

設計変数空間の多様性を保持する多目的遺伝的アルゴリズムの提案

Multi-objective Genetic Algorithm for the diversity preservation of variable space

金美和

Mifa KIM

Abstract:

Since most real-world problems have several types of objects, multi-objective optimization methods are very useful. There are several multi-objective genetic algorithms have been proposed. However, in many multi-objective genetic algorithms, there are operations to keep diversity on the objective space, but the diversity on the variable space has not yet been considered. In this paper, SPEA2+ is presented. SPEA2+ apply two archives to keep diverse solutions to the object space and variable space. To clarify the characteristic and effectiveness of the proposed method, SPEA2+ is applied for several test functions. In the comparison of SPEA2+ with NCGA, SPEA2+ derived the good results and affects of the new mechanism were clarified. From these results, it is concluded that SPEA2+ is one of the good algorithms for multi-objective optimization problems.

1 はじめに

制約条件下で目的関数値を最大, もしくは最小にする設計変数を求める問題を最適化問題と呼ぶ. 中でも, 複数の目的関数を対象とする問題は多目的最適化問題と呼ばれる.

多目的最適化問題の多くは目的関数が互いに競合するため, 完全最適解は存在しない. そのため多目的最適化問題における意思決定法はいくつかあるが, その一つにパレート最適解集合を求めるアプローチがある. 実社会における設計問題などでは, ある目的の変更が他の目的に及ぼす影響を把握することが重要となるため, パレート最適解集合を得ることによって目的関数間のトレードオフの関係を明確にすることは有意義である.

近年, パレート解集合を求める手法に, 多点探索である遺伝的アルゴリズム (GA) を多目的最適化問題に適用した多目的 GA が数々報告されている. これらの多目的 GA は, 目的関数空間における解の分布を考慮した操作を組み込むことによって, 多様なパレート最適解を得ることができる. しかしながら, その多くが設計変数の多様性については考慮していない.

最適化手法の大きな目標は, 最適な設計変数を得ることによって優れた最適解を得ることである. そのため様々な設計変数によって同等の最適解が得られるような場合, 設計変数の多様性はパレート最適解の広がりと同様に重要であると考えられる.

そこで本論では, 設計変数空間に多様な解を求めるメカニズムを組み込んだ, 新たな多目的遺伝的アルゴリズム SPEA2+ を提案する. 提案する手法では, アーカイブを 2 つ用意し, 目的関数空間および設計変数空間に多様な解を保存している.

本論ではいくつかの数値実験を通して提案する SPEA2+ の有効性について検証を行う.

2 多目的最適化問題**2.1 多目的最適化問題**

多目的最適化問題 (Multiobjective Optimization problems: MOPs) は, k 個の互いに競合する目的関数 $f(\vec{x})$ を m 個の不等式制約条件のもとで最小化する問題と定式化される¹⁾.

多目的最適化問題では, 各目的関数がトレードオフの関係にある場合, 単一の解を得ることはできない. そのため, 最適解の概念の代わりにパレート最適解 (非劣解) の概念¹⁾ が導入されている.

2.2 パレート最適解

$\vec{x}_1, \vec{x}_2 \in X$ に対して, $f_i(\vec{x}_1) \leq f_i(\vec{x}_2), i = 1, \dots, k$ で, しかも, ある j について $f_j(\vec{x}_1) < f_j(\vec{x}_2)$ であれば, \vec{x}_1 は \vec{x}_2 に支配されないという. さらにある \vec{x}^* に支配されないような $\vec{x} \in X$ が存在しないとき, \vec{x}^* をパレート最適解と呼ぶ¹⁾. Fig. 1 に, 2 目的 ($k = 2$) の場合のパレート最適解の例を示す.

実社会における設計問題は目的が複数存在し, またそれらの目的は互いに競合していることが多い. しかしながら目的間の詳細なトレードオフの関係は一般に不明である. そのため多目的進化的計算法の一つに, このパレート最適解を集合として求め, これらの関係を明らかにするアプローチがある. パレート最適解集合の形状を示し, ある目的が他の目的に及ぼす影響を把握することによって, 意思決定者はより設計を容易に行える.

