

Sammon を用いた多目的 GA の探索履歴の可視化

王 路易

1 はじめに

世の中に存在する最適化問題の中には、複数の評価基準を有する問題が数多く存在する。このような複数の評価基準を同時に考慮しながら最適化を行う問題を、多目的最適化問題という。多目的最適化問題を研究する上で、探索結果だけではなく、探索過程、および、各遺伝的操作による解の変化を確認することは必要不可欠である。また、目的関数空間だけではなく、目的関数空間と設計変数空間の対応も非常に重要である。しかし、多次元設計変数空間での探索点の分布を把握することは困難である。本報告では、多次元のデータを 2 次元に写像することが可能である Sammon を用い、多次元設計変数空間での探索点を可視化することができ、各遺伝的操作における探索過程を確認できるアプリケーション、「MOGA Viewer in Sammon」を作成する。

2 多目的最適化

多目的最適化問題には、一般的に各目的間にトレードオフの関係があり、全ての目的関数において最良である唯一の解は存在しない。そこで、多目的最適化では、「ある目的関数の値を改善するためには、少なくとも他の 1 つの目的関数の値を改悪せざるを得ないような解」を求める。多目的最適化では、このような解をパレート最適解と呼ぶ。一方、最適化の有効な手法として、遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) がある。GA は多点探索という特徴を有するため、GA を多目的最適化に適用した多目的遺伝的アルゴリズム (多目的 GA) は、パレート最適解集合を一度の探索で導出することができる。このような利点から、近年数多くの多目的 GA に関する研究が行われている。

2.1 多目的最適化の目標

多目的最適化では、パレート最適解集合を導出することが目標の 1 つとなる。最小化問題におけるパレート最適解集合の例を Fig. 1 に示す。Fig. 1 において、個体 A と個体 B を比較すると、個体 B は全ての目的関数値において、個体 A より高い値を示す。この時、「個体 B は個体 A に劣る」と表現する。また、個体 A は他のどの解にも劣らず、個体 A の f_1 または f_2 を改善すると、他の目的関数値が改悪する。このような解がパレート最適解である。

また、多目的 GA により提示されたパレート最適解集合の中で、どの解が最も好まれるのかは意思決定者の選択に委ねられる。意思決定者に数多くの選択肢を与えるため、様々なパレート最適解を意思決定者に提示することが望まれる。従って、Fig. 2(b) のように多様性があ

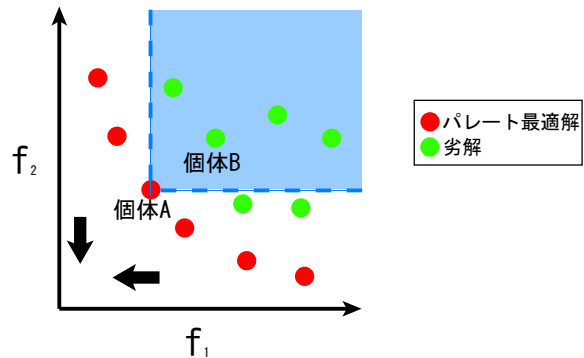


Fig.1 パレート最適解 (出典：自作)

り、Fig. 2(c) のように幅の広い非劣解集合を導出することも多目的 GA の探索の目標となる。

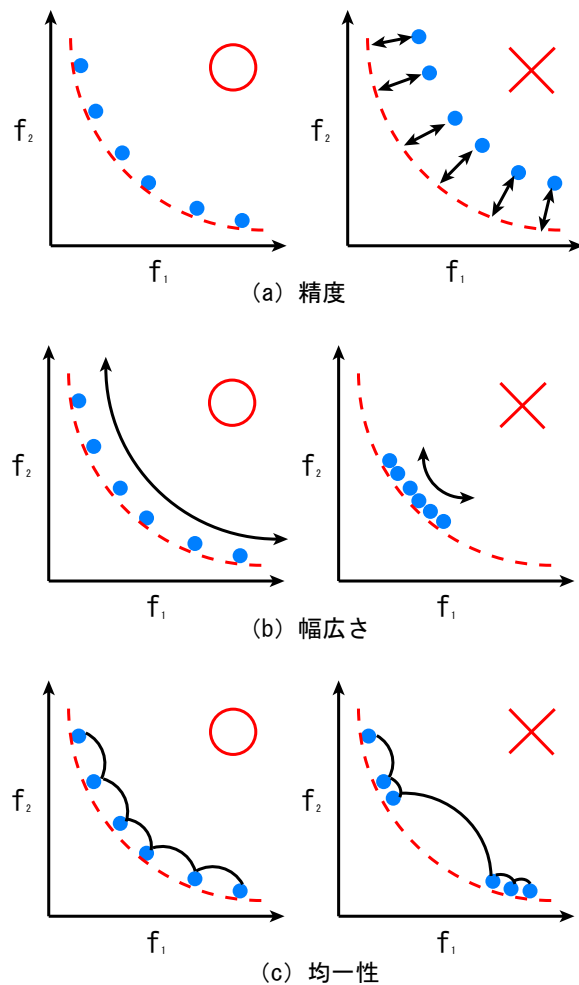


Fig.2 多目的最適化の目標 (出典：自作)

