

多数目的最適化における超円錐体積に基づく 選択指標の有効性の検討

師田 裕二郎¹

2023 年 1 月 12 日

¹鳥取大学電気情報系学科

1 はじめに

複数の評価指標（すなわち目的）が数値化されており、協調もしくは競合の関係にあり、それらを最大化もしくは最小化するように対象を変更するような問題を多目的最適化問題（MOP）と呼ぶ。一般に目的数が多い場合、ほぼ全ての探索点どうしが非支配的になりやすいため、点どうしの優劣が判定できず、最適化を推し進めることが難しい。このことから、4 個以上の目的を有する問題を多数目的最適化問題（MaOP）と呼び区別される。MaOP 研究における近年の最適化アルゴリズムは、大きく支配関係に基づく手法、分割に基づく手法、その他の参照点に基づく手法に分類できる。NSGA は、非支配選択と追加選択の 2 段階の選択戦略によって、収束的選択圧および多樣的選択圧を実現している。これに対し、MOEA/D では、目的空間に一様に分布した参照点を利用して、多数の目的をスカラー化することで、多数の参照点の方向に向かう選択圧を実現している。これら意外にも、各目的に特化した極端解を保持するための単一エリート・アーカイブ集合や参照点に最も近い点を保持する一様アーカイブ集合などを利用する手法や、特定の探索点と底点の座標との角度を利用した支配関係の緩和・強化を行う手法などもある。これらのうち、参照点集合を利用した NSGA-III やスカラー化関数を改良した MOEA/D 等が MaOP に対して有力であると考えられる。

しかし、それらの手法は多樣的選択圧を実現するために、当然ながら多数の参照点を必要とし、それらをどのように生成するかという問題と、参照点と探索点の全ての組合せの距離や角度などのメトリックを求める必要があるなど、計算コストが膨大であるという問題を常に抱えている。本研究では、参照点集合を必要とせず、多樣的選択圧を実現可能な選択指標として、探索点が構成する超円錐の体積を利用する手法を提案する。提案手法を NSGA の追加選択および MOEA/D に適用し、その有効性を検証する。

2 多数目的最適化における選択指標

本研究で扱う最適化問題を次式のように定義する。

$$\begin{cases} \max. & \mathbf{f}(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), \dots, f_M(\mathbf{x})]^T \\ \text{s.t.} & \mathbf{x} \in \mathbf{D} \end{cases} \quad (1)$$

このような多数目的最適化問題をとくためのアルゴリズムでは、探索点間の優劣を決定するための選択指標が重要である。従来研究において用いられている選択指標を以下に示す。

支配関係 多数目的最適化問題を解く際に、探索点間における優劣を決定する必要があるが、この優劣という言葉は支配と言い換えることができる。2点 x, y が存在すると仮定すると、 x が y よりも優秀な評価を持つ場合において x は y を支配するという。この探索点間の優劣（支配）の判断の基準となるものを支配関係と呼ぶ。従来の多目的最適化において、パレート支配と呼ばれる手法が支配関係としてたびたび用いられており、NSGA-II や NSGA-III においては、各世代において探索点どうしの支配関係に基づいてランク付けする。多目的最適化のゴールは、制約条件を満たす他のどの解と比べても全ての目的値において劣っていないような解を求めることである。多目的最適化では、このような解をパレート最適解と呼び、このような解の集合をパレート最適解集合と呼ぶ。 x が y に支配される状況を次のように定式化できる。

$$\forall j \in M : \mathbf{f}_j(\mathbf{y}) \geq \mathbf{f}_j(\mathbf{x}) \wedge \exists j \in M : \mathbf{f}_j(\mathbf{y}) > \mathbf{f}_j(\mathbf{x}) \quad (2)$$

