

UV 構造を考慮した実数値 GA の新たな枠組みの提案とその性能評価

A New Framework of Real-Coded GA for UV-Structure Functions

木下 峻一 佐久間 淳 小林 重信 小野 功
Shun-ichi Kinoshita Jun Sakuma Shigenobu Kobayashi Isao Ono

東京工業大学大学院 総合理工学研究科

Interdisciplinary Graduate School of Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology

In this paper, we propose a new framework of real-coded genetic algorithm (RCGA) for UV-structure functions. UV-structure is often found in real-world problems. However, it's known that most existing RCGAs deteriorate on these functions because they are trapped in a seemingly promising valley and fail to find the optimum. Our new framework is designed to overcome this weekpoint. We also indicate that our framework shows a good performance in not only UV-structure functions but also globally unimodal functions which can be solved by existing RCGAs.

1. はじめに

近年, 計算機の発達とともに, 従来困難であった実問題を計算機で最適化する試みが盛んに行なわれている. GA(Genetic Algorithm) は最適化アルゴリズムの 1 つであり, 特に実数値 GA による関数最適化において, 良好な性能を示している [秋本 07].

しかし, 既存の実数値 GA の多くが対象としている問題は 大谷構造, すなわち大域的単峰性を前提としており, 大域的単峰性問題, 特に UV 構造をもつ問題ではよい性能を示さない [池田 02a]. 一方で実問題の中には UV 構造をもつものも少なくないため, 何らかの対処が重要な課題である. また, いくつかの実問題において悪スケール性, 変数間依存性, 高次元といった性質をもつことがわかっている [木下 07]. よって, UV 構造への対処を行なう際にはこれらの性質にも留意しなければならない.

本論文では UV 構造を有する関数を対象とした, 特に悪スケール性, 変数間依存性, 高次元を考慮した, 実数値 GA の新しい枠組みを提案する. さらに, それらの性質を併せもったベンチマーク関数を提案し, 既存の実数値 GA との比較を行うことで, 提案手法が良好な性能を示すことを確認する. 加えて, 既存の実数値 GA で解くことのできる大域的単峰性のベンチマーク関数についても, 提案手法が同等の性能を示すことを述べる.

以下, 2 節で既存手法とその問題点について指摘する. 3 節で提案手法とそのアルゴリズムについて述べる. 4 節で既存手法との性能比較を行う. 5 節で本論文のとりまとめと今後の課題について述べる.

2. 既存手法とその問題点

既存の実数値 GA の多くは, 問題が全体として 1 つの大谷を成す構造 (大域的単峰性) を有していることを前提としてい

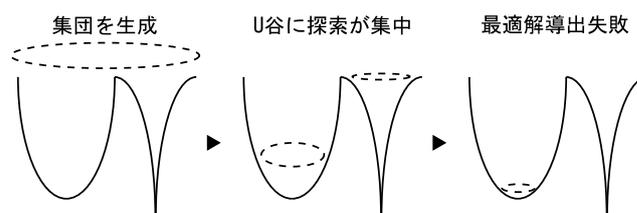


図 1: UV 現象

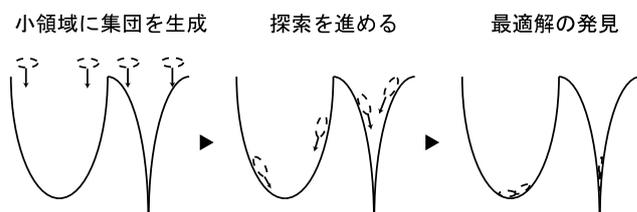


図 2: ISM

る. しかし一方で, いくつかの実問題においては探索空間内に 大谷が複数存在していることが確認されている. 特に最適解を含む谷の平均的な評価値が悪い, 間口が狭い, 景観が複雑などの理由で, 他の谷よりも相対的に有望でない (UV 構造) ような場合も多く, 中には極端な UV 構造を有する問題も確認されている [木下 07].

