論　文

進化型多数目的最適化に対するスカラー化関数を用いたHypervolumeの近似手法の提案*

塚本　実孝†・坂根　悠冶†・能島　裕介†・石渕　久生†

Proposal of Approximating Hypervolume by Scalarizing Functions for Evolutionary Many-Objective Optimization*

Noritaka Tsukamoto†, Yuji Sakane†, Yusuke Nojima† and Hisao Ishibuchi†

Hypervolume is one of the most frequently-used and well-known performance measures to compare the performance of the obtained solution sets by evolutionary multiobjective optimization (EMO) algorithms. Hypervolume is used to evaluate both the convergence of solutions to the Pareto front and their diversity. The main difficulty in the use of the hypervolume is that the computation load for its calculation increases exponentially with the number of objectives. In this paper, we propose an idea of approximating the hypervolume of an obtained non-dominated solution set using a number of achievement scalarizing functions with uniformly distributed weight vectors. We use each scalarizing function to measure the distance from the reference point of the hypervolume to the attainment surface of the obtained non-dominated solution set along its own search direction. We examine the effect of the number of weight vectors on the approximation accuracy and the computation load. Through computational experiments, we show that the approximation accuracy is improved by increasing the number of weight vectors. We also show that our idea needs much less computational load than the existing hypervolume calculation for many-objective problems.

1. はじめに

進化型多目的最適化 (EMO: Evolutionary Multiobjective Optimization) は，進化計算において最も活発な研究分野の一つであり，様々な問題に適用されている [1,2]．EMO アルゴリズムの目的は，1 回の実行で多目的最適化問題のパレート最適解集合または近似パレート最適解集合を効率よく獲得することである．効率的な解の探索を行うため，パレート優越関係やスカラー化関数，局所探索などを用いた EMO アルゴリズムが提案されている．多様な EMO アルゴリズムが提案されている中で，NSGA-II [3] や SPEA2 [4] などのパレート優越関係に基づく EMO アルゴリズムが幅広く用いられており，良好な結果が得られている [3,4]．

EMO アルゴリズムによって獲得された解集合の性能を比較する際，最も一般的に使用される性能評価尺度の一つとして Hypervolume [5] があげられる．Hypervolume は，解集合によって優越される領域の面積や体積に対応し，獲得された解集合のパレートフロントへの収束性および多様性を測る性能評価尺度として使用される．しかし，目的数の増加につれ，Hypervolume の計算コストが指数関数的に増加する．このため，目的関数の数が 4 以上の多数目的最適化問題における性能評価尺度としてはあまり使用されていない．

近年，多数目的最適化問題に対して EMO アルゴリズムを適用した進化型多数目的最適化への注目が集まっている．しかし，多数目的最適化問題に対しては，パレート優越関係を用いた EMO アルゴリズムの探索性能が悪化することが報告されている [6,7]．多数目的最適化問題に対する有効的な手法として，Indicator function とよばれる個体群を評価する関数を用いた EMO アルゴリズム (Indicator-Based EMO Algorithm [8–12]) が提案されている．Indicator-Based EMO アルゴリズムでは，Hypervolume が Indicator function として用いられることが多い．つまり，Indicator-Based EMO アルゴリズムは個体群を評価する Indicator function である Hypervolume の最大化を行う単一目的最適化手法とな

* 原稿受付　2009 年 5 月 27 日
† 大阪府立大学　大学院工学研究科　Department of Computer Science and Intelligent Systems, Graduate School of Engineering, Osaka Prefecture University; 1-1 Gakuen-cho, Naka-ku, Sakai, Osaka 599-8531, JAPAN
Key Words: evolutionary many-objective optimization, hypervolume, performance metric, scalarizing function, multiobjective knapsack problem.

る．Indicator-Based EMO アルゴリズムの最大の問題点は，目的数および個体数の増加とともに，Hypervolume の計算コストが指数関数的に増加することである．したがって，Indicator-Based EMO アルゴリズムの多数目的最適化問題に対する適用可能性が低下している．

そこで本論文では，スカラー化関数を用いた Hypervolume の近似手法を提案する．提案手法では，重みベクトルを用い，その重みベクトルの方向に対して参照点から獲得された解によって形成される Attainment Surface とよばれる境界線までの平均距離を計算する．具体的には，各重みベクトルに対して Attainment Surface までの距離を計算し，計算された距離を平均することによって Hypervolume を近似する．数値実験より，重みベクトルの数を増加させることによって，提案手法による Hypervolume の近似性能が改善されることを示す．また，目的数が多い問題において，重みベクトルを多数用いた場合でも，通常の Hypervolume 計算よりも計算コストが低下することを示す．さらに，提案手法の Indicator-Based EMO アルゴリズムへの適用可能性の検討も行う．

本論文の構成を以下に述べる．まず，**2** 章において，多目的最適化問題および Hypervolume についての説明を行う．**3** 章において，スカラー化関数による Hypervolume の近似手法についての説明を行う．また，提案手法で用いる重みベクトルの設定方法についての説明も行う．つぎに，**4** 章において，2，4，6 目的の多目的ナップサック問題を用いた数値実験より，提案手法による Hypervolume の近似性能および計算コストを調査し，提案手法の有効性の検討を行う．最後に **5** 章において，本論文の結論を述べる．

2. 多目的最適化

2.1 多目的最大化問題

k 目的最大化問題は以下のように定式化される．

$$\text{Maximize} \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), ..., f_k(\mathbf{x})) \tag{1}$$

$$\text{subject to} \quad \mathbf{x} \in \mathbf{X} \tag{2}$$

ここで，$\mathbf{f}(\mathbf{x})$ は k 次元目的ベクトル，$f_i(\mathbf{x})$ は最大化されるべき i 番目の目的関数，$\mathbf{x}$ は決定変数ベクトル，$\mathbf{X}$ は決定変数空間内での実行可能領域を示す．

多目的最大化問題の実行可能解 $\mathbf{x}$ と $\mathbf{y}$ に対して，以下の関係が成り立つ場合，解 $\mathbf{y}$ は解 $\mathbf{x}$ を優越するという．

$$\forall i, f_i(\mathbf{x}) \leq f_i(\mathbf{y}) \text{ and } \exists j, f_j(\mathbf{x}) < f_j(\mathbf{y}) \tag{3}$$

解 $\mathbf{x}$ を優越する解 $\mathbf{y}$ が存在しない場合，解 $\mathbf{x}$ は多目的最適化問題のパレート最適解とよばれる．多目的最適化問題では，できるだけ多くのパレート最適解，またはパレート最適解に近い近似非劣解を獲得することを目的としている．また，多目的最適化問題には複数のパレート最適解が存在し，パレート最適解の集合は目的関数空間においてパレートフロントとよばれるトレードオフ曲面を形成する．