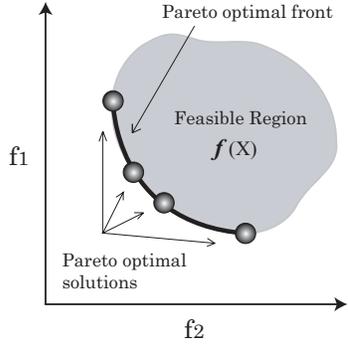


Fig. 1 Pareto optimal solutions

3 多目的遺伝的アルゴリズム

近年、パレート最適解集合を求めるために、多点探索を行う遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm:GA) を適用した多目的 GA の研究が盛んに行われている (2, 3, 4, 5) . 中でも、渡邊らによって提案された NCGA は最も有効な手法の一つであると報告されている⁶⁾ .

次に NCGA に組み込まれている重要なメカニズムについてまとめる .

3.1 近傍交叉

一般に、大域的な探索を行う多目的 GA では、親個体の探索方向が大きく異なっているために、効果的な交叉を行えないといった問題がある . そこで NCGA では、目的関数空間において近傍の個体同士を交叉させ、子個体を生成する近傍交叉を用いている . この近傍交叉では、任意の目的関数値を基準に個体群をソートすることによって、隣接しあう個体を近傍個体と定義している⁶⁾ . ただし、毎世代同じ個体同士の交叉となるのを避けるために、ソート後に任意の範囲で個体をランダムに入れ替える近傍シャッフルを行う .

3.2 適合度の高い個体の保存

この方法は、探索時点における適合度の高い個体を、探索個体群とは別にアーカイブに保存するものである . 一般的な多目的 GA では、このアーカイブに存在した個体を、バイナリトーナメント選択を用いることによって探索個体群へ反映し、探索の高速化を実現している . バイナリトーナメント選択とはアーカイブ個体群から任意の 2 個体を取り出し、適合度の高い個体を選択するというものである . この操作を行うことによって、探索個体群により精度の高い個体が集まることになる .

しかしながら多目的 GA では多くの場合、探索と共にアーカイブ内の劣解の割合は減少し、探索の後半では全個体が非劣解となる . よってバイナリトーナメント選択により探索個体群を生成すると、非劣解の多様性が失われる . そこで NCGA ではアーカイブ個体群を全て探索

個体群としてコピーする操作を用いる . このコピー操作によって探索個体群の多様性が保持され、大域的な探索が行える .

3.3 個体の密集度

パレート最適解を集合として求める場合には、より多様な解集合を得ることがひとつの目標となる . そのためには、個体の選択時に密集度に基づいた判断を行う必要がある . 密集度を求める代表的な手法に、端切り法 (truncation method) がある .

次に、端切り法の手順を示す .

Step 1:

目的関数空間において最も近接する非劣解 i と j を削減対象の候補として選択する . また $k = 2$ とする .

Step 2:

非劣解 i と j に対して、 k 番目に近い非劣解との距離 σ_i^k, σ_j^k を計算する .

Step 3:

$\sigma_i^k < \sigma_j^k$ もしくは $\sigma_i^k > \sigma_j^k$ の場合、距離の小さい非劣解を削除する . また $\sigma_i^k = \sigma_j^k$ の場合には、 $k = k + 1$ として Step2 へ戻る .

端切り法の適用は、現世代の非劣解の数によって決まる . もし非劣解がアーカイブサイズよりも少ない場合は、全非劣解がアーカイブに保存される . しかしアーカイブサイズ以上の非劣解が存在する場合は、端切り法によって非劣解がアーカイブサイズまで削減される .

4 提案手法

NCGA を代表とする数々の多目的 GA は、上記のような操作を組み込むことによって、精度が高く、目的関数空間において多様なパレート最適解集合を求めている . しかしながらその多くは、設計変数の多様性に関しては考慮していない . 最適化手法の大きな目標は、最適な設計変数を得ることによって優れた最適解を得ることである . そのため、様々な設計変数を用いて同等の最適解が得られるような場合、設計変数の多様性はパレート最適解の広がりと同様に重要であると考えられる .