このような場合において通常の実数値 GA を適用すると, 最適解を含む領域を十分探索する前に, 集団が最も有望な谷へと引き込まれてしまい, 以降その谷のみが探索されてしまうため, 最適解を発見することができない (UV 現象, 図 1) [池田 02a].

UV 現象を克服するための手法として, 代表的な手法が ISM [池田 02b] である. ISM では初期集団の生成範囲を探索空間内の部分空間内に限定することで, 有望な大谷のみが探索されることを回避し, これを初期集団の生成範囲を変えて複数回探索を行なうことで最適解の発見を試みる (図 2).

しかし最適解を発見するためには, 初期集団が最適解を含む谷上にもみ生成されなければならないため, マルチスタート探索の一種である ISM では, その谷が探索空間と比べて極端に狭い場合は莫大な数の試行を要してしまう. そのため, UV 構造への対応が十分であるとはいえない.

連絡先: 東京工業大学大学院総合理工学研究科知能システム科学専攻, 〒226-8502 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259
Department of Computational Intelligence and System Science, Interdisciplinary Graduate School of Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta-cho, Midori-ku, Yokohama, Kanagawa, 226-8502, Japan

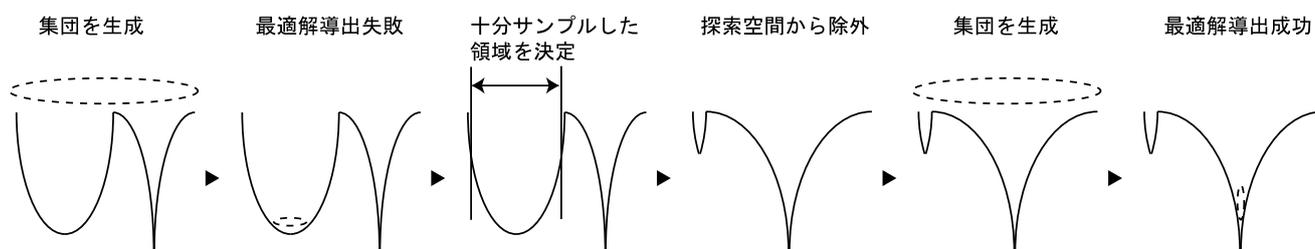


図 3: 全体の流れ

3. 提案手法

3.1 概要・設計指針

前節で、極端な UV 構造の問題を解くにあたっては ISM のようなマルチスタートによる接近法は有効でないことを述べた。そこで本論文では、探索は空間全体に対して行い、一度十分に探索を行なった領域を次回以降はサンプルされないよう操作しつつ、複数回探索を繰り返すことで、有望でない谷への探索をうながすという接近法を試みる。

この接近法のもっとも単純な実装は、一度十分に探索を行なった領域を次回以降の探索で実行不能領域として扱う方法であろう。しかし、極端な UV 構造を対象とする場合、最適解の発見にいたるためには探索空間の非常に多くの部分を実行不能領域としなければいけない。このとき、探索空間はそのほとんどが実行不能領域となってしまう、GA による探索がうまく機能しないおそれがある。

そこで、本論文では一度十分に探索した領域を除外するよう探索空間の写像を行い、問題のみかけの景観を変えることで元来狭い谷への探索をうながす方法をとる。すなわち図 3 のように、

1. まず、通常通りに GA による探索を行い、
2. 最適解の発見に失敗した場合そのときの探索で十分にサンプルしたとする領域を求め、
3. その領域を除外し、かつ他の領域を拡げるよう探索空間の写像を行い、
4. 今度は写像後の空間において再び GA による探索を行なうようにする。

