適用
AR を用いた NSGA-II をパラメータチューニングに適用した。
- DM の選好情報を利用した EMO の適用
提案手法である DM の選好情報を利用した EMO のパラメータチューニングの代表例として、R-NSGA-II を利用した。希求点は実行可能領域外に設定可能なので、各誤差に対する重要度に偏りがないと仮定し、全ての誤差が 0 の点を希求点とした。また、 ϵ を 0.1 とした。

ここで、NSGA-II および DGA のパラメータを表 1 の通りに設定した。

4.2 検討事項

- 精度
観測値との誤差が小さくなればなる程、得られたパラメータの精度は高いと言える。従って、導出された解集合を用いた際に生じる観測値との誤差について比較を行った。
- 多様性
得られた解集合は、精度が同程度の場合、対象モデルや各パラメータセットの特徴を把握できるように、多様性を有することが望ましい。従って、導出された解集合によるシミュレーション値の分布を確認した。

4.3 HIDECS

近年、燃費に優れ、CO₂ の排出が少ないディーゼルエンジンが見直されている。有害物質排出に対する技術的な改善も行われ、これまで利用されていたものよりも更に効率的な小型のものが広く利用されるようになってきた。しかし、小型のディーゼルエンジンのシミュレーションに関する研究例はほとんどみられない。一方で、これまで行われてきた中・大型ディーゼルエンジンのモデルを、内在するパラメータを調整することにより、小型のディーゼルエンジンのシミュレーションに利用できれば非常に大きな効果が期待できる。

そこで、HIDECS を利用し、小型のディーゼルエンジンにおける観測値に近づくように、パラメータをチューニングする数値実験を行った。本実験では、各クランク角度におけるシリンダ圧力を観測値、5 つの空気導入係数を調整すべきパラメータとし、実機において観測された各クランク角度におけるシリンダ圧力にフィッティングするように、空気導入係数を調整した。空気導入係数はそれぞれ、0.0~3.0 の範囲内において、0.1 間隔で制御可能である。クランク角度を-7.0 から 50 まで 1.0 ずつ増

表 1: NSGA-II および DGA に用いたパラメータ

アルゴリズム	NSGA-II	DGA
探索母集団サイズ	100	100
アーカイブサイズ	100	—
エリートサイズ	—	1 × 層数
終了世代	500	500
交叉方法	2 点交叉	2 点交叉
遺伝子長	5 × 設計変数長	20 × 設計変数長
突然変異率	1.0/遺伝子長	1.0/遺伝子長
トーナメントサイズ	2	4
層数	—	10
移行率	—	0.5
移行間隔	—	5

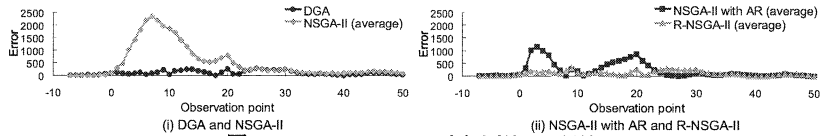


図 2: HIDECS における各観測値との誤差

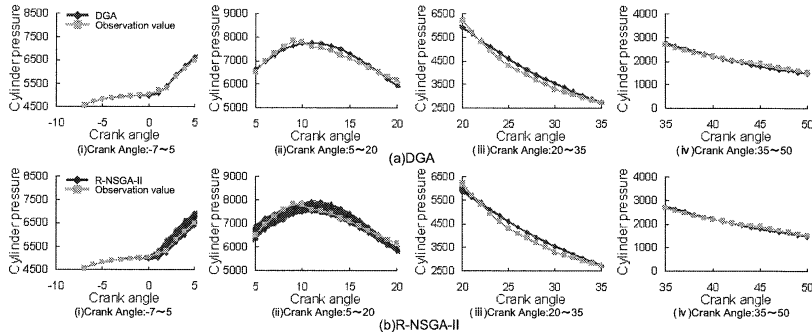


図 3: HIDECS における出力値の分布

加させた時のシリンダ圧力を計測したので、観測点の数は 58 となる。

4.4 実験結果

・精度

図 2 は、HIDECS において、提案手法である R-NSGA-II により導出された解集合および、DGA, NSGA-II, AR を用いた NSGA-II により導出された解の観測値との誤差を示す。

それぞれのグラフにおいて、横軸はクランク角度、縦軸は観測したシリンダ圧力との誤差を表す。R-NSGA-II による解集合の精度は DGA と同程度であり、AR を用いた NSGA-II, NSGA-II による解集合は他の手法の解より精度が悪いことを確認できる。

・多様性

図 3 は、HIDECS において、同程度の精度を示した提案手法である R-NSGA-II および、DGA により導出された解や解集合のシミュレーション値の分布を示す。

それぞれのグラフにおいて、横軸はクランク角度、縦軸はシリンダ圧力を表す。DGA では 1 つの解しか導出されないため、シミュレーション値は多様性を有していない。一方、R-NSGA-II によるシミュレーション値は、観測点付近に多様性を有しながら分布していることを確認できる。

5 まとめ

本稿では、数多く存在する観測値との誤差の最小化をそれぞれ目的と捉えるパラメータチューニング手法を提案した。一般的な EMO を用いた多目的最適化では、選択圧が低下し、探索性能は著しく悪化する。更に、選択圧を高める多目的最

適化手法が提案されているが、これらの手法を用いると解集合の多様性が失われてしまう。一方で、本来は多数目的最適化においてもパレートフロント全域に分布する解集合を得ることが望ましいが、これは計算コストを考慮すると非常に困難である。そのため、限定された領域内で多様性を有するパレート最適解集合の導出を目標とし、DM の選好情報を基に探索領域を限定する EMO によるパラメータチューニング手法を提案した。HIDECS を用いた数値実験を通して、提案手法により、精度が高く、観測点付近に多様性のある解集合を導出できることが分かった。

参考文献

- 1) J.C. Hargreaves, J.D. Annan, N.R. Edwards and R. Marsh. An efficient climate forecasting method using an intermediate complexity earth system model and the ensemble Kalman filter. *Climate Dynamics* 23(7-8) pp. 745-760, 2004
- 2) Andrew R. Price, I. I. Voutchkov, Graeme E. Pound, N. R. Edwards, Timothy M. Lenton and Simon J. Cox. Multiobjective Tuning of Grid-Enabled Earth System Models Using a Non-dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGAII). *Proceedings of the Second IEEE International Conference on e-Science and Grid Computing*. Amsterdam, Netherlands, IEEE, 117-117, 2006.
- 3) Tomoyuki Hiroyasu, Hiroyuki Ishida, Mitsunori Miki, and Hisatake Yokouchi. Difficulties of Evolutionary Many-Objective Optimization. <http://mikilab.doshisha.ac.jp/dia/research/report/2008/1006/004/report20081006004.html>, 2008.
- 4) K. Deb and J. Sundar. Reference point based multi-objective optimization using evolutionary algorithms. In *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO-2006)*, 635-642, 2007.
- 5) Hiroyuki Hiroyasu, Toshikazu Kadota, and Masataka Arai. Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions (Part 1 Combustion Modeling). *Bulletin of the JSME*, Vol. 26, No. 214, pp. 569.575, April 1983.
- 6) Hiroyuki Hiroyasu, Toshikazu Kadota, and Masataka Arai. Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions (Part 2 Computational Procedure and Parametric Study). *Bulletin of the JSME*, Vol. 26, No. 214, pp. 576.583, April 1983.