2.2 GA

GA は、生物の進化を計算機上で模倣した最適化手法の一種である。GA では、解を個体というモデルによって表現し、多点探索という特徴を有し、設計空間内に複数の個体を生成する。この個体の集団のことを母集団と呼ぶ。GA のフローチャートを Fig. 3 に示し、各処理について以下に述べる。

1. 初期母集団の生成 (Initialization)
初期母集団の個体をランダムに生成。
2. 個体の評価 (Evaluation)
各個体の評価値から適合度を算出。
3. 選択 (Selection)
各個体の適合度に基づいて次世代の親個体を決定。
4. 交叉 (Crossover)
2 個体間の染色体の一部を組み替え、新たな子個体を生成。
5. 突然変異 (Mutation)
染色体上のある遺伝子を一定の確率で変化させる。
6. 終了判定 (Terminal Check)
あらかじめ定められた終了条件を満たしていれば、終了。

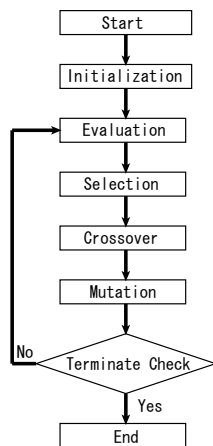


Fig.3 GA のフローチャート (出典：自作)

2.3 多目的 GA

多目的 GA では、母集団の中でどの解にも劣らない解である非劣解に高い適合度を与えることにより、解の精度を高めていく。また、Fig. 2 に示したように、多目的最適化の目標である精度、幅広さ、均一性に優れた解集合を導出するために様々なメカニズムが提案されている。代表的な多目的 GA として NSGA-II¹⁾、SPEA2²⁾ などがある。

3 MOGA Viewer in Sammon

3.1 システムの概要

本アプリケーションは、多目的 GA の解探索履歴を各世代ごと、および、選択、交叉、突然変異といった各遺伝的操作ごとに表示することができる。また、本来、視覚

的に確認することが困難な探索点の多次元設計変数空間での分布を Sammon により 2 次元に写像し、表示することができる。これらの機能により、探索結果だけでなく、各遺伝的操作が解探索に及ぼす影響、探索点の目的関数空間と設計変数空間での対応性を、視覚的に確認することができる。

3.2 多次元設計変数空間の 2 次元への写像

多次元設計変数空間を 2 次元に写像する手法として、Sammon を用いる。Sammon は非線形データから特徴抽出する手法の一つであり、写像前のデータ間距離と写像後のデータ間の距離は近似的に一致する。

Sammon の基本的な処理は Gradient descent 法を用い、エラー関数 E を最小にすることである。エラー関数 E を式 (1) に示す。

$$E = \frac{1}{\sum_{j=1}^{N-1} \sum_{K=j+1}^N \delta_{jk}} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{K=j+1}^N \frac{\delta_{jk} - d_{jk}^2}{\delta_{jk}} \quad (1)$$

δ_{jk} は 2 次元での 2 つのニューロンのユークリッド距離である。 d_{jk} は多次元での 2 つのニューロンのユークリッド距離である。2 次元および多次元のニューロン数はともに N である。各 2 次元ニューロンは各多次元ニューロンに対応し、エラー関数を最小にすることにより、各空間において対応するニューロン間の距離は近似的に一致する。

3.3 システムの構成

「MOGA Viewer in Sammon」のシステム画面を Fig. 4 に示す。

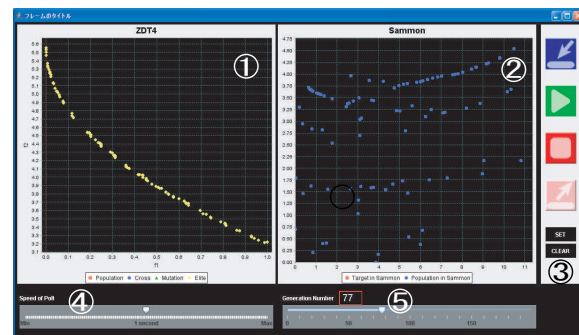


Fig.4 システム画面 (出典：自作)

Fig. 4 のシステム画面では、アプリケーションの機能ごとに番号を割り振っている。1,2 番は出力インターフェース、3,4,5 番は入力インターフェースになっている。各番号で表される機能の詳細を以下に示す。

● 出力インターフェース

1. 目的関数空間での解探索履歴
選択、交叉、突然変異ごとに探索過程の様子を表示。
2. 設計変数空間での解の分布
多次元設計変数空間を Sammon を用いて 2 次元に変換し、解の分布を表示。

● 入力インターフェース

3. 操作パネル

- 初期アーカイブのセット
- 解探索の開始, 一時停止, 再開
- 終了
- アーカイブ取り出しボタン
特定の世代におけるアーカイブ個体群の取り出し
- Sammon セットボタン
目的関数空間での探索点を指定し, 設計変数空間での対応する位置を表示
- Sammon クリアボタン
設計変数空間に表示された探索点をクリア

4. 表示速度スライダー

解探索履歴の表示速度を調整する.