図 2 に 2 目的の最大化問題の場合の支配関係の例を示す。

まず図 2 より、1 つ目の目的関数 f_1 について y は x よりも良い評価を持つ。

$$f_1(\mathbf{y}) \geq f_1(\mathbf{x}) \quad (3)$$

次に図 2 より 2 つ目の目的関数 f_2 について y は x よりも良い評価を持つ。

以上より、全ての目的関数において y は x よりも評価が良いので y は x を支配する。

$$f_1(\mathbf{y}) \geq f_1(\mathbf{x}) \quad (4)$$

混雑距離 以下に混雑距離（CD）の定義を示す。混雑距離は、同一ランク内の個体同士において、そのパレート曲面上で各目的関数値が隣接する個体間の距離を評価するための手法であり、NSGAII などの多目的最適化アルゴリズムの選択戦略において、できるだけ解の多様性を維持する目的で利用される。 $f_m^{j \pm 1}$ を任意の点 j と隣り合う点の m 番目の目的関数値とする。以下に混雑距離の定義を示す。

$$CD = \prod_{m=1}^M |f_m^{j+1} - f_m^{j-1}| \quad (5)$$

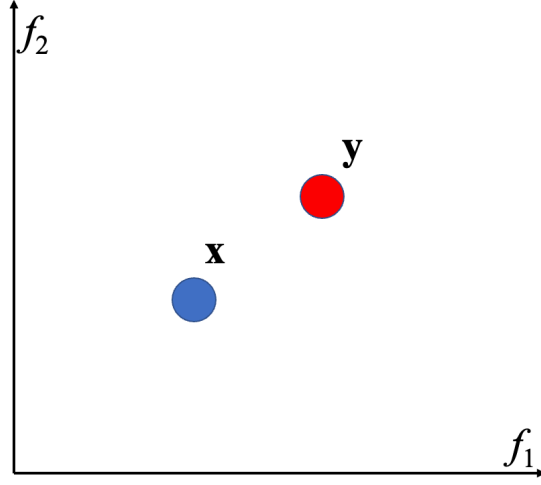


図 1: 2 目的の最大化問題における支配関係

図 2 に 2 目的における混雑距離の計算方法の例を示す。ここからは 2 目的の最適化を例に混雑距離の計算方法について説明する。図 2 の点の集合はランク i におけるフロント集合である。ここでは x_2 、 x_5 の混雑距離について考える。

まず、 x_2 について考える。 x_2 の混雑距離 CD_2 は図 2 における x_1 、 x_3 で構成される赤色の超長方体の体積で与えられる。

$$CD_2 = (f_2(x_1) - f_2(x_3)) \cdot (f_1(x_3) - f_1(x_1)) \quad (6)$$

次に x_5 について考える。 x_5 はランク i におけるフロント集合における端点であり、このとき、端点の点の外側に点が存在しないため、 x_2 における混雑距離と同様に計算ができない。よって x_5 の混雑距離は ∞ となる。NSGAII などの多目的最適化アルゴリズムの選択戦略においてこの混雑距離が利用される際には、混雑距離が大きいものが優先して選択されることが一般的である。そのため端点が選択されやすくなる。

角度支配 以下は最小化問題を想定した際の角度支配の定義である。まず、各目的において最悪の評価値を要素にもつ点 z^{nad} を求める。今回は最小化問題であるため z^{nad} は各目的における最大値を要素にもつ点となる。 i 番目の目的関数における最悪の評価値 z_i^{nad} は以下ようになる。

