

ガウス過程回帰と多目的遺伝的アルゴリズムを用いた逐次近似多目的最適化手法

(株) 富士通研究所 *丸尾 昭人 MARUO Akito
(株) 富士通研究所 添田 武志 SOEDA Takeshi
北海道大学 五十嵐 一 IGARASHI Hajime

1. はじめに

社会のニーズの多様化に伴い、実問題における設計最適化が、より高度な多目的最適化問題として扱われるようになってきている。多目的最適化問題は、例えばメタヒューリスティック手法の多目的 GA (Genetic Algorithm) を用いて解ける^[1]が、膨大な数の評価回数が必要になる。実問題において、実験やシミュレーションは膨大なコストがかかるため、評価回数は可能な限り抑えることが望まれる。その要望に応えるものとして、近年、逐次近似最適化が注目を集めている^[2,3]。逐次近似最適化は、できるだけ少ないサンプルで近似モデルを作成し、新たなサンプリング点を追加して近似モデルの精度を高める手法である。本報告では、平均値と分散値から特性予測とモデル精度の検証ができるガウス過程回帰モデルを用いて、多目的 GA で逐次的に最適化する手法を提案する。特に、多目的 GA で算出したパレート解上のモデル精度を向上させる方法について議論する。

2. 解析対象

図 1 に示す磁気シールドの形状最適化問題を考える。本問題の目的は、可能な限り少ない磁性体面積で対象領域の磁束密度を最小化するシールド形状を得ることである。設計変数は図 1 に示すシールドの x 軸方向の大きさ x_1 と、 y 軸方向の大きさ x_2 である。目的関数は磁束密度 f_1 と、磁性体面積 f_2 である。下記に示す多目的最適化問題を考える。

$$\begin{aligned} \min. \quad & f_1(\mathbf{x}) = \frac{B_t(\mathbf{x})}{E_1}, f_2(\mathbf{x}) = \frac{S_m(\mathbf{x})}{E_2} \\ \text{s.t.} \quad & 51 \leq x_i \leq 100 \end{aligned} \quad (1)$$

$B_t(\mathbf{x}), S_m(\mathbf{x})$ はそれぞれ対象領域の磁束密度の大きさと磁性体の面積であり、有限要素法を用いて計算する。 E_1, E_2 はそれぞれ目的関数の正規化定数であり、 $E_1 = B_t(51, 51), E_2 = S_m(100, 100)$ とする。

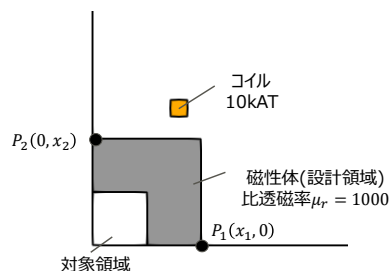


図 1 解析対象の磁気シールド(1/4 モデル)

3. 提案手法

はじめにベイズ最適化を用い、複数の目的に関して、それぞれガウス過程回帰モデルを作成し、次に作成した各目的に対するモデルを用いて多目的 GA による逐次近似最適化を行う。

3.1 ガウス過程回帰

ガウス過程は確率過程の 1 つである。回帰問題の場合、ガウス過程によるモデリングは、データ $D = \{(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)\}$ を観測した下で、新たな点 x_* における関数値 f_* を予測する。事後平均 μ_* と事後分散 σ_*^2 は下記のように記述できる^[4]。

$$\begin{aligned} \mu_* &= \mathbf{k}_*^T (\mathbf{K} + \sigma^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{y} \\ \sigma_*^2 &= k_{**} - \mathbf{k}_*^T (\mathbf{K} + \sigma^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{k}_* \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、カーネル関数を $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ とすると、 \mathbf{K} は第 (i, j) 成分が $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ であるような $N \times N$ 行列、 $\mathbf{k}_* = (k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_1), \dots, k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_N))^T$, $k_{**} = k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_*)$ と表せる。

3.2 ベイズ最適化

ベイズ最適化では、式(2)より得られるガウス過程回帰の事後平均と事後分散を用いて獲得関数を定義し、獲得関数が最大となる点を次の実験点とする。今回は獲得関数として下記式で表される LCB (Lower Confidence Bound) を用いた。

$$\mathbf{x}_{N+1} = \arg \max \{-\mu_*(\mathbf{x}_*) + w\sigma_*(\mathbf{x}_*)\} \quad (2)$$

ここで、 w は探索における平均と分散の比率である。

3.3 逐次多目的最適化

はじめに、それぞれの目的関数 f_1, f_2 に対して、ラテン超方格法を用いて初期点を 5 点とり、ベイズ最適化した。反復回数は 10 回とした。 f_2 に対しては、

