応答曲面法を利用した多目的遺伝的アルゴリズムの検討

鈴木　和徳
Kazunori SUZUKI

1　はじめに

実世界の問題には最適化すべき評価基準が複数ある場合が多く，このような問題のことを多目的最適化問題と呼ぶ．多目的最適化問題において複数の評価基準は互いにトレードオフの関係にあることが多いため，全ての基準に対して最適値となる完全な最適解というものは存在せず，他のどの解にも劣らない解であるパレート最適解を数多く求めることが目的となる．そのため多目的最適化問題を解く際には，複数のパレート最適解を一度の探索で求めることのできる遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) がよく用いられる．

しかし GA で探索を行う場合多くの評価計算が必要となり，一度の評価計算に時間の掛かるような問題では計算コストが膨大となるため実用的ではないという問題がある．この問題の解決策として，対象問題を近似することが考えられる．近似された目的関数では一度の評価計算に掛かる時間が非常に短いため，GA による探索で多くの評価計算回数が必要となったとしても計算コストはかからない．本発表では応答曲面近似法を多目的 GA に組み込むことについて検討する．

2　応答曲面法

応答曲面法とは製品プロセスの最適化やばらつきの減少などの品質工学の分野において実用化されているもので．設計変数と目的関数の関係を効率よく関数近似し，工程を最適化する方法である．

2.1　応答曲面

応答曲面とは n 個 $(n > 1)$ の予測変数 $x_i (i = 1 \cdots n)$ から予測される応答 y の関係式を近似したものである．

$$y = f(x_1 \ldots x_n) + \epsilon \quad (1)$$

ここで ϵ は誤差である．

2.2　応答曲面法の流れ

Step1

応答曲面は二次多項式により作られる場合が多い．2 変数の場合は次式の形になる．

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 x_1 x_2 + \epsilon \quad (2)$$

その場合には $x_3 = x_1^2$，$x_4 = x_2^2$，$x_5 = x_1 x_2$ と置くことにより，式 (3) のような線形重回帰に変換する．

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 + \beta_5 x_5 + \epsilon \quad (3)$$

β は未知係数である．

線形関数化することにより，最小二乗法で容易に係数を決定でき，またその近似式の統計的評価が可能となる．

Step2

実験計画法により実験を行い n 個のデータの組 $(y, x_0, x_1, \cdots)$ を得る．

Step3

n 個のデータをもとに最小二乗法を用いて，β を決定する．式 (3) が完成する．

Step4

作成した応答曲面が有効かどうかの検定をする．

2.3　実験計画法

未知係数 β は，いくつかの実験点に対して実際に実験をし，その応答を用いて推定される．実験点の個数は多いほど応答曲面近似式の精度は向上するが，実験をするには多くのコストが掛かるため，計画的に実験点を決定し，コストを抑える必要がある．これらの実験点の決定方法が実験計画法である．

実験計画法には様々な方法があるが，今回は GA を用いて，D 最適基準 [1] が最適となるような実験点の組を探索する方法を用いた．これによりテスト関数 ZDT4（$0 < x_1 < 1$，$0 < x_2 < 5$）に関して Fig. 1 に示すような実験点の組を得ることができる．

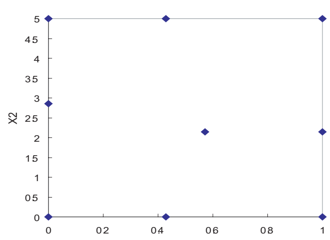

Fig. 1　得られた実験点

これらの点に関しては，実際に実験を行う．つまり，近似前の真の目的関数を用いて評価計算を行う．

2.4 最小二乗法

実験計画法により得られた n 個の実験点を式 (3) に代入することで，β に関する n 個の式が得られる．それぞれの式中の ϵ の二乗を全て足し合わせた値が最小となるように β を決定する手法が最小二乗法である．

2.5 応答曲面の検定

作成した応答曲面近似式の適合性を決定係数により評価する．近似式の各係数に対して，t 検定を行うことにより，その有意性を判定することができる．不必要と判定された変数は削除することにより，より適合性の高い近似式を得る事ができる．

3 多目的最適化への応答曲面法の適用

応答曲面法を多目的最適化問題に利用する．

1. 複数の目的関数に対してそれぞれ応答曲面近似式を作成.