$$z_i^{nad} = \max_{j=1}^n f_i(x_j) \quad (7)$$

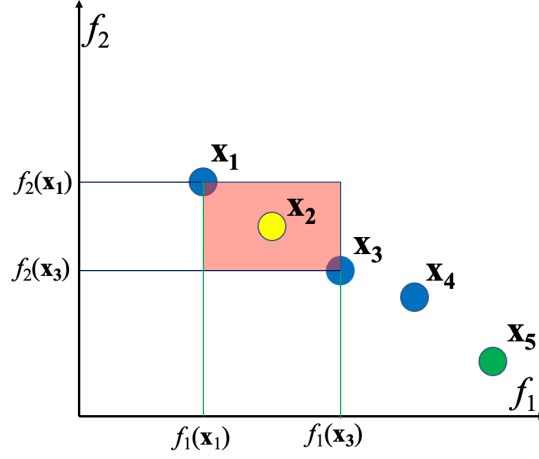


図 2: 2 目的最適化における混雑距離の計算

z_i^{nad} を要素にもつ点 z^{nad} は以下ようになる。

$$z^{nad} = [z_1^{nad}, z_2^{nad}, \dots, z_i^{nad}] \quad (8)$$

その点を k 倍した点を p とする。

$$p = kz^{nad} = [kz_1^{nad}, kz_2^{nad}, \dots, kz_i^{nad}] \quad (9)$$

i 番目の目的関数における kz^{nad} を p_i とする。

$$p_i = kz_i^{nad} \quad (10)$$

i 目的番目における点 p_i を以下のように定義する。

$$p_i = (0, \dots, kz_i^{nad}, \dots, 0) \quad (11)$$

そして解 q 、点 p_i 、点 p で構成される角度 α を次のように定義する。

$$\alpha_i = \arccos \frac{\vec{p_i o p_i q}}{|\vec{p_i o}| |\vec{p_i q}|} \quad (12)$$

この α_i を要素にもつ角度ベクトルを定義し、解 q がこの角度ベクトルを保持する。

$$angle_q = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i) \quad (13)$$

2 点 x 、 y が存在すると仮定すると、解 x 、 y に以下の角度ベクトルを割り振ることができる。

$$angle_x = (\alpha_1^x, \alpha_2^x, \dots, \alpha_i^x) \quad (14)$$

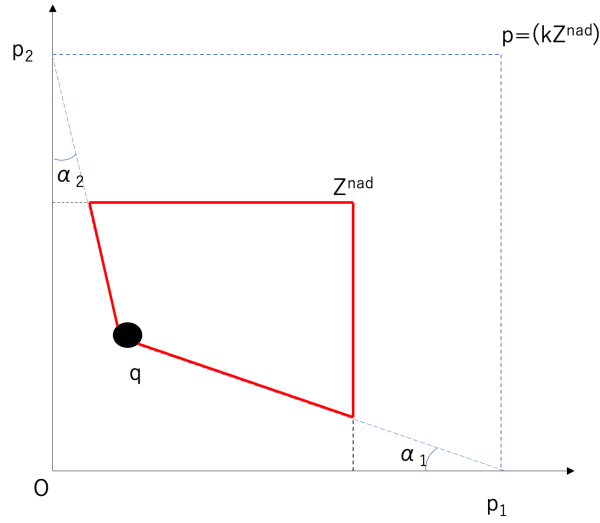


図 3: 2 目的の最小化問題における解 q の支配領域

図 2 の赤線で囲まれる部分が解 q が支配する範囲となる。

$$angle_y = (\alpha_1^y, \alpha_2^y, \dots, \alpha_i^y) \quad (15)$$

以下の条件が成立すれば、 x が y を支配することになる。

$$\forall i \in \{1, 2, \dots, M\} : \alpha_i^x < \alpha_i^y \quad (16)$$

NSGA2 多目的最適化アルゴリズムの 1 つに NSGA2 と呼ばれるものがある。これは先述の支配関係、混雑距離による選択を用いた手法である。アルゴリズムの流れを以下に示す。また、図 2 に NSGA2 の流れを図示した。

1. 非支配ソーティング

サイズ $2N$ の第 t 世代の個体集合 R_t に対して非支配ソーティングを行い、フロント集合 F_1, F_2, \dots を得る。非支配ソーティングとは支配関係に基づいて支配される個体がない個体集合から順に選択していく手法である。図 2 は非支配ソーティングの 1 層目である。緑色の個体群は支配されていない個体の集合でこれらを第一層目 (F_1) として取り出す。図 2 は非支配ソーティングの 2 層目である。橙色の個体群は支配されていない個体の集合でこれらを第二層目 (F_2) として取り出す。これらの処理を繰り返して F_1, F_2, F_3, \dots と並び替える。

2. ランキング上位半分以上のランク選択

親個体集合のサイズ N に満たないまでのフロント集合を得る。

$F_1 + F_2 + \dots + F_s \geq N$ を満たす最初の s を求める (s はランク)