2.2 Hypervolume

N 個の解の集合を $S = \{\mathbf{X}_1, ..., \mathbf{X}_N\}$ とする．Hypervolume は，目的関数空間上で解集合 S によって優越される領域の面積や体積となる．具体的には，解集合により形成される Attainment Surface とよばれる境界面と領域を限定するために必要な参照点 $\mathbf{z}^* = (z_1^*, z_2^*, ..., z_k^*)$ により計算される．

Fig. 1 に，四つの解 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \mathbf{X}_3, \mathbf{X}_4$ の解集合および参照点 $\mathbf{z}^* = (z_1^*, z_2^*)$ による Hypervolume を示す．このとき，四つの解および参照点による Hypervolume は，Fig. 1 の灰色の領域の面積となる．

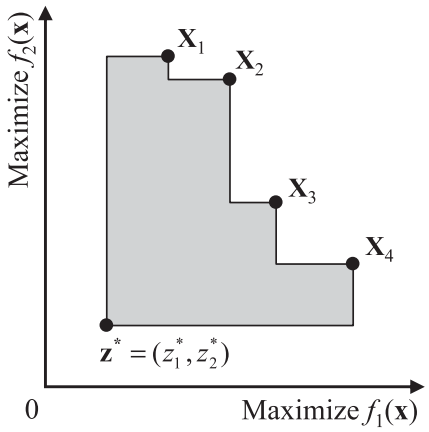


Fig. 1 Hypervolume of a solution set with four solutions

3. 提案手法

3.1 Achievement スカラー化関数

本節では，提案手法で用いる Achievement スカラー化関数について説明を行う．(1), (2) 式で示される多目的最大化問題において，Achievement スカラー化関数は正の重みベクトル $\mathbf{w} = (w_1, w_2, ..., w_k)$ および参照点 $\mathbf{z}^* = (z_1^*, z_2^*, ..., z_k^*)$ を用いることによって，以下のように計算される [15,16]．

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{z}^*, \mathbf{w}) = \min_{i=1,...,k} w_i (f_i(\mathbf{x}) - z_i^*) \tag{4}$$

ここで，Achievement スカラー化関数で用いる参照点 $\mathbf{z}^*$ は Hypervolume で定義した参照点と同じである．

Fig. 2 に，正の重みベクトル $\mathbf{w} = (w_1, w_2) = (3, 2)$ に対応する Achievement スカラー化関数の等高線を示す．なお，Fig. 2 の点線は，この関数を最大化する探索方向と考えることができる．このとき，点線の探索方向は，$(1/w_1,\ 1/w_2) = (1/3,\ 1/2)$ となる．

3.2 Hypervolume の近似

解集合 S の Hypervolume を近似するために，まず解集合 S に対して (4) 式の Achievement スカラー化関数の最大値を以下のように計算する．

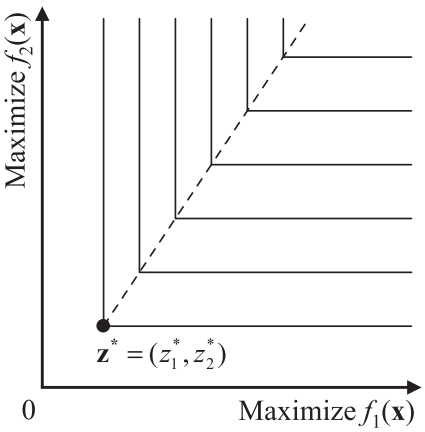


Fig. 2 Contour lines of an achievement scalarizing function

$$g^*(S,\mathbf{z}^*,\mathbf{w}) = \max_{\mathbf{x}\in S} \min_{i=1,\ldots,k} w_i(f_i(\mathbf{x}) - z_i^*) \qquad (5)$$

Fig. 3に，Fig. 1の解集合SおよびFig. 2のAchievementスカラー化関数を用いた計算例を示す．Fig. 3では，最大値が$\mathbf{X}_2$によって得られていることがわかる．

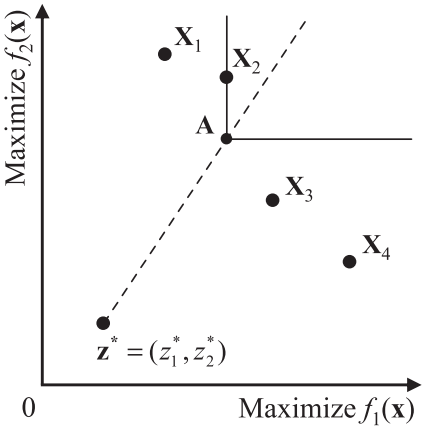


Fig. 3 Maximum value of the achievement scalarizing function over S

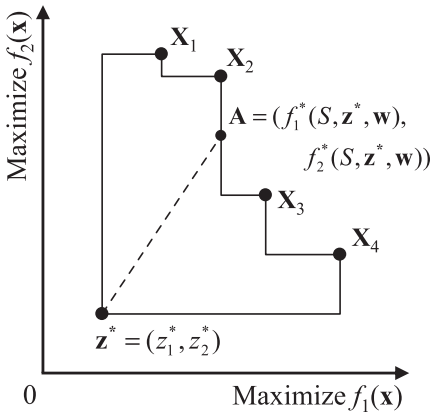


Fig. 4 Distance between the reference point and the attainment surface

また，Fig. 3に示すように，(5)式の最大値をとる等高線と探索方向の直線（Fig. 3の点線）との交点をAとする．Figs. 3, 4より，参照点$\mathbf{z}^*$から点Aまでの直線の長さが探索方向に対する参照点$\mathbf{z}^*$から解集合SのAttainment Surfaceまでの距離を表していることがわかる．

Fig. 5に示すように，異なる探索方向に対して参照点からAttainment Surfaceまでの距離を計算する．提案手法では，Hypervolumeを近似するために平均距離（Fig. 5の異なる探索方向に対する直線の平均の長さ）を用いる．Fig. 5より，提案手法によって計算される平均距離がHypervolumeを近似できると考えられる．