5. 世代数スライダー

解探索履歴の表示世代を調整する.

3.4 システムの操作

3.4.1 各遺伝的操作ごとの比較

目的関数空間での解探索履歴の表示では, 各遺伝的操作における探索点を「□(母集団), ○(交叉), △(突然変異), ◇(アーカイブ)」といた4つの凡例を用いて表示する. Fig. 5の解探索履歴の例では, アーカイブ個体群と突然変異した結果を示している.

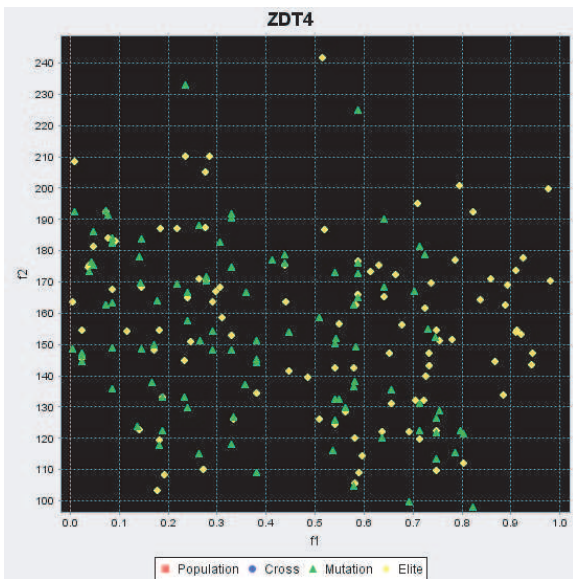


Fig.5 各遺伝的操作における解探索過程 (出典: 自作)

3.4.2 世代ごとの比較

また, 多目的 GA の研究において, 世代ごとのアーカイブ個体群の比較が非常に重要である. それをより便利に行うために, Fig. 6に示したように本アプリケーションでは, ユーザーが指定した世代のアーカイブ個体群を独立したグラフに取り出すことができる.

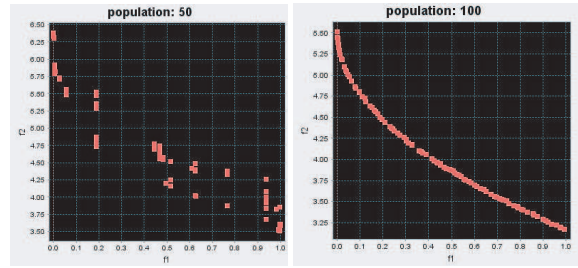


Fig.6 特定の世代におけるアーカイブ個体群 (出典: 自作)

3.4.3 目的関数空間と設計変数空間の対応

ユーザーが目的関数空間での探索点をクリックし, Sammon セットボタンを押すと, Fig. 7に示したように, 探索点の設計変数空間での対応する点が強調表示される. これにより, 目的関数空間だけでなく, 多次元設計変数空間での探索点の相互位置関係を視覚的に確認することができる.

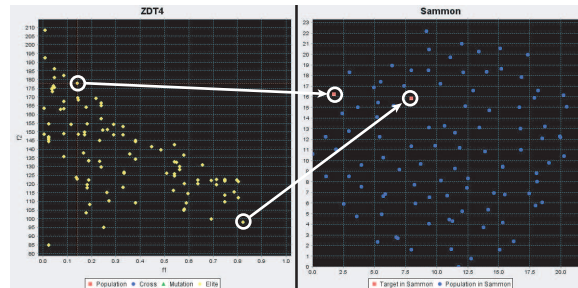


Fig.7 設計変数空間での相互位置関係 (出典: 自作)

4 まとめ

多目的 GA 手法の1つである, NSGA-IIの解探索履歴を各遺伝的操作ごとに可視化し, Sammonによって設計変数空間での位置関係を可視化するアプリケーションを作成した. これにより, 解探索履歴を各遺伝的操作ごとに分析し, また, 設計変数空間での分布を把握することに有効であると考えられる.

参考文献

- 1) Kalyanmoy Deb, Samir Agrawal, Amrit Pratab, and T. Meyarivan, "A Fast Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm for Multi-Objective Optimization: NSGA-II", KanGAL report 200001, Indian Institute of Technology, Kanpur, India
- 2) E. Zitzler, M. Laumanns, L. Thiele, "SPEA2: Improving the Performance of the Strength Pareto Evolutionary Algorithm", Technical Report 103, Computer Engineering and Communication Networks Lab (TIK), Swiss Federal Institute of Technology (ETH) Zurich, 2001