3. 追加選択

親個体集合の半分のサイズ N を超えるフロント集合について、混雑距離に基づいたランキング選択を行い上位 $N - \sum_{k=1}^{s-1} F_k$ 個の個体を得る。

$s - 1$ ランクまでの個体集合にこれらを加えてサイズ N の個体集合を生成する。

4. 繰り返し

1 から 3 を繰り返す。

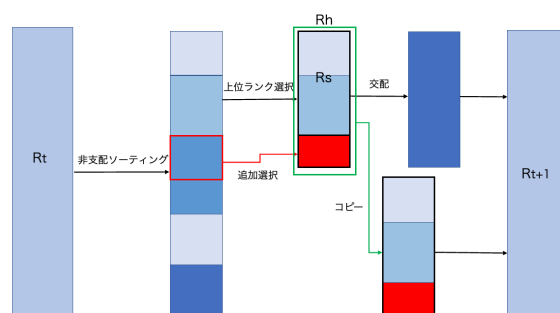


図 4: 提案手法を組み込んだ NSGA の流れ

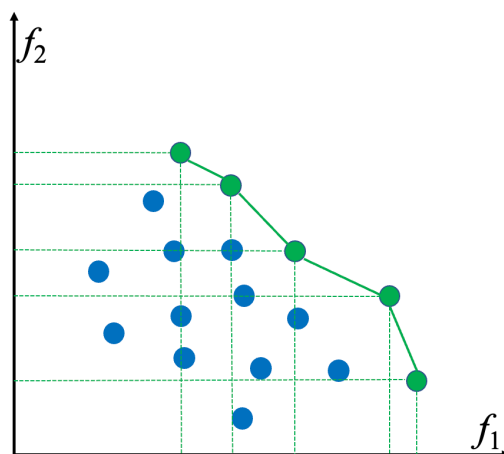


図 5: 非支配ソートリング 1 層目

この手法は追加選択に混雑距離による選択を行っているため、優劣の考慮

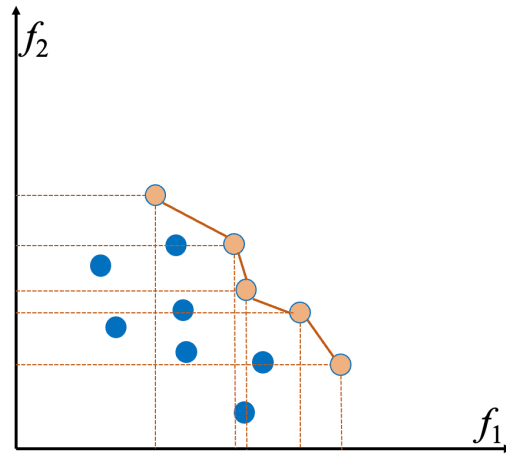


図 6: 非支配ソーティング 2 層目

をせずに多様性のみを考慮した個体を選択してしまう。これにより、最適化が進みにくくなってしまう。

3 超円錐体積に基づく選択指標

ある最適化世代における探索点集合 \mathbf{X} の例を図 3 に示す。探索点 $\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)$ に注目し、点 $\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)$ と他の全ての点 $\mathbf{f}(\mathbf{x}_j)$ との相対角は次式を満たす。

$$\cos \theta_{i,j} = \cos \theta_{j,i} = \frac{\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\|\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\|} \cdot \frac{\mathbf{f}(\mathbf{x}_j)}{\|\mathbf{f}(\mathbf{x}_j)\|} \quad (17)$$

この角 $\theta_{i,j}$ を最小とする他点 $\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ を特定するためには、式 17 を最大とする点を求めればよい。このようにして得られた角 $\theta_{i,k}$ を用いて、点 $\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)$ と点 $\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ の距離を次式のように定義する。

$$r_{i,k} = \frac{\|\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\|}{\sin \theta_{i,k}} = \frac{\sqrt{\|\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\|^3 \cdot \|\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)\|}}{\sqrt{\|\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\| \cdot \|\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)\| - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)}} \quad (18)$$

