

単目的最適化問題における多目的化とその有効性

渡邊 真也[†], 榊原 一紀[†]

[†] 立命館大学 情報理工学部

本論文では、単目的最適化問題を多目的化する新たな2種類の手法の提案と提案する多目的化の有効性の検証を行う。提案する2種類の多目的化は元の単目的問題に対して何らかの変更を加えた新たな目的を作成し追加する方法であり、1つは問題の制約条件の緩和を利用した方法、もう1つは設計変数値もしくは目的関数値に対するノイズを利用した方法である。これらの提案手法を用いることにより、単目的最適化では見つけれなかった最適解へつながる探索パスの増加、および探索母集団の多様性の向上を期待することができる。

本論文では、上記の2種類の多目的化についてナップザック問題、Rastrigin といった代表的な数値テスト関数を用いた実験を行った。その結果、制約の緩和を利用した多目的化では、元々の単目的最適化の場合に比べて良好な結果を得ることができた。一方、ノイズを利用した多目的化では、変数間に依存関係があり多峰性を有する関数に対して良好な結果を得ることができた。また、目的関数値にノイズを加えるよりも変数値にノイズを加えた場合の方がより効果的であることが分かった。

Multiobjective approaches in single objective optimization environment

Shinya WATANABE[†], and Kazutoshi SAKAKIBARA[†]

[†] College of Information Science & Engineering, Ritsumeikan University

This paper presents two new approaches for transforming a single-objective problem into a multi-objective problem. These approaches add new objectives to a problem to make it multi-objective and use a multi-objective optimization approach to solve the newly defined problem. One approach is based on the way to relax constraints of the problem and the other is based on the way to add some noise to objective value or decision variable. Intuitively, these approaches give more freedom to explore and less likelihood of becoming trapped in local optimum.

In this paper, we investigate the characteristics and effectiveness of the proposed approaches by comparing the performance on single-objective problems and multi-objective versions of those same problems. Through numerical examples, we found that the multi-objective versions using the way to relax constraints can derive good results and that using the way to use noise can get better solution when the function has multimodal and separable.

進化的アルゴリズムを多目的最適化問題へ適用した進化的多目的最適化 (Evolutionary Multi-criterion Optimization: EMO) に関する研究は、近年盛んに行われている^{1, 2, 3, 4)}。

EMO に関する研究の中でも、単目的最適化問題に対して目的関数を何らかの形で複数目的化し、多目的アルゴリズムを適用するという多目的化¹⁾に関する研究は、その数は限られているものの新たな EMO の取り組みとして興味深い研究が行われている^{1, 2)}。これらの多目的化は、単目的最適化では見つけれなかった最適解へつながる探索パ

スの増加、および探索母集団の多様性の向上を大きな目的としている。

本論文では、新たな多目的化として以下に示す2種類の多目的化の提案を行う。

- 元の問題に対して制約条件を緩和した問題を作成し、それを新たな目的として追加し多目的化する方法
- 元の問題における設計変数値もしくは目的関数値に対してノイズを加えたものを新たな目的として追加し多目的化する方法

提案する多目的化の有効性を検証するために幾つかの数値実験を行った。実験では、単目的遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) と多目的 GA の2種類の GA を用いた。単目的 GA と

¹ 単目的最適化問題を何らかの形で多目的最適化問題に変換することを意味する多目的化 (multiobjectivizing) という言葉は、Knowles らにより用いられているものである²⁾。

して、島モデル GA を実装している ga2k⁵⁾ ²⁾ を利用し、多目的 GA として、Deb らにより提案された NSGA-II を使用した ³⁾ .

1 単目的最適化と多目的最適化

単目的最適化問題 (Single-Objective Optimization Problem: SOOP) を何らかの方法により多目的化する場合、多目的化により得られた非劣解集合の中に元の SOOP における最適解 (もしくはそれに準じた許容解) が含まれている必要がある。SOOP における最適解 (x^{opt}) と多目的最適化問題 (Multi-Objective Optimization Problem: MOOP) におけるパレート最適解集合 (X^*) の関係を以下に示す。

$$\forall x^{opt} \in X^* \quad (1)$$

2 単目的最適化問題の多目的化への方法

単目的最適化問題を多目的化する方法としては、大きく以下の 2 つの方法が考えられる。

- 元の目的に新たな目的を追加する ¹⁾ .
- 元の問題を複数の部分問題に分解する ²⁾ .