このルーチンを複数回繰り返すことによって、最適解の属さない有望な谷が複数ある場合でも、いずれ最適解周辺への探索がうながされ、探索成功にいたることが期待できる。

このとき、手法の設計指針として、1) 除外する領域はそのときの探索で十分サンプルした領域で、景観に沿って与えられること、2) 除外する領域は悪スケール性、変数間依存性、高次元に対処できること、および 3) 除外操作において他の領域は一樣に拡げられること、が望ましい。設計指針 1 は手法の接近法から必須の条件である。設計指針 2 は実問題によく見られる特徴で、景観に沿った除外領域を得るために必要な条件である。設計指針 3 は、除外領域以外の領域に意図しない景観の歪みが発生するのを防ぐためである。以下、この 3 つの設計指針をもって具体的な手法の設計を行なう。

3.2 手法設計

3.2.1 除外領域

除外領域はフルパラメータの超楕円体を用いて表現するものとする。超楕円体を用いることで悪スケール性、変数間依

存性、高次元に対応し、前節の設計指針 2 を満たすことができる。

次に、この除外領域の決定方法について述べる。前述した通り、除外領域は十分探索したと判断できる領域で、谷の景観に沿って与えられるべきである (設計指針 1)。一方で、GA は景観に沿った有望領域に多く子個体を生成し探索を進めるよう設計されているため、GA において探索中に生成された子個体の分布は、谷の景観を表していると考えられる。

そこで除外領域は、探索中生成された子個体の分布から決定するものとする。具体的には、子個体の分布を多変量正規分布で表現し、その適当な大きさの信頼楕円体を除外領域として与える。ところが、GA では通常十分な回数の世代交代を行なうため、探索中生成した子個体のうちの多くが集団が収束した点の近傍に集中しており、そのままでは谷の景観を正しく表現した除外領域を得ることができない。ゆえに、ここでは除外領域生成に用いる子個体分布をある適当な世代までのものに限定するものとする。

3.2.2 除外方法

前節で除外領域は超楕円体で与えるものとした。ここではその超楕円体領域を除外するような、探索空間の写像方法について述べる。なお、問題の定義域は各変数軸に沿った矩形で与えられるものと仮定する。

図 4 のように、超楕円体の中心 c から適当な境界 (例えば定義域の境界) 上の点 r までの線分を考える。超楕円体面との交点を σ とすると、この線分のうち c から σ までは写像によって除外されるべき領域となっており、 σ から r までは非除外領域、すなわち引き伸ばされる領域となっている。そこで、非除外領域部をこの線分上で一様に伸長するよう、写像を定義する (図 5)。すなわち、写像前の非除外領域上の点 x と写像後の点 \hat{x} を次式によって対応付ける。

$$\hat{x} = r + \frac{\|c - r\|}{\|\sigma - r\|} (x - r) \quad (1)$$

さてここで用いる境界であるが、定義域の境界を用いるのが最も直感的であろう。しかし、特に除外領域が探索空間の定義域境界近くにあるとき、除外領域からの方向によって非除外領域の伸長の大小に大きな差が生まれてしまう (図 6 左)。これは、前節の設計指針 3 を十分に満たすとはいえない。

そこで、探索空間をトラス空間として扱うことで、この方向依存性の解消を試みる。探索空間をトラス空間としてみたとき、みかけ上同じ空間が格子上に並ぶことになる。除外領域である超楕円体も格子上に並んでいるとみなすことができるため、超楕円体の中心を用いたポロノイ境界を考えることができる。このポロノイ境界を除外操作に用いる境界に用いることで、図 6 右のように非除外領域伸長の方向依存性を緩和することができる。

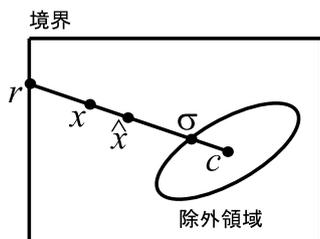


図 4: 除外方法：変数定義

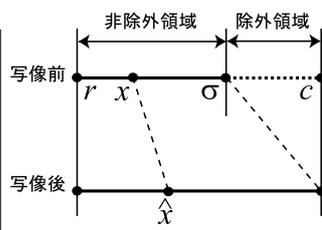
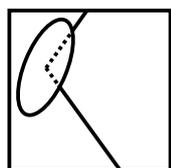