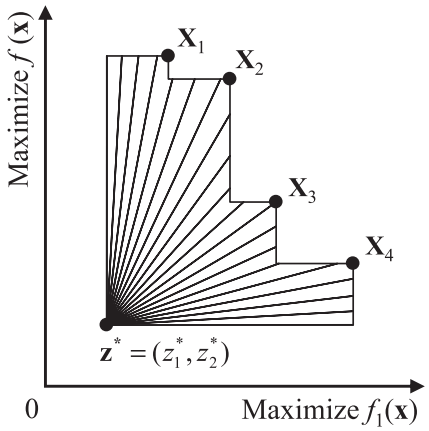


Fig. 5 Illustration of our hypervolume approximation

つぎに，Fig. 4での参照点$\mathbf{z}^*$から点Aまでの計算方法について説明する．Fig. 4に示すように，点Aの座標を$(f_1^*(S,\mathbf{z}^*,\mathbf{w}),\ldots,f_k^*(S,\mathbf{z}^*,\mathbf{w}))$とする．(5)式およびFig. 2の等高線より，点Aでは以下の関係が成り立つ．

$$g^*(S,\mathbf{z}^*,\mathbf{w}) = w_i(f_i^*(S,\mathbf{z}^*,\mathbf{w}) - z_i^*),\ i=1,\ldots,k \qquad (6)$$

したがって，参照点$\mathbf{z}^*$から点Aまでの長さは以下のように計算される．

$$\sqrt{(f_1^*(S,\mathbf{z}^*,\mathbf{w}) - z_i^*)^2 + \cdots + (f_k^*(S,\mathbf{z}^*,\mathbf{w}) - z_i^*)^2} = g^*(S,\mathbf{z}^*,\mathbf{w})\sqrt{(1/w_1)^2 + \cdots + (1/w_k)^2} \qquad (7)$$

3.3 重みベクトルの設定

(7)式で計算される直線の長さは，それぞれの重みベクトル$\mathbf{w} = (w_1, w_2, \ldots, w_k)$に対して計算される．Murataら[17]と同様にして，以下の関係が満たされるように一様に分布した重みベクトルを生成する．

$$w_1 + w_2 + \cdots + w_k = d \qquad (8)$$

$$w_i \in \{0,1,\ldots,d\} \quad \text{for} \quad i = 1,2,\ldots,k \qquad (9)$$

$$W = {}_{d+k-1}C_{k-1} \qquad (10)$$

ここで，d，Wはそれぞれ，あらかじめ決められた正の定数および重みベクトルの数とする．

重みベクトルの例として，3目的問題($k=3$)における

d が 2 の場合を考える．このとき，(2, 0, 0), (1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 2, 0), (0, 1, 1), (0, 0, 2) の六つの重みベクトルが生成される．数値実験では，異なる d の値を用いることによって，提案手法の近似性能を調査する．

また (7) 式より，重みベクトルのすべての要素が正でなければならないことがわかる．そこで，(8)∼(10) 式の関係を満たすように重みベクトルを生成した後，各要素に微小な値を加える．数値実験では，微小値を 0.01 としている．さらに，長さが 1 になるように正規化を行っている．なお，微小値を 0.1 および 0.001 とした場合に対しても **4** 章と同じ数値実験を行ったが，0.01 と同様の実験結果が得られた．

4. 数値実験

4.1 数値実験設定

数値実験では，テスト問題として，2，4，6 目的 500 アイテム 0/1 ナップサック問題 [13] を用いた．ここで，それぞれの問題を 2-500，4-500，6-500 と表す．また，2-500 および 4-500 ナップサック問題は，Zitzler らと同様のナップサック問題 [13] を用いている．しかし，Zitzler らは 5 目的以上のナップサック問題を用いていないため，Zitzler らと同様の設定 [13] を用いて，6-500 ナップサック問題を生成した．本論文では，提案手法を組合せ最適化問題である多目的ナップサック問題に対して適用したが，実数値を変数とする関数最適化問題 [14] などにも適用可能である．

EMO アルゴリズムとして，NSGA-II [3] を用いた．NSGA-II は，実装が容易であり，探索能力が高い代表的な EMO アルゴリズムとして知られている．NSGA-II は，パレート優越関係に基づくランキング，目的関数空間上の距離に基づく多様性維持，エリート戦略という特徴を持っている．本論文では NSGA-II を用いたが，SPEA2 [4] でも NSGA-II と同様の傾向が得られた．

数値実験では，以下の実験設定を用い，各テスト問題に対して NSGA-II を 100 回適用した．

個体群サイズ：200
交叉確率：0.8（一様交叉）
突然変異確率：1/500（ビット反転操作）
終了条件：1000 世代

NSGA-II の各実行中，50 世代，100 世代，…，1000 世代のように 50 世代ごとに非劣解集合を保存した．これにより，NSGA-II の 1 回の試行によって，20 個の非劣解集合を生成した．つまり，NSGA-II の 100 回の試行により，各問題ごとに合計で 2000 個の非劣解集合を生成したことになる．

生成された非劣解を用いて，Hypervolume と提案手法によって計算される参照点から Attainment Surface までの平均距離を計算し，提案手法による Hypervolume の近似性能を調査した．本論文では，Hypervolume および提案手法の参照点を目的関数空間の原点とした．また，Zitzler らが公開しているプログラム [18] を実装し，それを既存の Hypervolume の計算手法として用いた．

つぎに，重みベクトルの設定に関して述べる．Fig. 5 より，提案手法では重みベクトルの数が近似性能に大きな影響を与えると考えられる．そこで，各問題に対して，以下の四つの重みベクトルの条件を調べ，近似性能の調査を行った．ここで括弧内の値は，(8)∼(10) 式の d に対応している．本論文では，各目的に対して，10，100，1000，10000 に近い数の重みベクトルになるように d を設定した．

2-500: 10, 100, 1000, 10000 ($d = 9, 99, 999, 9999$)
4-500: 10, 120, 969, 9880 ($d = 2, 7, 16, 37$)
6-500: 6, 126, 792, 8568 ($d = 1, 4, 7, 13$)

4.2 2-500 問題における数値実験結果

数値実験結果では，Hypervolume と提案手法によって計算される平均距離の関係を示す．以下図中では，縦軸には提案手法で計算される平均距離，横軸には比較手法で計算される正確な Hypervolume を表す．

まず Fig. 6 に，2-500 問題における重みベクトルの数が 10 の結果を示す．Fig. 6 より，2000 個の非劣解集合に対して，Hypervolume と平均距離の間に線形の関係があることがわかる．この結果より，2 目的問題では，少ない重みベクトルでも，Hypervolume の近似が可能であることがわかる．さらに，Fig. 7 に 2-500 問題における重みベクトルの数が 10 のとき，NSGA-II の 1 回の試行中の Hypervolume と平均距離との関係を示す．Fig. 7 より，Fig. 6 と同様に線形の関係が Hypervolume と平均距離との間にあることがわかる．したがって，2 目的問題においては Indicator-Based EMO アルゴリズムで用いられる Hypervolume の近似手法として提案手法を用いることができるといえる．