そこで本論では、目的関数空間および設計変数空間の両空間に多様な解を求める手法を提案する . 提案する手法では、NCGA のアルゴリズムに、設計変数の多様性を保持する新たな操作を加えている . 本論ではこの提案手法を SPEA2+ と呼ぶ .

次節において、設計変数の多様性を保持する操作について述べる .

4.1 設計変数の多様性

NCGA では、アーカイブに保存する非劣解集合に端切り法を適用することによって、目的関数空間の多様性を保持している . そこで提案する SPEA2+ では、アー

カイクを2つ設け、設計変数空間にも多様な解を保存する手法を提案する．この操作ではまず、現世代で得られた非劣個体群を両アーカイブにコピーする．そして各アーカイブ個体群に対して、目的関数空間もしくは設計変数空間のユークリッド距離に基づいた端切り法を適用する．このようにして各空間において多様な解をそれぞれのアーカイブに保存する．

4.2 探索母集団への反映

NCGAでは、3.2でも述べたように、目的関数空間用アーカイブの個体を全て反映させることによって探索母集団を生成している．しかし提案するSPEA2+では、設計変数空間にも多様な解を生成するために、設計変数空間用アーカイブに保存されている非劣解も、探索母集団に反映しGA操作を適用している．ただし設計変数空間用アーカイブから生成された探索母集団に対しては、設計変数空間における近傍交叉を適用している．

また、設計変数空間アーカイブの探索母集団への導入は、探索母集団の探索効率を促すために、その世代の非劣解がアーカイブサイズを越え、端切り法が適用された場合にのみ、順に適用される．

Fig. 2にSPEA2+の概念図を示す．

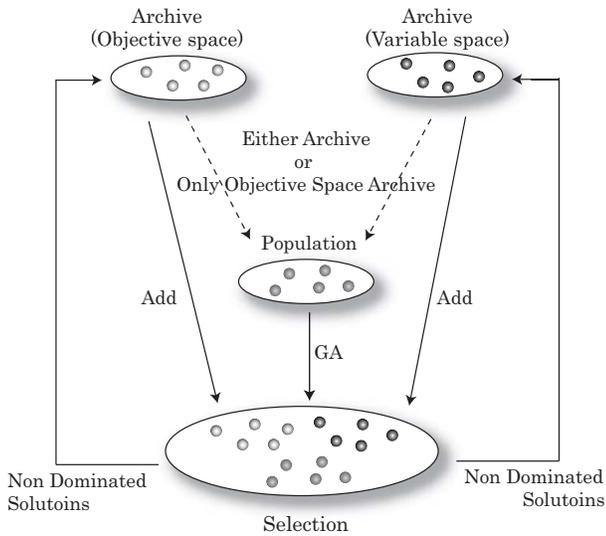


Fig. 2 Basic concept of SPEA2+

4.3 SPEA2+の概要

以下に提案するSPEA2+のアルゴリズムを示す．

Step 1:

初期個体群 P_0 を生成し、空のアーカイブ個体群を A_0^O , A_0^V とする．また世代 $t=0$ とする．

Step 2:

P_t, A_t^O, A_t^V における全個体の適合度をNCGAで用いている割り当て法⁴⁾をもとに計算する．

Step 3:

P_t と A_t^O, A_t^V における全ての非劣解を A_{t+1}^O, A_{t+1}^V にコピーする．もし非劣解がアーカイブサイズ N を越えていたならば、 A_{t+1}^O には目的関数空間における端切り法を、 A_{t+1}^V には設計変数空間における端切り法を適用し個体を削減する．

一方、非劣解の数が N よりも小さければ、 P_t, A_t^O, A_t^V における優良解を用いて A_{t+1}^O, A_{t+1}^V を満たす．

Step 4:

$t \geq T$ もしくはその他の終了条件が満たされた場合、探索を終了する．

Step 5:

Step 3で端切り法が適用された場合には、 A_{t+1}^O もしくは A_{t+1}^V を交互にコピーし P_{t+1} を生成する．端切り法が適用されていない場合は、 A_{t+1}^O を P_{t+1} にコピーする．