2. 応答曲面に対して多目的 GA を実行する．

3. 得られたパレート最適解の中からいくつかを実験点として元の実験点に追加する

4. 新たに応答曲面を作成し，再度探索する．

近似された目的関数に対する評価計算コストは元の目的関数と比べて無視できるほど小さいため，多くの個体数で多くの世代を掛けて GA による探索ができる．近似によって得られたパレート最適解を新たに実験点とすることでパレート最適解付近の近似精度が増す.

4 数値実験

評価計算を少なく抑えるためには，少ない個体数で GA を実行するという解決策も考えられる．そこで，多目的最適化のテスト問題に対して，応答曲面法を利用した多目的 GA と，個体数を少なくした多目的 GA を適用し，比較する．対象問題は 2 次元の ZDT4 とする．使用した多目的 GA は SPEA2 である．以下にそれぞれの手法についての実験条件を示す.

応答曲面を利用した多目的 GA 2 次多項式で近似をすることとし，初期の実験点は 9 とする．得られた応答曲面に対して SPEA2 を 100 個体，100 世代で実行する．さらに得られたパレート最適解の中から 3 点選び，初期の実験点に追加し新たに近似を行う．

個体数を少なく設定した多目的 GA 個体数を 10 とし，元の目的関数に対して SPEA2 を実行する．

4.1 実験結果

応答曲面を利用した多目的 GA による結果を Fig. 2 に，少ない個体数で実行した多目的 GA による結果を Fig. 3 に示す.

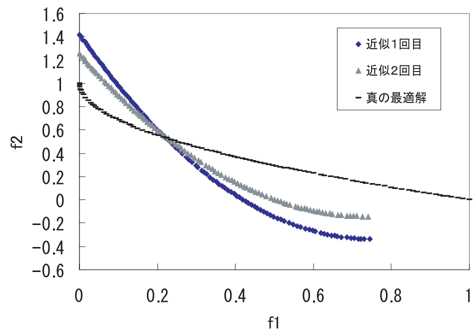

Fig. 2 応答曲面を利用した多目的 GA

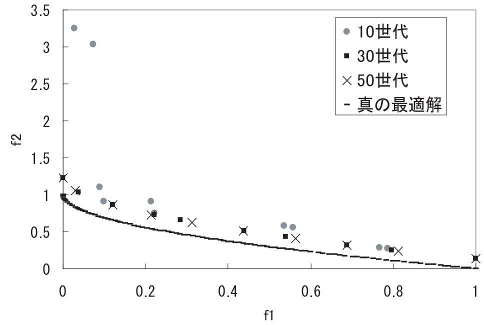

Fig. 3 少ない個体数で実行した多目的 GA

4.2 考察

応答曲面を利用した多目的 GA の結果について，真の目的関数の評価計算回数は近似 1 回目で 9 回，近似 2 回目で 12 回である．それに対して，少ない結果で実行した多目的 GA については，10 世代で 100 回，30 世代で 300 回，50 世代で 500 回となる．目的関数 $f1$ の範囲が狭くなってはいるが，非常に少ない評価計算でパレート最適解に近い解を探索できているといえる．

5 まとめ

本発表では，実用的な計算コストで多目的最適化を行えるように，多目的遺伝的アルゴリズムに応答曲面法を組み合わせる手法の検討を行った．少ない個体を用いて実行した多目的遺伝的アルゴリズムと比較することにより，応答曲面法を用いることで真の目的関数の評価計算回数が非常に少なくても探索が行えるということが分かった.

参考文献

1) 轟章，応答曲面法，`http://florida.mes.titech.ac.jp/responsesurface.pdf`