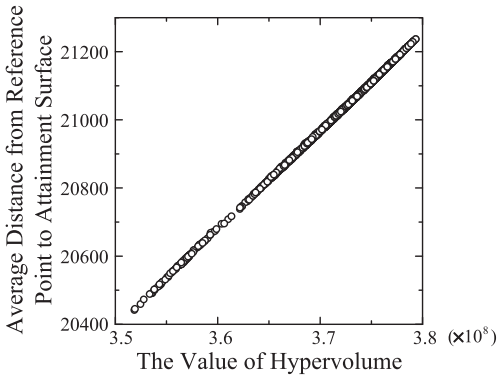


Fig. 6 Experimental results on the 2-500 problem (10 vectors)

また，Hypervolume と提案手法によって計算される平均距離の間に相関関係があるかどうかを調査するため，スピアマンの順位相関係数を計算した．さらに，スピアマンの順位相関係数の無相関検定を行った．スピアマン

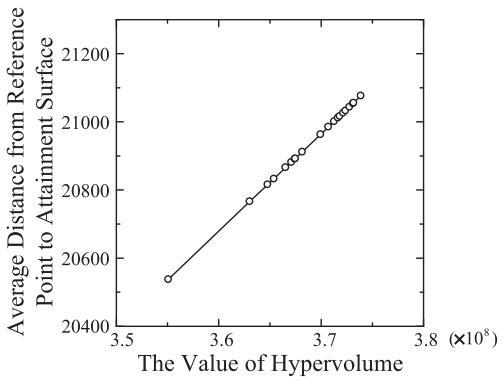


Fig. 7 A single run on the 2-500 problem (10 vectors)

の順位相関係数の無相関検定では，帰無仮説を無相関である，対立仮説を無相関であるとはいえないとしている．また，5% の有意水準で検定を行った．

Table 1 に，2-500 問題におけるスピアマンの順位相関係数および無相関検定の p 値を示す．表内の <2.2e-16 は，p 値が非常に小さいことを表している．Table 1 より，Hypervolume と提案手法には相関関係があるといえる．

Table 1 Results of Spearman's rank-correlation coefficient on the 2-500 problem

# of Weight Vectors	Correlation Coefficient	p-value
10 ($d=9$)	0.99991130	< 2.2e-16
100 ($d=99$)	0.99998610	< 2.2e-16
1000 ($d=999$)	0.99998640	< 2.2e-16
10000 ($d=9999$)	0.99998650	< 2.2e-16

さらにわれわれは，NSGA-II の個々の実行に注目し，データ点として連続する二つの Hypervolume の値，つまり 50 世代離れた二つの非劣解集合において，それぞれ計算される Hypervolume の大小関係と提案手法によって計算される平均距離の大小関係が一致する割合の平均値を計算した．本論文では，Hypervolume と平均距離の大小関係が一致する割合を一致率とよぶ．一致率を進化の序盤の世代，中盤の世代，終盤の世代の 3 区分で計算した．本論文ではそれぞれ，序盤の世代を 50 世代から 500 世代まで，中盤の世代を 500 世代から 800 世代，終盤の世代を 800 世代から 1000 世代までとした．一致率は以下のように計算される．

$$Concordance\ rate = \frac{Count(\text{Stage of evolution})}{N_{\text{data}}(\text{Stage of evolution})} \tag{11}$$

ここで，$Count(\cdot)$ は計算される進化の段階における Hypervolume と平均距離の大小関係が一致する回数，$N_{\text{data}}(\cdot)$ はデータの個数を示す．例として，ある試行の進化の中盤の Concordance rate を考える．500 世代から 800 世代までの Hypervolume と平均距離の大小関係が一致する回数 $Count$ が 5 とする．このときデータ数 N_{data} は 6 であるので，Concordance rate は 0.8333 となる．

Tables 2〜4 に，それぞれ 2-500 問題における重みベクトルの数が 10，100，1000 の場合の Hypervolume と平均距離の一致率を示す．重みベクトルが 10000 の一致率は，重みベクトルが 1000 の一致率と同様のため，省略している．Tables 2, 3 より，重みベクトルの数が少ない場合でも進化の序盤では，一致率はほぼ 1.0 に近い値が獲得されていることがわかる．しかし，進化の中盤や終盤では一致率が低下していることがわかる．また，Table 4 より，重みベクトルの数を増加させることによって，進化の中盤や終盤においては，すべての非劣解集合に対して，一致率が 1.0 となっている．したがって，重みベクトルの数を増加させることによって，Hypervolume と平均距離の大小関係が完全に一致することがわかる．

Table 2 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 2-500 problem (10 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.9466667
Middle stage	0.8283333
Final stage	0.6725

Table 3 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 2-500 problem (100 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.9977778
Middle stage	0.97
Final stage	0.9225

Table 4 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 2-500 problem (1000 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	1.0
Middle stage	1.0
Final stage	1.0

4.3 4-500 問題における数値実験結果

つぎに，多数目的問題に対して提案手法を適用した結果を示す．多数目的問題では，2 目的問題よりもより多い数の重みベクトルが必要になると考えられる．

Fig. 8 に 4-500 問題における重みベクトルの数が 120 の結果を示す．Fig. 8 では，Hypervolume と平均距離の間に正の相関関係があるが，2000 個の非劣解集合が

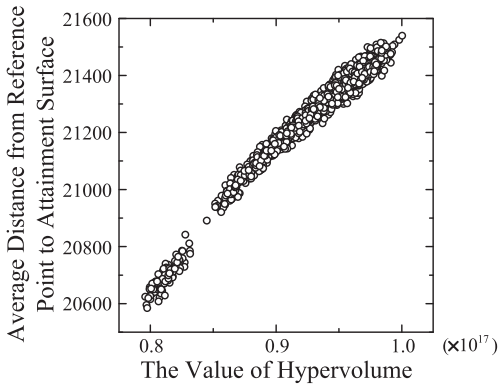


Fig. 8 Experimental results on the 4-500 problem (120 vectors)