図 5: 除外の様子

定義域境界



ポロノイ境界

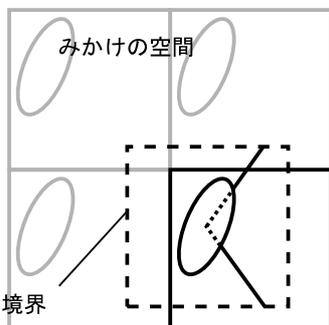


図 6: ポロノイ境界を用いる：左図より右図の方が，非除外領域伸長の大小の方向依存性が緩和されている

3.2.3 探索空間のトラス化について

前節で十分サンプルした領域の除外にあたっては，探索空間をトラス空間として扱うことが有効であることを述べた．これに伴い，元々定義域境界付近にあった連続な領域の一部が，定義域境界を越えて反対側の境界付近にシフトする場合がある．ゆえに，探索空間の景観を正しく捉える上では，除外の操作時以外に GA による探索時，また除外領域の決定時においても探索空間をトラス空間として扱う必要が生じる．

まず GA による探索における扱いとして，子個体の生成に用いる分布の決定方法について述べる．トラス空間上で子個体生成に用いる分布を求めるためには，ある親個体の位置を直接参照するか，定義域境界を超えたみかけの位置で参照するかを決定しなければならない．そこで本手法では [染谷 01] による子個体生成方法を採用する．[染谷 01] では選択された親個体のうちから，1 個体基点となる親をランダムに選び，他の親の位置をその基点から最も近い位置にあるものから参照する．

次に，除外領域決定時における各個体の参照方法について述べる．探索中にサンプルした個体は，集団が収束した点の周辺に分布していることが期待できる．そこで，除外領域決定時には集団が収束した点を基点として，各個体の位置を参照するものとする．

4. 実験

提案手法の有効性を検証するため，UV 構造をもつ関数，および大域的単峰性関数を用い，提案手法，ISM，通常の GA で性能の比較を行なう．特に実問題でしばしば見られる構造である悪スケール性，変数間依存性，高次元といった性質に対する性能を検証する．

4.1 実験設定

提案手法の有効性を検証するため，本論文ではそれぞれ図 7，図 8 のような景観をもつ関数 1，関数 2 を提案する．また

既存の大域的単峰性の関数として Rastrigin 関数 (関数 3) を用意した．

関数 1 は 2 次元の関数で大小の Rosenbrock 関数を組み合わせたものである．以下に関数 1 の定義式を示す．

$$f(x) = \min \left(f_r \left((x - (1.5, 1.5)^T) * 1.0 + (1.0, 1.0)^T \right) + .1, \right. \\ \left. f_r \left((x - (-1.0, -1.0)^T) * 10 + (1.0, 1.0)^T \right) \right) \\ f_r(x) = 100(x_0 - x_1^2)^2 + (x_1 - 1)^2 \\ -2.048 < x_i < 2.048 \quad (i = 0, 1)$$

関数 1 は UV 構造を有する問題で， $(-1.0, -1.0)^T$ において最適値 0.0 を， $(1.5, 1.5)^T$ において局所最適値 0.1 をとる．また各々の谷が悪スケール性，変数間依存性をもつ．

関数 2 は 10 次元の関数で，以下のような定義式である．

$$f(x) = \sum_{k=0}^9 \left(1 - \frac{1}{a_k \|x - b_k\| + 1} \right) \\ -5.0 < x_i < 5.0 \quad (i = 0, \dots, 9)$$

$$a_0 = 1, b_0 = (-2, \dots, -2)^T, a_1 = 2, b_1 = (4, \dots, 4)^T$$

関数 2 は高次元かつ UV 構造をもつ問題で， $(-2, \dots, -2)^T$ で局所最適値 0.974342 を， $(4, \dots, 4)^T$ で最適値 0.949934 をとる．

関数 3 は 10 次元の Rastrigin 関数で次式で定義される．

$$f(x) = \sum_i (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)) \\ -5.12 < x_i < 5.12 \quad (i = 0, \dots, 9)$$