反復2回で解が収束したため、そこで終了とした。その後、探索で得られた点を全て用いて f_1, f_2 に関するガウス過程回帰モデルを作成した。次に、得られたガウス過程回帰モデルを用い、多目的GAの一種であるNSGAI^[1]により多目的最適化した。ここで、世代数、集団数、交叉率はそれぞれ250、100、0.9とした。その結果、図2(a)に示すようなパレート解が得られた。次に、この結果から重複した解を削除したのちNSGAIの評価値上位の10個体を抽出し、抽出個体においてモデルの分散の合計が閾値 δ 以上の点を次の評価点とした(図2(a))。この評価点に対して式(1)を用いて実験を行い、結果を学習データに追加し、ガウス過程回帰モデルを更新した。そして、パレート解上の分散が十分に小さくなるまで上記モデル更新と多目的最適化を繰り返した。今回は繰り返し処理数が20回となった時点で評価点が無くなり、そこで最適化を終了した。パレート解の逐次的な推移を表す最適化の過程を図2(b)に示す。また、本手法のフローチャートを図3に示す。

4. 最適化結果

提案手法と従来のNSGAIの最適化結果を図4に示す。従来手法では25000回の実験回数が必要であったが、提案手法では173回に抑えることができ、大幅に実験回数を削減できた。また、図4より提案手法による解は、従来手法によるパレートフロント上に位置していることがわかる。ただし前者によるパレート解はやや不均一である。提案手法の回帰モデルの精度の検証のため、図5に提案手法で求めたパレート解上の点を7点ピックアップし、その解を有限要素法で解析した結果を示す。図5の点における提案手法で用いている回帰モデルと有限要素法の目的関数値 f_1, f_2 はそれぞれ誤差 5.60×10^{-2} 、 2.83×10^{-6} 以内に一致しており、提案手法の回帰モデルはパレート解上で比較的良好にモデル化できていることがわかる。さらに、目的関数同士のバランスに応じた形状を得ることができている。

本報告ではガウス過程回帰と多目的GAを用いて実験回数を削減する逐次最適化手法を提案した。今後はその他の事例に対しても、本提案手法を適用する予定である。

参考文献

[1] K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal and T. Meyarivan, "A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II," in *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, vol.

6, no. 2, pp. 182-197, 2002.

[2] 尹禮分, 中山弘隆, 尹敏, "計算知能を用いた逐次近似多目的最適化手法", 計測自動制御学会論文集, vol.43, no.8, pp. 672-678, 2007.

[3] 中山弘隆, 尹禮分, "計算知能の逐次近似多目的最適化への応用", オペレーションズ・リサーチ, vol. 57, no. 5, pp.270-275, 2012.

[4] 持橋大地, 大羽成征, "ガウス過程回帰と機械学習", 機械学習プロフェッショナルシリーズ, 講談社, 2019.

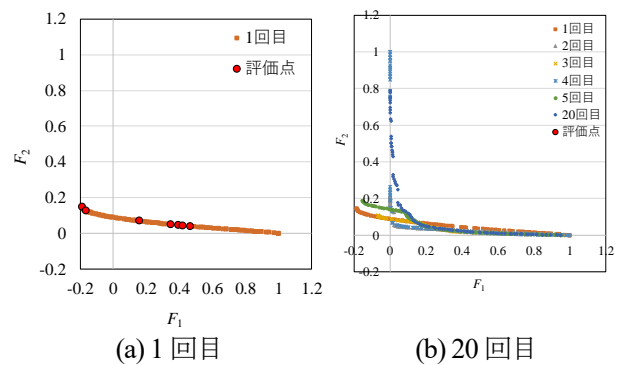


図2 最適化過程

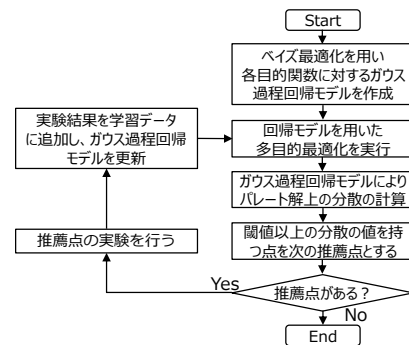


図3 提案手法のフローチャート

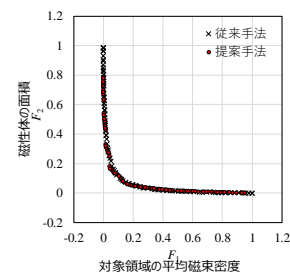


図4 従来法との比較

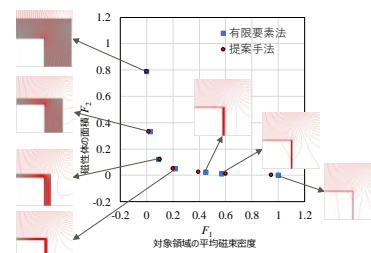


図5 解の検証