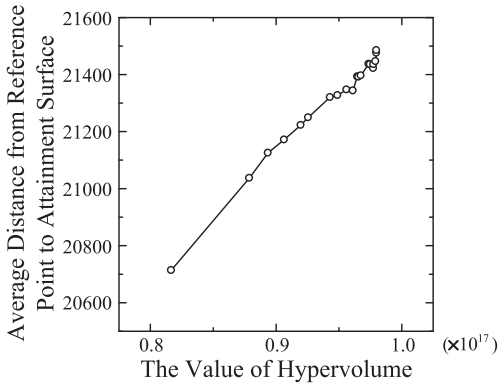


Fig. 9 A single run on the 4-500 problem (120 vectors)

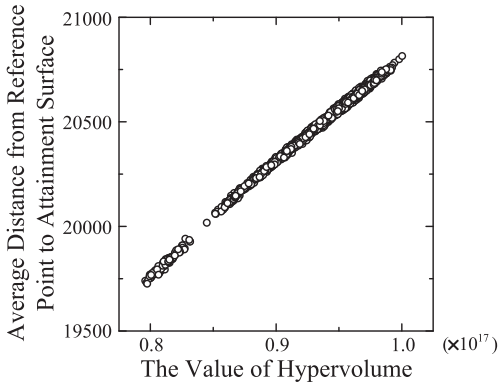


Fig. 10 Experimental results on the 4-500 problem (969 vectors)

Fig. 6 のように直線上に並んでいないことがわかる．また，Fig. 9 に，4-500 問題における重みベクトルの数が 120 の際の NSGA-II の 1 回の試行中の Hypervolume と平均距離との関係を示す．Fig. 9 より，はじめの 9 個の点が直線上に並んでいることがわかる．したがって，平均距離は進化の序盤において Hypervolume を近似できていることがわかる．

つぎに，Fig. 10 に 4-500 問題における重みベクトルの数が 969 の結果を示す．Figs. 8, 10 より，重みベクトルの数を 120 から 969 に増加させることによって，提案

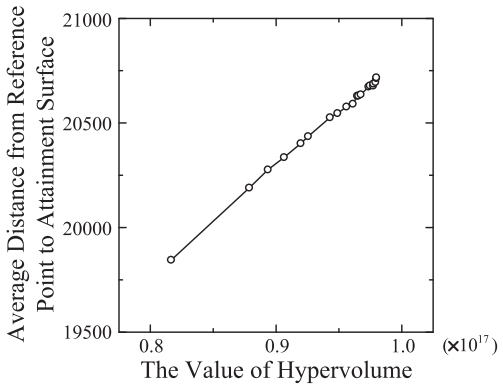


Fig. 11 A single run on the 4-500 problem (969 vectors)

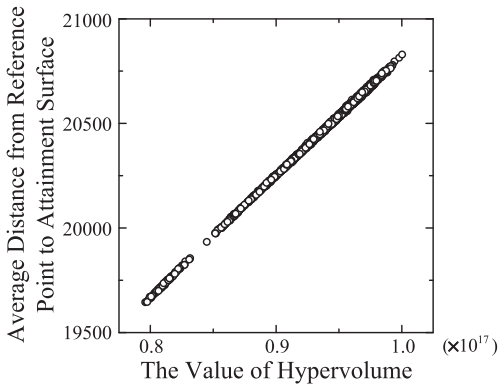


Fig. 12 Experimental results on the 4-500 problem (9880 vectors)

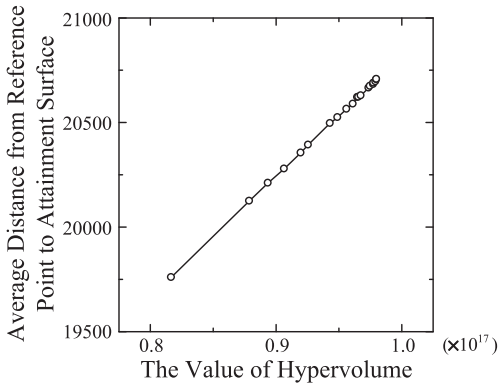


Fig. 13 A single run on the 4-500 problem (9880 vectors)

手法の近似性能が改善されていることがわかる．Fig. 11 に，4-500 問題における重みベクトルの数が 969 の際の NSGA-II の 1 回の試行中の Hypervolume と平均距離との関係を示す．Fig. 11 より，解集合が直線上に並んでいることがわかる．したがって，Figs. 10, 11 より，969 個の重みベクトルを用いた提案手法は，Hypervolume の近似手法として用いることができるといえる．さらに，Indicator-Based EMO アルゴリズム内でも提案手法は，Hypervolume の近似手法として用いることができるといえる．また，重みベクトルの数を増加させることによって，提案手法の近似性能を改善することができた．

Figs. 12, 13 にそれぞれ，9880 個の重みベクトルを用いた際の結果およびNSGA-II の 1 回試行の結果を示す．Figs. 12, 13 より，解集合が直線上に並んでいることがわかる．しかし，重みベクトルの数を増加させることによって提案手法の近似性能は向上するが，計算コストが増加する．詳しくは，**4.5** 節で述べる．

また，2-500 問題と同様に，スピアマンの順位相関係数を計算した．さらに，スピアマンの順位相関係数の無相関検定を行った．Table 5 に 4-500 問題におけるスピアマンの順位相関係数および無相関検定の p 値を示す．重みベクトルの数が増加するにつれ，相関係数が増加していることから，提案手法の近似性能が改善されることが示される．

Table 5 Results of Spearman's rank-correlation coefficient on the 4-500 problem

# of Weight Vectors	Correlation Coefficient	p-value
10 ($d=2$)	0.55814500	$<$ 2.2e-16
120 ($d=7$)	0.97009820	$<$ 2.2e-16
969 ($d=16$)	0.99717350	$<$ 2.2e-16
9880 ($d=37$)	0.99950020	$<$ 2.2e-16

2-500 問題と同様に，Hypervolume と提案手法によって計算される平均距離の一致率を計算した．Tables 6∼9 に，それぞれ 4-500 問題における重みベクトルの数が 10, 120，969，9880 の場合の Hypervolume と平均距離の一致率を示す．Table 6 より，重みベクトルが 10 の場合，進化の序盤でも一致率が非常に低いことがわかる．また，重みベクトルの数を増加させることによって，進化の中盤において一致率が改善されていることがわかる．さらに，重みベクトルの数を 10000 近くにすることによって，進化の終盤においても良好な一致率を獲得することができた．

Table 6 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 4-500 problem (10 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.7233333
Middle stage	0.4883333
Final stage	0.495

Table 7 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 4-500 problem (120 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.9177778
Middle stage	0.69
Final stage	0.6175

Table 8 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 4-500 problem (969 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.9711111
Middle stage	0.86
Final stage	0.77