この $r_{i,k}$ を半径とし、中心を点 $\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)$ とする円の面積を $S(r_{i,k})$ とすると、図の円錐の超体積 V_i は次式で与えられる。

$$V_i = \frac{1}{M} \|\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\| \cdot S(r_{i,k}) \quad (19)$$

ここで、底面積 $S(r_{i,k})$ は M 次元空間における円の面積であるから、半径を $r_{i,k}$ とする $M-1$ 次元の超球の体積として与えられる。

$$S(r_{i,k}) = \frac{\pi^{\frac{M-1}{2}} \cdot r_{i,k}^{M-1}}{\Gamma\left(\frac{M+1}{2}\right)} \quad (20)$$

$$= \begin{cases} \frac{\pi^{\frac{M-1}{2}}}{\left(\frac{M-1}{2}\right)!} r_{i,k}^{M-1} & M : \text{odd} \\ \frac{2^{\frac{M}{2}} \cdot \pi^{\frac{M-2}{2}}}{(M-1)!!} r_{i,k}^{M-1} & M : \text{even} \end{cases} \quad (21)$$

従って、超円錐の体積 V_i は次式によって与えられる。

$$V_i = \begin{cases} \frac{\pi^{\frac{M-1}{2}}}{M \cdot \left(\frac{M-1}{2}\right)!} r_{i,k}^{M-1} \cdot \|\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\| & M : \text{odd} \\ \frac{2^{\frac{M}{2}} \cdot \pi^{\frac{M-2}{2}}}{M \cdot (M-1)!!} r_{i,k}^{M-1} \cdot \|\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)\| & M : \text{even} \end{cases} \quad (22)$$

4 NSGA に対する提案手法の適用

NSGA に対する提案手法の適用 従来の NSGA は追加選択の過程において混雑距離大きいものを優先的に選択するようになっており、混雑距離が小さい個体は全く選択されなくなってしまう。これが多様性を失うことにつながっていると考えられる。そこで NSGA の追加選択の過程に提案手法を用いることで、多様性が下がることを防ぐことができる。以下に NSGA に提案手法を組み込んだ際の流れを示す。また、図 3 に NSGA に提案手法を組み込んだ際の流れを図示した。

1. 非支配ソーティング

サイズ $2N$ の第 t 世代の個体集合 R_t に対して非支配ソーティングを行い、フロント集合 F_1, F_2, \dots を得る。

2. ランキング上位半分以上のランク選択

親個体集合のサイズ N に満たないまでのフロント集合を得る。 $F_1 + F_2 + \dots + F_s \geq N$ を満たす最初の s を求める (s はランク)

3. 追加選択

親個体集合の半分のサイズ N を超えるフロント集合について、提案手法である超円錐堆積に基づいたランキング選択を行い上位 $N - \sum_{k=1}^{s-1} F_k$ 個の個体を得る。

この時、提案手法に基づいて計算された体積が、最大化問題であれば、体積が大きいものから順に良い個体となり、最小化問題であればより体積が小さい個体を選択していくことになる。

$s - 1$ ランクまでの個体集合にこれらを加えてサイズ N の個体集合を生成する。

4. 繰り返し

1 から 3 を繰り返す。

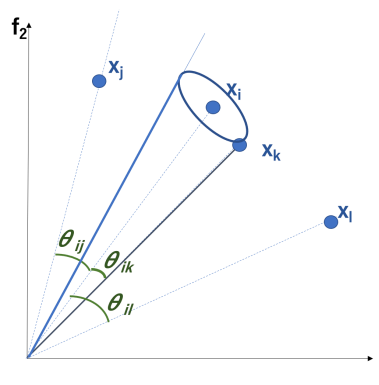


図 7: 探索点間の位置関係に基づく超円錐の定義

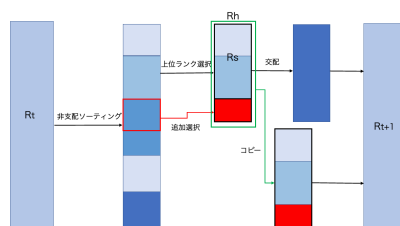


図 8: 提案手法を組み込んだ NSGA の流れ