Step 6:

P_{t+1} に対して近傍交叉、突然変異を行う． $t=t+1$ として Step 2 に戻る．

5 数値実験

提案する手法SPEA2+の有効性を検証するために、NCGAとの比較検証を行う．ただし本実験では、目的関数の精度についてはSPEA2+における目的関数空間用アーカイブの値を用いて比較し、設計変数空間の多様性に関してはSPEA2+における設計変数空間用アーカイブの値を用いてNCGAと比較している．

5.1 対象問題

本数値実験では、2つのテスト関数を用いた．以下、各対象問題の特徴について述べる．

5.1.1 Biased Pareto-optimal Front(BPF)

テスト関数BPFは、変数が均一に分布している場合、パレート最適フロントは偏るという特徴を持った問題である．また目的関数 f_1 が非線形関数であるため、 f_1 の値が一意に定まらない．式(1)にBPFの式を示す．

$$\begin{aligned} \min \quad & f_1 = x_1 \\ \min \quad & f_2 = g \times h \\ g = & 1 + 10(N - 1) + \sum_{i=2}^N (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)) \\ h = & \begin{cases} 1 - \left(\frac{f_1}{g}\right)^{0.5}, & \text{if } f_1 \leq g \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (1) \\ x_1 \in & [0, 1], \quad x_i \in [-30, 30], \quad i = 10. \end{aligned}$$

5.1.2 KUR

テスト関数KURのパレート最適フロントは非連続の非凸となる．この問題では、設計変数空間において大きく3つのパレート最適フロント領域と1つの点0が存在する．設計変数とパレート最適フロントとの関係を見いだすのは困難な問題となっている．式(2)にKURの式を示す．

$$\min f_1 = \sum_{i=1}^{N-1} (-10 \exp(-0.2 \sqrt{(x_i^2 + x_{i+1}^2)}))$$

$$\min f_2 = \sum_{i=1}^N (|x_i|^{0.8} + 5 \sin(x_i)^3)$$

$$x_i \in [-5, 5], i = 3. \quad (2)$$

5.2 比較方法

各手法により得られた解集合の精度は、下記に示す優越個体割合を用いて比較する。また設計変数空間の多様性に関しては、一般化分散値を取ることによって検証する。以下、優越個体割合について説明する。

優越個体割合

優越個体割合 (Ratio of Non-dominated Individuals:RNI) は、2つの手法により得られた解の優越度合いを比較することによって手法を評価する方法である。RNIではまず、2つの手法で得られた解集合 S_1, S_2 の和集合を S_U とする。そして S_U においてどの解にも劣らない解を選び出し S_P とする。 S_P における各手法の解の割合を調べ、その値を評価値とする。よって、最大値 100% に近いほど、もう一方の手法よりも真の解に近い解が得られているといえる。

5.3 GA パラメータ

本実験では Table 1 に示す GA パラメータを用いた。

Table 1 Parameter

Population size	100
Maximum generation	500
Crossover rate	1.0
Crossover method	One point Crossover
Chromosome length	20 × Number of variable
Mutation rate	1/Chromosome length

5.4 実験結果

提案する SPEA2+ と NCGA を、各問題に 30 試行適用した。RNI に関しては各手法の 30 試行を全比較した平均を、一般化分散は 30 試行の中央値を示す。

5.4.1 BPF の実験結果

Fig. 3 に対象問題 BPF における RNI と一般化分散の結果を示す。右図の横軸は世代数、縦軸は一般化分散値を示す。ただし対象問題 BPF では、変数 x_1 以外の変数が全て 0 となった場合にパレート最適解が得られる問題である。よって一般化分散の値は変数 x_1 のみを用いた。

Fig. 3 の左図から、SPEA2+ における目的関数空間のアーカイブの精度は NCGA の結果よりも勝っている。また一般化分散の図から、提案する SPEA2+ は探索の