Table 9 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 4-500 problem (9880 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.9911111
Middle stage	0.9233333
Final stage	0.86

4.4 6-500 問題における数値実験結果

つぎに，6-500 問題における数値実験結果を示す．6 目的問題では，さらに多い数の重みベクトルが必要になると考えられる．

Fig. 14 に 6-500 問題における重みベクトルの数が 792 の結果を示す．Fig. 14 では，2000 個の解集合が直線上に並んでいないことがわかる．しかしながら，Hypervolume と平均距離の間には正の相関関係があることがわかる．また，Fig. 15 に，重みベクトルの数が 792 の際の NSGA-II の 1 回の試行中の Hypervolume と平均距離との関係を示す．Fig. 15 では，重みベクトルの数が 792 の際の平均距離は，進化の序盤において Hypervolume を近似できることがわかる．

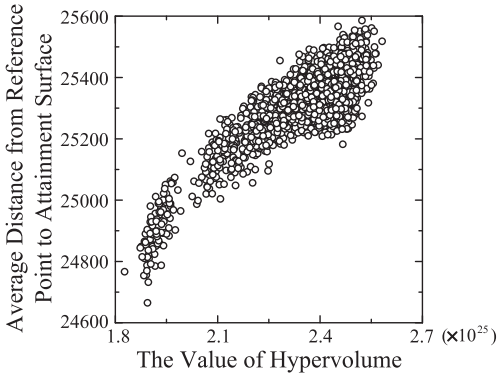


Fig. 14 Experimental results on the 6-500 problem (792 vectors)

Fig. 16 に重みベクトルの数を 792 から 8568 に増加させた際の Hypervolume と平均距離の関係を示す．Fig. 16 より，重みベクトルの数を増加させることによって，近似性能が改善されることがわかる．また，Fig. 17 に，重みベクトルの数が 8568 の際の NSGA-II の 1 回の試行中の Hypervolume と平均距離との関係を示す．Figs. 15, 17 より，近似性能が改善されていることがわかる．

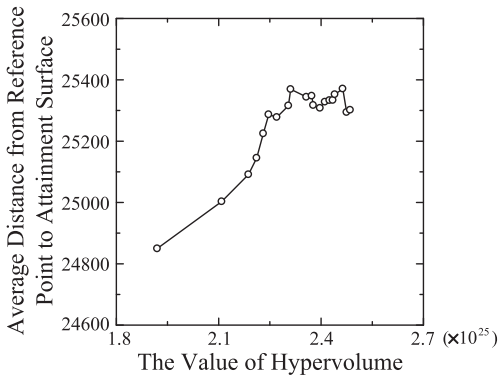


Fig. 15 A single run on the 6-500 problem (792 vectors)

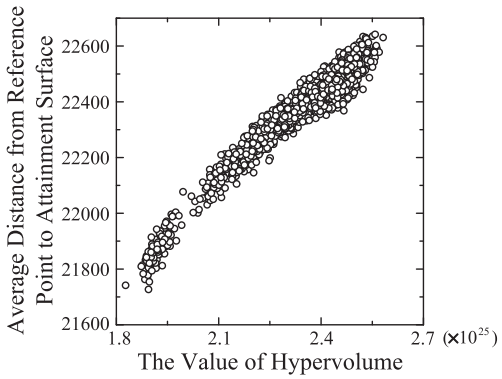


Fig. 16 Experimental results on the 6-500 problem (8568 vectors)

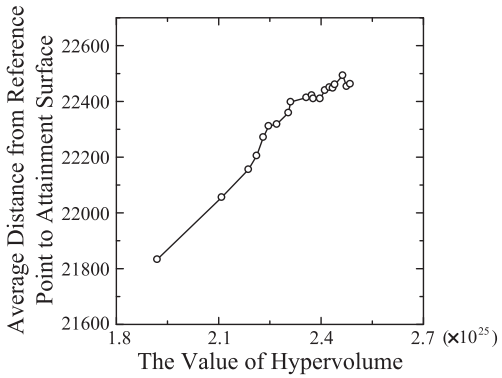


Fig. 17 A single run on the 6-500 problem (8568 vectors)

さらに，(8), (9) 式の d を 23 とすることによって，重みベクトルの数を 98280 にした際の近似性能を調査した．Fig. 18 に重みベクトルの数が 98280 の Hypervolume と平均距離の関係を示す．また，Fig. 19 に，重みベクトルの数が 98280 における NSGA-II の 1 回試行における Hypervolume と平均距離の関係を示す．Figs. 18, 19 より，重みベクトルの数を増加させることによって，提案手法の近似性能がさらに改善された．

また，2-500 問題，4-500 問題と同様に，6-500 問題に対するスピアマンの順位相関係数を計算した．さらに，スピアマンの順位相関係数の無相関検定を行った．Table 10 に，6-500 問題におけるスピアマンの順位相関係数および無相関検定の p 値を示す．4-500 問題と同様

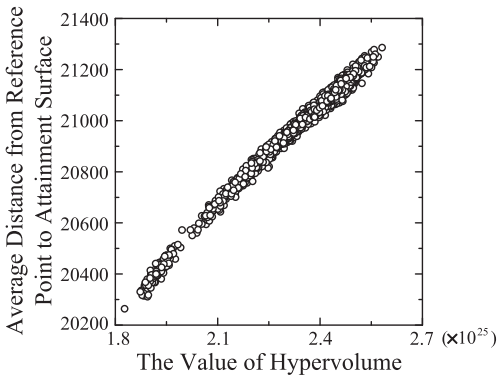


Fig. 18 Experimental results on the 6-500 problem (98280 vectors)

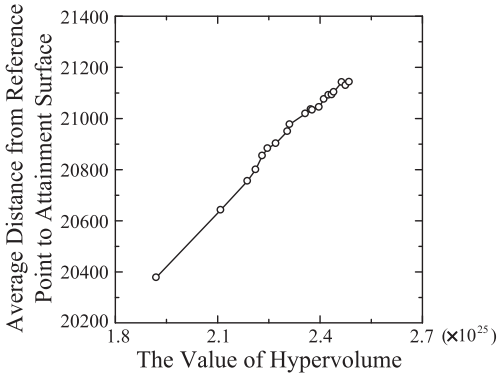


Fig. 19 A single run on the 6-500 problem (98280 vectors)

Table 10 Results of Spearman's rank-correlation coefficient on the 6-500 problem

# of Weight Vectors	Correlation Coefficient	p-value
6 ($d=1$)	0.03609154	0.1066
126 ($d=4$)	0.39294800	$<$ 2.2e-16
792 ($d=7$)	0.70159940	$<$ 2.2e-16
8568 ($d=13$)	0.92519740	$<$ 2.2e-16
98280 ($d=23$)	0.98734260	$<$ 2.2e-16

