

NEAT における種ランク付けを用いた Niching 手法の提案

楠本 直輝[†] THAWONMAS Ruck[‡]立命館大学大学院 情報理工学研究所[‡]

1. はじめに

進化型神経回路網は、進化的アルゴリズムを用いてニューラルネットを最適化する手法であり、現在では多くの学習問題、ベンチマーク問題に有効で成功例がいくつも挙げられている。しかし、進化型神経回路網は、しばしば初期収束という問題に遭遇する。初期収束とは、進化的アルゴリズムにも共通する問題であり、解集団が大域的最適解を発見する前に一つの局所的な解に陥ってしまい、解探索が滞る現象である。この初期収束を回避するために Niching 手法という技術の研究が行われている。

典型的な Niching 手法としては、探索集団内の多様性を維持することである。多様性を維持することで解探索を分散させより大域的に探索を行えるようにする。また局所に陥った場合でも、解探索を別の方向に向かわせ滞りを防ぐ。

本研究では、進化型神経回路の一つである [1]NEAT を取り上げる。NEAT には、「種分化」と「適応度共有」の二つの Niching 手法が取り入れられている。NEAT の解探索性能を上げるために、Niching 手法の改良、交差の改良、基底関数の導入など様々な研究が行われている。

Niching 手法の関連研究として、[2]NEAT の種分化に用いられるトポロジ類似度の代わりに環境に対する振る舞いを用いる手法が提案されている。これにより解探索の集団が既存 NEAT よりも多様な振る舞いをすることが確認された。今回は、Niching 手法の改良を試みその結果の報告をする。

2. NEAT

2.1 NEAT の Niching

NEAT の Niching 手法として先ほど述べたように「種分化」と「適応度共有」の二つがある。前者は革新的なトポロジの保護が、後者はトポロジの多様性維持が目的である。

種分化は集団内に種を生成し、トポロジの類似する個体を種に振り分けていく。種をまたいだ交差はできないという決まりを持っており、個体間の生存競争は、その種の内部に限定される。そのため革新的なトポロジが生成された場合、種分化により自信を含む新たな種を形成し、他の種に属する個体との競争を避けることができる。

個体の種への所属基準としては、トポロジの類似度を定量的に測る尺度を用いる。二つの個体 i, j のトポロジ類似度距離 $\delta_T(i, j)$ は、次式で求められる。

$$\delta_T(i, j) = \frac{c_1 E}{N} + \frac{c_2 D}{N} + c_3 \bar{W} \quad (1)$$

ここで各変数は、 i, j 両個体の共有しない遺伝子の、不足する遺伝子数 D 、超過する遺伝子数 E 、そして両個体の共有する遺伝子の平均結合強度差 \bar{W} である。

A proposal of Niching with attaching ranks to species for NEAT
[†]Naoki Kusumoto, Graduate School of Information Science and Engineering, Ritsumeikan University
[‡]Ruck Thawonmas, Graduate School of Information Science and Engineering, Ritsumeikan University

c_1, c_2, c_3 は定数、 N は正規化項である。本研究では [1] に準拠して慣例的に N は 1 とする。

適応度共有は各個体の適応度をペナルティとして、その個体が属している種の規模で割る。前提として、NEAT の交叉の際の個体生成機会は、各個体の適応度に応じて与えられる。大規模種には適応度にペナルティを大きく与え、小規模または新種には、適応度のペナルティを小さくする。この適応度の補正によって、小規模または新種に属する個体へ交叉による個体生成機会を多く与えることによって、個体群の多様性を維持することができる。適応度のペナルティを与える方法として、ある個体 i の修正後の適応度 f'_i は、式 (1) で定義したトポロジ類似度距離を用いて、

$$f'_i = \frac{f_i}{\sum_{j=1}^n sh(\delta_T(i, j))} \quad (2)$$

ここで、共有関数 $sh()$ は、以下のように定義された関数である。

$$sh(\delta_T(i, j)) = \begin{cases} 0 & \text{if } \delta_T(i, j) > \delta_t \\ 1 & \text{else} \end{cases} \quad (3)$$

2.2 適応度共有による解探索

図 1 は、NEAT の世代ごとの種の規模分布を表したものである。図 1 より、NEAT の種生成は、新種または小規模種が増えていく傾向にある。また世代が進むにつれて種の数が増加していく。図 1 の世代の途中で種数が 1 になっている箇所は、NEAT の 50 世代以上適応度の増加が見られない場合一度種を全滅させる機構によるものである。これらの特徴は、個体の適応度を種に属する個体で割る適応度共有により、新種または小規模種の個体が子を生じ生成する機会を多く与えられ、中規模または大規模種は、世代を追うことに淘汰されるためである。中規模以上の種であっても探索を進めるうちに最適解を発見できる可能性はあるが、適応度共有の sh 関数により早い段階で淘汰されるのである。

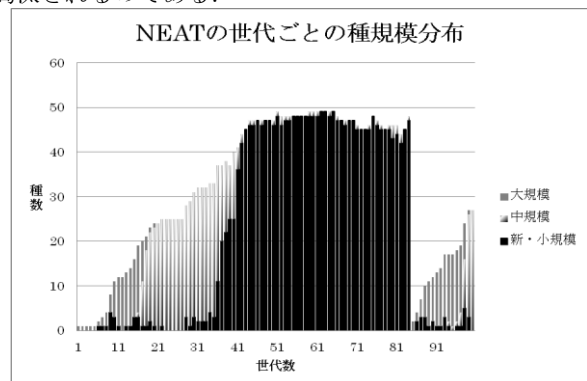


図 1: NEAT の世代ごとの種規模分布例

3. 提案手法

既存の適応度共有による新種または小規模種への偏りの改善と解探索が進めば解の発見に繋がる可能性のある中規模または大規模種にも次世代への子の生成機会を与えられるようにするために、種にランクを付けてランクごとに適応度のペナルティを与えることを提案する。種のランク付けの項目は、種の規模だけでなく多角的に評価するために4つの項目とする。4つの項目は、種の規模、種の平均適応度、種の平均適応度上昇率、種の世代経過数である。4つの項目ごとに種を評価し、それぞれの項目においてランク基準を設けランクポイントを割り振る。表1にそれぞれの評価項目とランクポイントの振り分け基準を示す。