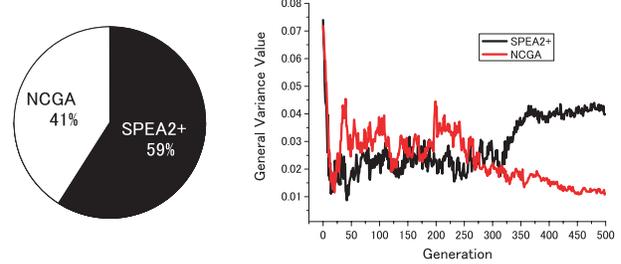


Fig. 3 RNI and General Variance of BPF

後半において設計関数空間において多様な解を求めていることが確認できる。

解の分布を確認するために、目的関数空間におけるプロット図、および f_1 と変数 x_1 の関係図を Fig. 4 に示す。

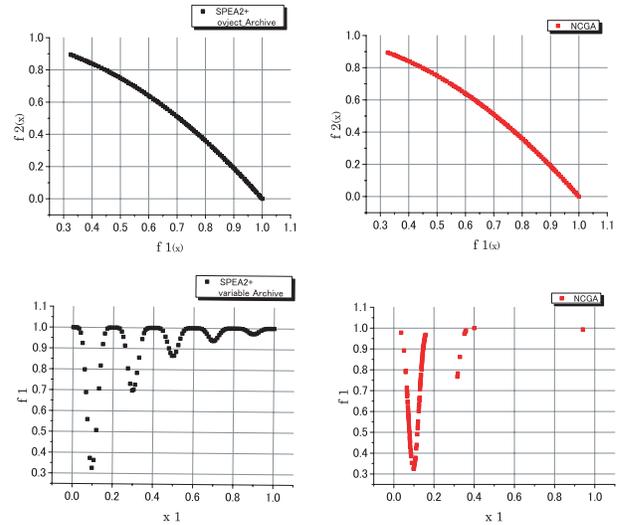


Fig. 4 Plot of objective space and f_1 - x_1 relation

5.4.2 KUR の実験結果

Fig. 5 に対象問題 KUR における RNI と一般化分散の結果を示す。右図の横軸は世代数、縦軸は一般化分散値を示す。

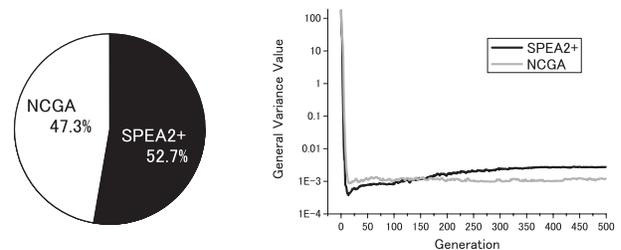


Fig. 5 RNI and General Variance of KUR

Fig. 5 の左図より、提案する SPEA2+ は目的関数空間における精度が NCGA に比べて劣っていないことが確認できる。また、右図では探索前半において一般化分散値が NCGA よりも小さくなっているにもかかわらず、探索途中から上昇している。これは設計変数空間用アー

カイクを GA 操作に導入したことが効いていると考えられる。Fig. 6 に設計変数空間における 1 試行のプロット図をそれぞれ示す。SPEA2+ がより多様な設計変数値を求めていることが確認できる。

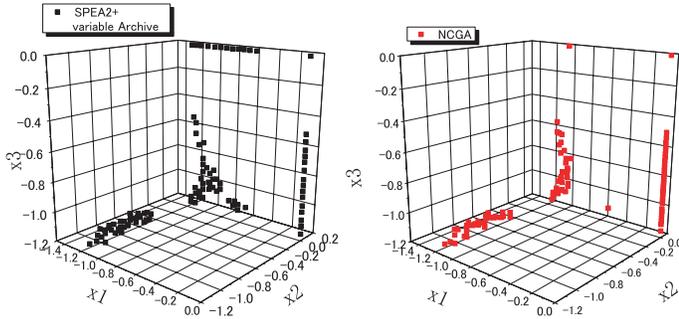


Fig. 6 Plot of variable space

5.5 考察

Fig. 3, Fig. 5 の結果から，提案する SPEA2+ は NCGA と比較して探索精度は劣っていなかった。これは SPEA2+ では，現世代の非劣解がアーカイブサイズを越えた場合にのみ，設計変数空間のアーカイブに保存されている個体を探索母集団に反映しているためであると考えられる。つまり，非劣解の数が大きく変動する探索途中の段階においては，SPEA2+ は NCGA と同様の解探索を行っている。よって，探索母集団がパレート最適フロントに到達できるこれら問題においては，SPEA2+ は NCGA と同等の精度を得ることができる。