に，重みベクトルの数が増加するにつれ，相関係数が増加していることから，提案手法の近似性能が改善されることが示される．

2-500，4-500 問題と同様に，Hypervolume と提案手法によって計算される平均距離の一致率を計算した．Tables 11〜15 に，それぞれ 6-500 問題における重みベクトルの数が 6，126，792，8568，98280 の場合の Hypervolume と平均距離の一致率を示す．Table 11 より，重みベクトルが 6 の場合，進化の序盤でも一致率が非常に低いことがわかる．また，重みベクトルの数を増加させることによって，進化の中盤において一致率が改善されていることがわかる．さらに，重みベクトルの数を 100000 近くまで増加させることによって，進化の終盤での一致率がある程度まで改善されていることがわかる．

Table 11 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 6-500 problem (6 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.5366667
Middle stage	0.45
Final stage	0.4625

Table 12 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 6-500 problem (126 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.6366667
Middle stage	0.46
Final stage	0.4575

Table 13 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 6-500 problem (792 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.7322222
Middle stage	0.5016667
Final stage	0.4975

Table 14 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 6-500 problem (8568 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.8544444
Middle stage	0.5916667
Final stage	0.555

Table 15 Concordance rate between the Hypervolume and the average distance on the 6-500 problem (98280 vectors)

Stage of evolution	Concordance rate
Early stage	0.94
Middle stage	0.7283333
Final stage	0.6525

4.5 計算時間の比較

4.2節から**4.4**節では，Indicator-Based EMOアルゴリズムの中でのHypervolumeの近似手法として，参照点からAttainment Surfaceまでの平均距離を用いることの適用可能性を示した．さらに，重みベクトルの数を増加させることによって，提案手法の近似性能が改善されることを示した．しかしながら，重みベクトルの数を増加させることによって，提案手法の計算時間の増加という問題が生じることになる．そこで本節では，提案手法の計算時間と重みベクトルの数の関係を調査する．計算時間の測定の際には，Pentium (R) 4 CPU 3.6GHzの計算機を用いた．

2-500問題では，解集合に対するHypervolumeの平均計算時間は0.00015秒であった．これは，重みベクトルの数が100の提案手法の平均計算時間とほぼ同じとなった．このとき，提案手法の平均計算時間は，0.00016秒であった．また2-500問題では，Figs. 6, 7より，重みベクトルの数が10の場合でも十分な近似性能を獲得することができている．重みベクトルの数が10の場合，提案手法の平均計算時間は0.00002秒であった．以上より，提案手法による平均計算時間は，Hypervolume計算よりも短いということがわかる．しかしながら，2-500問題においては，提案手法およびHypervolumeの平均計算時間のどちらも非常に短く，平均計算時間の比較はあまり重要ではないと考えられる．

Table 16に，4-500問題におけるHypervolume計算および提案手法の平均計算時間を示す．Table 16より，提案手法の計算時間が重みベクトルの数に比例していることがわかる．Figs. 8∼11より，重みベクトルの数が120および969の場合，良好な近似性能を獲得することができている．つまり4-500問題では，提案手法を用いることにより，Hypervolumeの計算時間を減少させることができることが示される．

Table 16 Computation time on the 4-500 problem

# of Weight Vectors	Computation Time [s]
120 ($d=7$)	0.0006
969 ($d=16$)	0.0058
9880 ($d=37$)	0.0558
Hypervolume Calculation	0.0338

Table 17に，6-500問題におけるHypervolume計算および提案手法の平均計算時間を示す．6-500問題では，4-500問題と同じような傾向が獲得された．Figs. 18, 19のように，重みベクトルの数が98280と多い場合でも，良好な近似性能が獲得でき，Hypervolume計算よりも平均計算時間が短くなることが示された．

Table 17 Computation time on the 6-500 problem

# of Weight Vectors	Computation Time [s]
792 ($d=7$)	0.0072
8568 ($d=13$)	0.0740
98280 ($d=23$)	0.8002
Hypervolume Calculation	3.1805

さらに，各手法の計算量の比較を行う．ここで，重みベクトルの数をW，個体群サイズをN，目的数をkとした場合，提案手法の計算量は$O(WNk)$となる．一方，Hypervolumeの計算量は，最大で$O(N^{k-1})$ $(k>2)$となることがWhileら[19]によって示されている．つま

り，提案手法の計算量は重みベクトルの数に対して線形に増加するが，Hypervolume の計算量は目的数に対して指数関数的に増加することになる．したがって，提案手法は Hypervolume 計算よりも計算量が少ないことがわかる．

また，Indicator-Based EMO アルゴリズムにおける Hypervolume の計算回数を考える．まず，Zitzler らが提案した IBEA[8] では，各個体の一対比較に Hypervolume を用いる．IBEA の 1 世代あたりに Hypervolume が計算される回数は，個体群サイズを N とした場合には N^2 となり，計算量は $O(N^2k)$ となる [10]．また，提案手法を適用した場合には，$O(WN^2k)$ となる．したがって，$(\mu+\mu)$-ES 型の世代更新を行う IBEA の世代更新回数を G とした場合，IBEA の 1 回の試行での Hypervolume の計算回数は GN^2，計算量は $O(GN^2k)$ となる．また，提案手法を適用した場合の IBEA の計算量は $O(GWN^2k)$ となる．他の Indicator-Based EMO アルゴリズムとして，Beume らが提案した SMS-EMOA [9] があげられる．SMS-EMOA は多数目的最適化問題において，IBEA よりも良好な結果が獲得されている [10]．SMS-EMOA では，最もパレートランキングが悪い個体に対して Hypervolume 計算が行われ，各個体が現在の個体群に対して寄与する Hypervolume を計算する．最もパレートランキングが悪い個体の数は一定ではないため，ここでは Hypervolume の計算回数が最も多くなる場合，つまりすべての個体が非劣である場合を考える．このとき，SMS-EMOA の 1 世代あたりに Hypervolume が計算される回数は，個体群サイズを N とした場合 $(N+1)$ となり，計算量は本論文で比較した Hypervolume 計算 [18] を用いた場合には，$O(N^k)$ となる．また，提案手法を用いた場合の計算量は，$O(WN^2k)$ となる．ここで，IBEA の世代更新回数を G とした場合，SMS-EMOA の世代更新回数は $(\mu+1)$-ES 型の世代更新を行うため，GN となる．したがって，SMS-EMOA の 1 回の試行での Hypervolume の計算回数は $GN(N+1)$，計算量は $O(GN^{k+2})$ となり，提案手法を用いた場合の計算量は，$O(GWN^4k)$ となる．以上より，提案手法を SMS-EMOA に適用することによって，SMS-EMOA の計算量を減らし，IBEA よりも良好な結果が獲得できると考えられる．