関数 3 は探索空間内に複数の小谷を有するが全体としては 1 つの大谷構造をもつ高次元の問題で， $x = (0, \dots, 0)$ において最適値 0.0 をとる．

各手法とも，関数 1 に対しては，集団サイズ 100，生成子個体数 100，打ち切り世代数 3,000，関数 2 に対しては，集団サイズ 400，生成子個体数 400，打ち切り世代数 1,000，関数 3 に対しては，集団サイズ 200，生成子個体数 100，打ち切り世代数 3,000 とした．探索には SPX+JGG[秋本 07] を用い，SPX のパラメータ ϵ は推奨値 $\sqrt{n+2}(n; \text{問題次元数})$ を用いる．提案手法で除外領域決定に用いる子個体は 0 から 250 世代目までに作られたものを使用し，除外領域にはそれらの分布の 68% 信頼楕円体を用いた．探索の繰り返しは関数 1 では最大 10 回，関数 2 では最大 30 回，関数 3 では最大 1 回 (繰り返しなし) までとした．また，ISM の初期化領域としては各変数定義域の 0.5 倍の矩形領域を与えた．提案手法では全ての関数で 10 試行，ISM および通常の GA では評価回数をそろえるため，関数 1 で 100 試行，関数 2 で 300 試行，関数 3 で 10 試行行なった．

4.2 結果と考察

各関数における各手法の実験結果を表 1 に示す．まず，大域的単峰性をもつ関数 3 において，提案手法が通常の GA と同等の性能を示している．これは 1 回目の探索においては関数の景観およびアルゴリズムの挙動が全く同じなので，至極当然の結果であるといえる．ISM において性能の劣化が見られるのは，集団が最適解を十分に覆えず，探索途中で局所解へと捕らわれてしまったからと考えることができる．

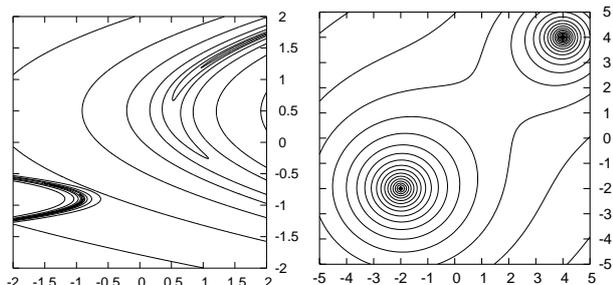


図 7: 関数 1 の景観

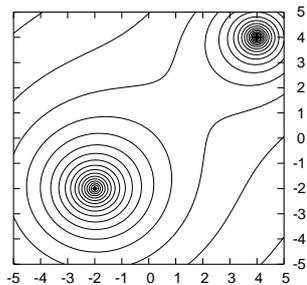


図 8: 関数 2(2次元) の景観

表 1: 実験結果：最適解発見の成功試行数

	提案手法		ISM 成功試行数	通常 GA 成功試行数
	成功試行数	平均繰り返し回数		
関数 1	9/10	4.8	12/100	0/100
関数 2	9/10	14.0	6/300	0/300
関数 3	9/10	1.0	0/10	9/10

次に関数 1, 関数 2 に注目する。ともに, 通常の GA では探索が非常に困難であった問題に, 提案手法では最適解の発見に成功しており, 提案手法が UV 構造問題に対して有効に働いていることがわかる。また, ISM では最適解を得るまでに平均的に関数 1 で 8.3 回 (=100/12), 関数 2 で 50 回 (=300/6) の探索を要する一方, 提案手法では関数 1 で 4.8 回, 関数 2 では 14 回の探索で最適解を発見できるため, ISM と比較して効率よく探索が行われているといえる。