本論文では、前者の元の目的に対して新たな目的を定義し追加する方法に基づく新たな 2 種類の多目的化の提案を行う。

- 元の問題における制約条件を緩和した問題を作成し、それを新たな目的として追加し多目的化する方法
- 元の問題における設計変数値もしくは目的関数値に対してノイズを加えたものを新たな目的として追加し多目的化する方法

これらの多目的化では、単目的最適化では見つけられなかった最適解へつながる探索パスの増加、および探索母集団の多様性の向上を大きな目的としている。提案する多目的化では、評価値として常に元の目的を保持しているため元の問題に対する最適解から逸脱する危険性が少なく、多目的化による多様性の向上により、局所解へ陥る危険性も軽減されるものと思われる。

以下、提案する 2 つの手法について具体的な対象問題をあげながら説明する。

2.1 制約条件の緩和を利用した多目的化

ここでは、本実験において用いるナップザック問題を例に用いて説明する。一般的に、単目的ナップザック問題は下記のように定式化される。

$$\begin{cases} \text{maximize } f(\vec{x}) = \sum_{j=1}^m p_j \cdot x_j \\ \text{s.t.} \\ g(\vec{x}) = \sum_{j=1}^m w_j \cdot x_j \leq c \end{cases} \quad (2)$$

式 (2) における p_j および w_j は、それぞれ j 番目の荷物に付随する利益値と重み値を表している。また、 c はナップザックの重量 (w_j) 値総和の制約値 (上限値) である。本論文では、式 (2) に対して下記のような制約条件の緩和を用いた多目的化を行った。

$$\begin{cases} \text{maximize } f_1(\vec{x}) = \sum_{j=1}^m p_j \cdot x_j - \alpha \cdot \text{penalty} \\ \text{maximize } f_2(\vec{x}) = \sum_{j=1}^m p_j \cdot x_j \\ \text{s.t.} \\ \text{penalty} = \max(0, c - \sum_{j=1}^m w_j \cdot x_j) \\ g(\vec{x}) = \sum_{j=1}^m w_j \cdot x_j \leq c' \quad (c' \geq c) \end{cases} \quad (3)$$

式 (3) では、重量制約として単目的問題における制約値 c を緩和した $c' (c' \geq c)$ を新たな制約として用いている。また、式中における α は制約条件 c の違反に対する単位ペナルティを表す定数である。

式 (3) における $f_1(\vec{x})$ と $f_2(\vec{x})$ の関係から、この多目的化は制約条件に対して垂直に目的関数間のトレードオフを生じさせる手法と捉えることができる。

2.2 ノイズを利用した多目的化

本論文ではノイズを利用した多目的化として、目的関数値に対してノイズを加えた場合、設計変数値に対してノイズを加えた場合についての検討を行った。単目的問題に対する、目的関数値にノイズを加えた多目的化の式を下記に示す。

$$\begin{cases} \text{minimize } f_1(\vec{x}) = F(\vec{x}) \\ \text{minimize } f_2(\vec{x}) = f_1(\vec{x}) + D \cdot \text{Gauss}(0, 1) \\ \text{s.t.} \\ \vec{x} \in X = \{\vec{x} \in R^n \\ |g_j(\vec{x}) \leq 0 (j = 1, \dots, m)\} \end{cases} \quad (4)$$

式 (4) における $F(\vec{x})$ は元々の単目的問題における評価関数であり、 D は加えるノイズの大きさ調整するための変数である。

本論文ではノイズに加える大きさ D の決定方法として、目的関数値に対してノイズを加える場合、設計変数値に対してノイズを加える場合で異なる方法を用いた。目的関数値に対してノイズを加える場合、それまでの探索により得られた評価値の最大値と最小値を α 倍 (ex. $\alpha = 0.5$) したものをを用いた (式 (5)) .