表 1: 評価項目とランクポイント振り分け基準

ランクポイント	種の規模	種の平均適応度	種の平均適応度上昇率	種の経過世代数
3	N 未満	0.7以上	1.0以上	1世代(新種)
2	N 以上 $2N$ 未満	0.3以上 0.7未満	1.0	2~8世代
1	$2N$ 以上	0.3未満	1.0未満	9世代以上

表1において、種の規模の項目の N は、世代ごとの最も規模が大きい種の値を3で割った値であり、種の平均適応度の N は、世代ごとの最も平均適応度が高い種の平均適応度の値を3で割った値である。

種の規模では、その世代の最も大きい規模の種の値を基準にその他の種がいずれかのランクポイント基準に属するかを評価する。種の規模が少ない方が高いランクポイントを得る。

種の平均適応度では、種に属する個体の適応度を合計し平均値を求め、最も高い平均値を持つ種の値と最も低い平均値を持つ種の値をもとに0~1の間で正規化し、正規化値をもとにランクポイントを振り分ける。種の平均適応度が高い方が高いランクポイントを得る。

種の平均適応度上昇率では、各種の平均適応度において前世代と現世代の平均適応度から上昇率を求め上昇率ごとにランクポイントを振り分ける。前世代よりも平均適応度が上昇すれば高いランクポイントを得る。

種の世代経過数では、種が生まれてから何世代経過したかをみる。新種は、高いランクポイントに振り分ける。NEATには15世代以上経過した種には適応度共有とは別に非常に高いペナルティを自動的に割り当てる機構を持っているためランク基準は15世代を基準として2分割した基準を設けている。

これら4つの項目により各種を評価し、それぞれランクポイントを各項目で計算し、それらを足し合わせ合計値に応じたペナルティを与える。表2に、各ランクポイントとランク付け基準、さらにそれぞれのランクに応じたペナルティを示す。

表 2: ランク付け基準とランク毎のペナルティ

ランクポイント合計値	ランク	ペナルティ
10~12	1	世代毎の種の最小値
7~9	2	(世代毎の種の最大値+最小値)/2
4~6	3	世代毎の種の最大値

4. 実験

提案手法を導入したNEATを以下RankNEATとする。RankNEATとNEATの性能を比較するためにUCI machine LearningとStat Libの近似ベンチマーク問題の4つのデータAuto-MPG, Housing, Bolt, Abaloneを用いて10交差検証を行う。10交差検証において真値との二乗誤差を性能の指数とする。

個体数は200, 世代数は200とし、ノード追加突然変異確率を0.03, リンク追加突然変異確率を0.05, トポロジ類似度距離閾値を3.0, (1)の式の係数 c_1, c_2, c_3 をそれぞれ1.0, 1.0, 2.0に設定した。またT検定を用いて有意差も合わせて算出する。

表3に各交差において算出された二乗誤差の平均値, 表4にT検定の結果を示す。

表 3: NEATとRankNEAT10交差二乗誤差平均値比較

	Abalone	Housing	Auto-MPG	Bolt
NEAT	3.94	1.93	0.43	0.21
RankNEAT	3.95	1.42	0.27	0.25

表 4: 10交差T検定値

	Abalone	Housing	Auto-MPG	Bolt
T検定値	0.97	0.02	0.05	0.37

結果より、HousingとAuto-MPGについては、有意傾向をもってRankNEATが既存NEATの性能を上回ることができた。AbaloneとBoltに関しては、10交差二乗誤差平均値では性能を下回ったが、有意差はみられなかった。性能を上回ったHousingとAuto-MPGは、データ数が比較的少なく特徴数も少ない。性能を下回ったAbaloneは非常にデータ数が多く、Boltは非常にデータ数が少ない問題である。

5. おわりに

NEATのNiching手法である適応度共有に種のランク付けを導入し、ペナルティ基準を変更することにより解探索を効率的に行えるように改変した。その結果問題によっては、既存NEATの性能をRankNEATが上回ることが確認された。しかし、問題のデータ数、特徴数によっては既存NEATと性能は変わらないかまたは下回ることもあった。

今後の課題としては、ランク毎のペナルティをより適切な値に変化させる機構の導入や、ランク付け項目の追加、選別、見直しが求められる。さらに拡張として、NEATとRankNEATの適応度共有を組み合わせる必要に応じて切り替えていくなどの相互作用により性能の向上が期待されるであろう。

参考文献

- [1] Stanley, K. and Miikkulainen, R.: Evolving neural networks through augmenting topologies, *Evolutionary Computation* (2002)
- [2] NEATにおける振る舞いに基づく多様性維持, 森口博貴, 第24回人工知能学会全国大会 (JSAI2010)
- [3] Trujillo, L., Olague, G., Lutton, E. and de Vega, F.: Discovering several robot behaviors through speciation, *Applications of Evolutionary Computing*, LNCS:4974 (2008)