一方，設計変数空間の多様性に関しては，一般化分散の値から SPEA2+ の設計変数空間用のアーカイブの方が高い値を示していた。特に，どちらの対象問題においても，探索の終盤において一般化分散値が上昇していた。これは，SPEA2+ では設計変数空間用アーカイブの探索母集団への導入を，非劣解が増え，端切り法が適用される探索終盤において行ったことが要因であると考えられる。実際に，設計変数空間のアーカイブを探索母集団に加える操作が，設計変数空間にどのような影響をもたらすのかを確かめるために，追加実験を行った。

追加実験では，SPEA2+ のアルゴリズムにおいて目的関数空間のアーカイブのみを探索母集団に反映するとの比較を行った。対象問題には KUR を用いた。SPEA2+, NCGA, および目的関数空間のアーカイブのみを探索母集団に反映する SPEA2+ の一般分散の値を Fig. 7 に示す。

Fig. 7 の結果から，目的関数空間のアーカイブのみを探索母集団に加えた場合では，設計変数空間の多様性は保持できないことが確認できる。このことから，設計変数空間のアーカイブを探索母集団に加えることによって，設計変数空間に多様な解を生成しているといえる。

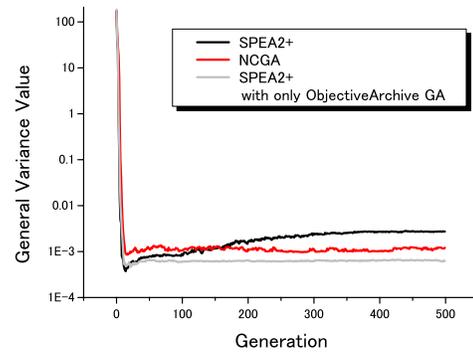


Fig. 7 General Variance

6 まとめ

本論では，設計変数空間に多様な解を求めるメカニズムを組み込んだ，新たな多目的遺伝的アルゴリズム SPEA2+ を提案した。SPEA2+ では，優れた個体を保存するアーカイブを 2 つ設け，目的関数空間と設計変数空間の両空間に多様な解を保存している。また，それぞれのアーカイブを探索終盤において母集団に反映することによって，それぞれの空間の多様性を保持させている。数値実験の結果，SPEA2+ は目的関数空間における精度を損なうことなく，設計変数空間に多様な解も得ていることが確認できた。これらのことから SPEA2+ は有効な手法であるといえる。

参考文献

- 1) 坂和正敏, 石井博昭, 西崎一郎. ソフト最適化. 日本ファジ学会編 ソフトコンピューティングシリーズ 第 2 巻. 朝倉書店, 1995.
- 2) D. E. Goldberg. *Genetic Algorithms in search, optimization and machine learning*. Addison-Wesley, 1989.
- 3) C. M. Fonseca and P. J. Fleming. Genetic algorithms for multiobjective optimization. In *Proceedings of the 5th ICGA*, pp. 416–423, 1993.
- 4) E. Zitzler, M. Laumanns, and L. Thiele. SPEA2: Improving the Performance of the Strength Pareto Evolutionary Algorithm. In *Technical Report 103, Computer Engineering and Communication Networks Lab (TIK), Swiss Federal Institute of Technology (ETH) Zurich*, 2001.
- 5) K. Deb, S. Agrawal, A. Pratab, 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.
- 6) 廣安知之, 三木光範, 渡邊真也. 近傍培養型遺伝的アルゴリズムによる多目的最適化. 情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用, No.SIG 10(TOM7), pp. 183–198, 2002.