前節および本節の結果から，SMS-EMOA などの計算量の多い Indicator-Based EMO アルゴリズムに提案手法を適用する際には，進化の序盤では重みベクトルの数を少なくすることによって，計算時間を短縮することができることがわかる．具体的には，重みベクトルの数にも依存するが，4 目的問題の場合には，最大で 50 分の 1 程度まで計算時間を短縮できると考えられる．さらに，6 目的問題では，およそ 500 分の 1 程度まで計算時間を短縮できると考えることができる．したがって，提案手法の Indicator-Based EMO アルゴリズムへの適用可能性が示された．

5. おわりに

本論文では，スカラー化関数による Hypervolume の近似手法を提案した．提案手法では，一様に分布した重みベクトルを用い，その重みベクトルの方向に対して参照点から獲得された解集合によって形成される Attainment Surface までの平均距離を計算した．多目的ナップサック問題を用いた数値実験では，提案手法によって Hypervolume が近似されることを示した．また，重みベクトルの数を増加させることによって，提案手法の近似性能が向上することを示した．さらに，Hypervolume 計算よりも提案手法の平均計算時間が短いことを示した．

今後の課題として，提案手法の並列計算への利用があげられる．既存の Hypervolume 計算よりも並列計算の利用が容易であると考えられるため，並列計算を用いることによって，提案手法の有効性を広げることができると考えられる．さらに，提案手法を Indicator-Based EMO アルゴリズムに適用することがあげられる．現在，われわれは提案手法を適用した Indicator-Based EMO アルゴリズムの実装を行っている．提案手法を適用した Indicator-Based EMO アルゴリズムでは，重みベクトルの数を適応的に変化させるなど，多くの研究課題が残されているといえる．

参 考 文 献

[1] K. Deb: *Multi-Objective Optimization Using Evolutionary Algorithm*, John Wiley & Sons (2001)

[2] C. A. C. Coello, D. A. Van Veldhuizen and G. B. Lamont: *Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems*, Kluwer (2002)

[3] K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal and T. Meyarivan: A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II; *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*, Vol. 6, No. 2, pp. 182–197 (2002)

[4] E. Zitzler, M. Laumanns and L. Thiele: SPEA2: Improving the strength Pareto evolutionary algorithm; *TIK-Report*, No. 103 (2001)

[5] E. Zitzler and L. Thiele: Multiobjective optimization using evolutionary algorithms – A comparative case study; *Lecture Notes in Computer Science 1498: Parallel Problem Solving from Nature – PPSN V*, pp. 292–301, Springer (1998)

[6] R. C. Purhouse and P. J. Fleming: Evolutionary many-objective optimization: An exploratory analysis; *Proc. of 2003 IEEE Congress on Evolutionary Computation*, pp. 2066–2073 (2003)

[7] E. J. Hughes: Evolutionary many-objective optimization: Many once or one many?; *Proc. of 2005 IEEE Congress on Evolutionary Computation*, pp. 222–227 (2005)

[8] E. Zitzler and S. Künzli: Indicator-based selection in multiobjective search; *Lecture Notes in Computer Science 3242: Parallel Problem Solving from Nature*

– *PPSN VIII*, pp. 832–842, Springer (2004)
[9] N. Beume, B. Naujoks and M. Emmerich: SMS-EMOA: Multiobjective selection based on dominated hypervolume; *European Journal of Operational Research*, Vol. 181, No. 3, pp. 1653–1669 (2007)
[10] T. Wagner, N. Beume and B. Naujoks: Pareto-, aggregation-, and indicator-based methods in many-objective optimization; *Lecture Notes in Computer Science 4403: Evolutionary Multi-Criterion Optimization – EMO 2007*, pp. 742–756, Springer (2007)
[11] H. Ishibuchi, N. Tsukamoto and Y. Nojima: Iterative approach to indicator-based multiobjective optimization; *Proc. of 2007 IEEE Congress on Evolutionary Computation*, pp. 3697–3704 (2007)
[12] E. Zitzler, L. Thiele and J. Bader: SPAM: Set preference algorithm for multiobjective optimization; *Lecture Notes in Computer Science 5199: Parallel Problem from Solving Nature – PPSN X*, pp. 847–858, Springer (2008)
[13] E. Zitzler and L. Thiele: Multiobjective evolutionary algorithms: A comparative case study and the strength Pareto approach; *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*, Vol. 3, No. 4, pp. 257–271 (1999)
[14] K. Deb, L. Thiele, M. Laumanns and E. Zitzler: Scalable test problems for evolutionary multiobejctive optimization; *Evolutionary Multiobjective Optimization: Theoretical Advances and Applications*, pp. 105–145, Springer (2005)
[15] K. Miettinen: *Nonlinear Multiobjective Optimization*, Kluwer (1998)
[16] K. Miettinen and M. Makela: On scalarizing functions in multiobjective optimization; *OR Spectrum*, Vol. 24, No. 2, pp. 193–213 (2002)
[17] T. Murata, H. Ishibuchi and M. Gen: Specification of genetic search directions in cellular multi-objective genetic algorithm; *Lecture Notes in Computer Science 1993: Evolutionary Multi-Criterion Optimization – EMO 2001*, pp. 82–95, Springer (2001)
[18] http://www.tik.ee.ethz.ch/sop/pisa/
[19] L. While, P. Hingston, L. Barone and S. Huband: A faster algorithm for calculating hypervolume; *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*, Vol. 10, No. 1, pp. 29–38 (2006)

著 者 略 歴

塚本（つかもと） 実孝（のりたか） (学生会員)
論文誌 Vol. 22, No. 6, p. 228 参照

坂根（さかね） 悠治（ゆうじ）



1986年5月2日生．2008年3月大阪府立大学工学部知能情報工学科を飛び級により中退．同年4月同大学大学院工学研究科電気・情報系専攻博士前期課程に進学．進化型多目的最適化の研究に従事．

能島（のじま） 裕介（ゆうすけ） (正会員)
論文誌 Vol. 22, No. 6, p. 228 参照

石渕（いしぶち） 久生（ひさお） (正会員)
論文誌 Vol. 22, No. 6, p. 228 参照