²⁾ ga2k は島モデル GA に基づく単目的最適化アルゴリズムである。Engineous Software 株式会社の開発する最適化ソフトウェア “iSIGHT” においても最良の GA アルゴリズムとして採用されており、次の URL からソースを取得することができる。http://mikilab.doshisha.ac.jp/dia/research/pdga/archive/index.html

$$D = (f_{max} - f_{min}) \cdot \alpha \quad (5)$$

また、設計変数に対してノイズを加える場合には、各変数のとりうる範囲に対して α 倍 (ex. $\alpha = 0.05$) したものを D として用いた。

3 数値実験

本実験では、2種類の多目的化に関する有効性の検証を行った。制約条件の緩和を利用した多目的化に関する実験として、750 荷物 0/1 ナップザック問題を用い、ノイズを利用した多目的化の実験として、Rastrigin といった代表的な数値テスト関数を用いた。また、最適化アルゴリズムとしては、単目的 GA として ga2k⁵⁾ 多目的 GA として Deb らにより提案された NSGA-II³⁾ を用いた。

2種類の実験では、個体の表現方法として 0,1 からなるビット列を用い、交叉および突然変異としてはそれぞれ 2 点交叉、ビット反転を用いた。また、使用したパラメータとして、母集団サイズを 200 個体、交叉率を 1.0、突然変異率を遺伝子長分の 1 とした (ga2k, NSGA-II とともに同じパラメータを使用)。

3.1 単目的 GA の多目的問題への適用

本実験では、単目的 GA を多目的問題へ適用する際、式 (6) に示されるような重みパラメータ $w(0 \leq w \leq 1)$ を用いた単目的化を行った。

$$F(\vec{x}) = (1 - w) \cdot f_1(\vec{x}) + w \cdot f_2(\vec{x}) \quad (6)$$

3.2 制約条件の緩和を利用した多目的化

制約条件の緩和を利用した多目的化の有効性を検証するために、式 (3) により定式化される 750 荷物 ナップザック問題を用いた実験を行った。

本実験では、荷物の数分のビット列 (750) を用意し、遺伝子のビット位置とアイテム番号の位置を適合させることにより遺伝子の持つアイテム情報を表現した。また、探索の終了条件として、世代数 400 を用いた。

今回用いたナップザック問題では重量の制約があるため、この重量を越えるような目的関数値を持つ個体に対して何らかの対処が必要となる。多目的化した式 (3) では、元々の問題における制約 (c) と追加した問題における制約 (c') の 2 つが存在する。本実験では、より制約が緩い追加した問題における制約 (c') を超えた場合において、Zitler らにより提案された最大利得率に基づく修復を行っている⁴⁾。

なお、事前の予備実験からここでの式 (3) における α 値として $\alpha = 3.0$ を用いた。

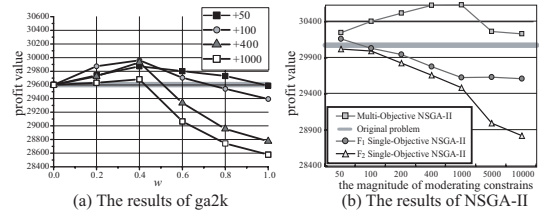


図 1: The results of knapsack.

3.2.1 制約条件の緩和を利用した多目的化に関する実験結果および考察

得られた結果を図 1 に示す。図 1(a) における横軸は 2 つの目的を足し合わせて単目的化する際の重み w (cf. 式 (6)) を表しており、図 1(b) における横軸は新たに定義した制約の制約緩和量 (新たに定義した制約 c' と元々の問題における制約 c の差 (cf. 式 (3))) を表している (元々の問題における制約値は $c = 20351.5$ である)。

図中における灰色のラインは、ga2k および NSGA-II において元々の単目的問題 (式 (2)) を解いた場合における結果である。

図 1 より、ga2k では全ての場合において 0.2 もしくは 0.4 程度の f_2 の重みを加えた場合が、オリジナル (元々の問題における結果、図中灰色のライン) よりも良好な結果が得られた。一方、NSGA-II では多目的の場合において、最も良好な結果が得られている事が分かる。多目的の場合だけに注目した場合、加える重みが 400, 1000 程度の場合が最も優れた結果を示しておりそれ以下、もしくはそれ以上ではそれらの値から離れるほど結果が悪くなるという傾向から、 f_2 として加える重みには最適な重みが存在することが分かる。

3.3 ノイズを利用した多目的化

ここでは、ノイズ用いた多目的化の有効性の検証を行う。数値実験として、式 (4) により定式化される幾つかの代表的な数値テスト関数を用いた。

3.3.1 数値テスト関数

実験に使用した関数は、単峰性が多峰性かの観点、および変数間の依存関係の有無の観点から 5 種類の関数を用いた。ここでは紙面の都合上、これらのうち Schwefel 関数、Ridge 関数、Rotated Rastrigin 関数に関する結果をのせる。