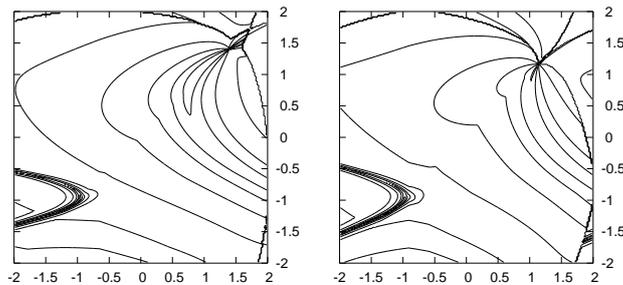
図 9 に, 関数 1 において提案手法の除外操作によって景観が推移していく様子を示す。1 回探索を終えるごとに, そのとき有望であった領域が徐々に除外されており, 逆に最適解を含む谷が少しずつ広がっていることがわかる。除外操作はある程度景観に沿って行なわれており, 悪スケール性, 変数間依存性へ十分対処できているといえる。よって, 提案手法の除外領域の決定および除外操作が有効に機能していることが確認された。

一方で, 関数 1, 関数 2 ともに最適解の発見を妨げるような有望な大谷は 1 つしかないにも関わらず, 提案手法は数回から十数回の繰り返し探索を要してしまっている。これは, 一度の除外操作では谷を除外しきれず, 有望な領域が探索空間内に残ってしまい, 再度その領域の除外を重ねて行なう必要が生じているからである。本来, 1 つの大谷は 1 回の探索で全て除外されるのが望ましく, 除外領域の表現方法, 決定方法に課題が残るといえる。

5. おわりに

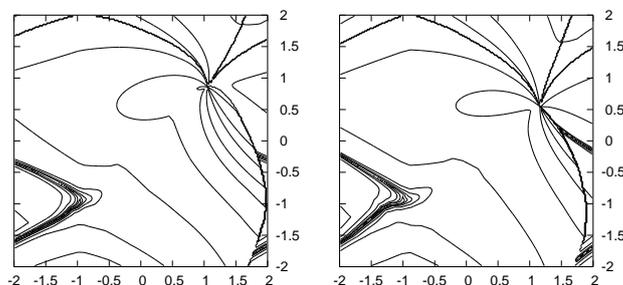
一度十分探索した領域を探索空間から除外する接近法を用いた, UV 構造を対象とする新しい GA の枠組みを提案した。提案手法は悪スケール性, 変数間依存性, 高次元への対処に留意して設計し, 既存手法との性能比較によって, UV 構造の関数, 大域的単峰性関数とともに提案手法が同等以上に働くことを示した。

しかし一方で, 除外する領域の表現方法, 決定方法にまだ改良の余地が残る。また, 実問題をはじめとする種々の問題に提案手法を適用し, 挙動の確認を行なうことが, 今後の課題の 1 つとして挙げられる。



(a) 除外操作 1 回目

(b) 除外操作 2 回目



(c) 除外操作 3 回目

(d) 除外操作 4 回目

図 9: 提案手法における関数の景観の推移 (関数 1)

参考文献

- [秋本 07] 秋本 洋平, 羽佐田理恵, 佐久間 淳, 小野 功, 小林 重信: 多親を用いた実数値 GA のための世代交代モデル-JustGenerationGap(JGG) の提案, 第 19 回自律分散システム・シンポジウム資料, 2007.
- [池田 02a] 池田 心, 小林 重信: GA の探索における UV 現象と UV 構造仮説, 人工知能学会論文誌 17 巻 3 号 G, 2002.
- [池田 02b] 池田 心, 小林 重信: 生得分離モデルを用いた GA と JSP への適用, 人工知能学会論文誌 17 巻 5 号 A, 2002.
- [木下 07] 木下 峻一, 佐久間淳, 小野功, 小林重信: 実数値 GA によるズームレンズ系の進化的設計, 第 19 回自律分散システム・シンポジウム資料, 2007.
- [染谷 01] 染谷博司, 山村雅幸: 最適解の位置にロバストな実数値 GA を実現する Toroidal Search Space Conversion の提案, 人工知能学会論文誌 16 巻 3 号 D, 2001.