3.3.2 数値テスト関数に対する GA の適用方法

本実験での GA の構成について述べる。全ての問題において 1 変数あたり 20 ビットのグレイコーディングを用いた。なお、本実験では全ての問題を 10 変数として扱ったため遺伝子長は、200 ビット

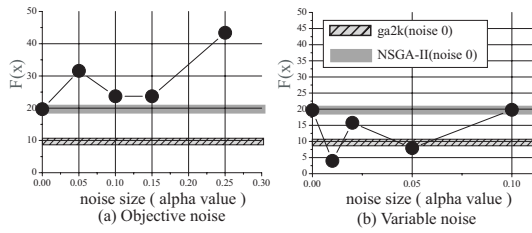


図 2: The result of Schwefel.

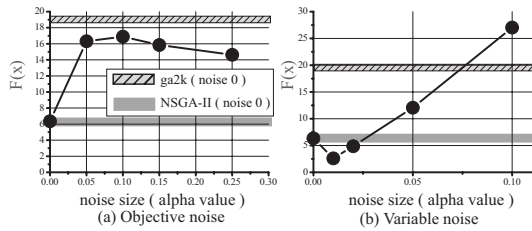


図 3: The result of Ridge.

トである．また，探索の終了条件として世代数 200 を用いた．

3.3.3 ノイズを利用した多目的化に関する実験結果および考察

各関数に対する結果を，それぞれ図 2, 図 3, 図 4 に示す．

図中における横軸は，ノイズを加える大きさを表す α を表しており， α が大きくなるほど加わるノイズが大きくなっていることを示している．また，各図における灰色の太い横線はノイズ 0 の場合（元々の単目的最適化として解いた場合に対応）における結果である．

得られた結果について考察する．Rastrigin では，全ての場合においてノイズを加えた場合には改善されているのに対して，同じ変数間に依存関係の無い Schwefel では変数間にノイズを加えた場合において良好な結果が得られた．一方，変数間に依存関係のある関数では，Ridge 関数においてノイズを加えた場合にはあまり良好な結果が得られていな

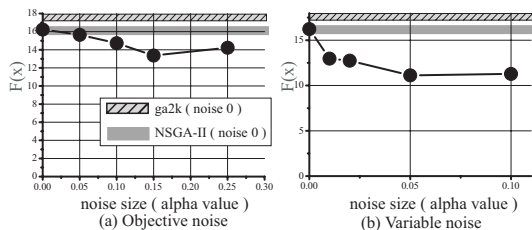


図 4: The result of Rotated Rastrigin.

いのに対して，Rotated Rastrigin および Rotated Schwefel 関数では各変数値にノイズを加えた場合には元の単目的の場合に比べて非常に良好な結果が得られた．

4 まとめ

本論文では，単目的最適化問題の多目的化に関する 2 種類の手法の提案とその有効性の検証を行った．数値実験より以下の事柄が明らかとなった．

- 1) 制約条件の緩和を利用した多目的化について
ナップザック問題を用いた実験より，従来までの単目的の場合に比べ制約を緩和した目的を追加した多目的最適化は良好な結果を得ることができた．
- 2) ノイズを利用した多目的化について
5 つのテスト関数に対して，目的関数値にノイズを加える場合と設計変数値にノイズを加える場合の 2 種類について実験を行った．数値実験より，多峰性があり設計変数間に依存関係のある問題において多目的化は非常に有効であることが分かった．

参考文献

- 1) Carlos A. Coello Coello. Treating constraints as objectives for single-objective evolutionary optimization. In *Engineering Optimization*, Vol. 32, pp. 275–308, 2000.
- 2) D. Knowles, A. Watson, and W. Corne. Reducing local optima in single-objective problems by multi-objectivization. In *1st EMO, Springer-Verlag. Lecture Notes in Computer Science No. 1993*, pp. 268–282, 2001.
- 3) K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal, and T. Meyarivan. A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA-II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, Vol. 6, No. 2, pp. 182–197, April 2002.
- 4) E. Zitzler and L. Thiele. Multiobjective Evolutionary Algorithms: A Comparative Case Study and the Strength Pareto Approach. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, Vol. 3, No. 4, pp. 257–271, 1999.
- 5) Hiroyasu Tomoyuki, Mitsunori Miki, et al. PDGA:<http://mikilab.doshisha.ac.jp/dia/research/pdga/archive/index.html>, 2002.