

評価関数の重みパラメータを推定する対話型遺伝的アルゴリズム

情報数理応用研究

5209C002-8

石川英太郎

指導教員

後藤正幸

Interactive Genetic Algorithm to Estimate Weight Parameters of Evaluate Function

ISHIKAWA Eitaro

1 はじめに

遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm:GA)[1] は解を複数の遺伝子から構成される個体で表現し、生物の進化プロセスを模倣したメタヒューリスティックな最適化のためのアルゴリズムである。GA では優れた解を残し、劣った解を捨てるといった考え方に基いて評価、選択、交叉、突然変異などの遺伝的操作を繰り返すことで、準最適解を得ることができる。そのため通常は解を評価する指標 (評価関数) が定式化できる問題を適用対象とすることが多い。

しかし、洋服のデザインなどの最適化 [2] では、ユーザの主観的評価が高い解の探索が目的となり評価関数を明示的に定式化することができない。このような問題を解決するために対話型遺伝的アルゴリズム (Interactive Genetic Algorithm:iGA)[3] が提案されている。iGA では通常の GA のように定式化された評価関数により解が評価されるのではなく、提示された解に対してユーザ自身が評価値を付与する。iGA ではユーザへの解の提示、ユーザによる解の評価、選択、交叉、突然変異の操作を繰り返すことによりユーザ自身にとっての最適解を得ることを目指している。また、iGA ではユーザが直接解を評価することを繰り返し行うため、ユーザの負担が問題となっており、ユーザへの負担を減らすための研究が多くなされている [4],[5]。

一方、GA は観光スケジュール作成問題など、複数の評価要素を総合的に考え最適化する問題に適用されることも多い [6]。例えば観光スケジュール作成問題では「観光地の重要度」や「移動時間」、「到着時刻との差」を同時に考慮する必要があり、これらをバランス良くする解の発見が求められる。その際、しばしば複数の評価要素の重みづけ和を評価関数とし、重みをうまく設定した上で GA が適用される。このとき、GA による探索結果のパフォーマンスは重みパラメータのチューニングに大きく依存するが、その重みパラメータは各評価要素をどの程度重要視するかを表わしており、ユーザの主観によって適切に設定されるべきケースも多い。そのため、重みパラメータをチューニングしてから何度も GA を繰り返し、結果を吟味するという試行錯誤が必要になってしまう。このような場合、iGA のような対話型のアルゴリズムにより、適切な重みパラメータを自動学習しながら探索を進める対話機能が備われば、ユーザの価値基準に見合った解の探索が可能となることが期待できる。

そこで、本研究では評価関数が各要素の線形和で表わされ、各要素の重視の度合いがユーザによって異なる問題に対して、重みパラメータを推定しながら GA の探索を進める iGA を提案する。さらに、多重価値問題、観光スケジュール作成問題、多重コスト巡回セールスマン問題に適用し、提案手法の有効性を検証する。

2 関連研究

複数の評価要素の重み付き線形和を評価関数とし GA を利用して最適化する適用例は多く存在する。例えば、山本らは燃料中心の温度や燃料利用効率などを評価要素として原子燃料の炉心内配置問題を GA を用いて定式化した [7]。また、森本らは勤務負荷や休日回数などを評価要素として看護師の勤務表作成を GA を用いて定式化した [8]。これらの研究では、評価関数を重み付き線形和の形で与え、各評価要素の重みは経験的にチューニングされている。

一方 iGA は評価関数を明示的に定式化することができない問題に適用する方法として多くの研究がなされてきた。例えば、iGA のユーザの負担を軽減した iGA としては、渡辺らの一対比較評価による iGA [4] や Gong らの母集団サイズを大きくした iGA [5] などがある。また、伊藤らは嗜好の多峰性に対応した iGA の解生成手法 [2] を提案している。

しかしながら、これまで評価関数の重みパラメータを適応的に求めるための方法として、対話的な方法を導入した研究はない。本研究では複数の評価要素の重み付き線形和を評価関数とした問題に対し、その重みパラメータがユーザによって異なる状況を想定し、iGA のような対話型のアルゴリズムにより重みパラメータを推定しながら解探索を行う方法を提案する。

3 提案手法

3.1 提案手法の概要

評価関数が複数の評価項目の和で表わされるとき、その重みづけがユーザに依存する状況を想定して、評価関数を (1) 式のようにモデル化する。

$$f_w(i) = \sum_{k=1}^m w_k x_k(i) + \varepsilon_i \quad (1)$$

i : 解

w_k : k 番目の評価項目の重みパラメータ

$x_k(i)$: 解 i の k 番目の評価項目の評価値

ε_i : ユーザの評価の誤差

$f_w(i)$: パラメータ w の基でユーザの解 i に対する総合評価値

評価関数が (1) 式のように表わされるとき、重みパラメータ w_k は解空間の規模や問題の複雑さまたはシステムを利用するユーザの主観によって異なることも多いと、評価関数が (1) 式で表わされるような例として、鉄道を使って複数の駅を巡回すること (スタンプラリー) を考える。スタンプラリーは巡回セールスマン問題でコストが複数存在する問題と考えることができ、コストとして主に「運賃」、「移動時間」、

「乗換回数」が挙げられる。「運賃」を重視するユーザもいれば、「移動時間」を重視するユーザもいるはずである。

本研究ではまず、ユーザにとっての最適な重みパラメータを推定することを考える。仮に最適に近い重みパラメータを推定できれば、推定された重みパラメータを基に GA を実行して最適化することで、ユーザごとに異なった最適解を見つけることができる。iGA ではユーザへの負担が問題となっているが、これらは評価関数が存在しない状況を想定している。本研究では評価関数が存在し、その重みパラメータがユーザや利用場面によって異なる状況を想定している。本研究が想定する状況では、重みパラメータを求めるためにユーザは提示されたいくつかの解について評価を行うものとする。その際、なるべく少ない評価回数で済むことが望ましい。そこで、本研究では有限個の解評価から、最小二乗法によって、重みパラメータを推定する方法を考える。

システムはまずユーザに対して複数の多様な解を提示する。ここで多様な解とはユーザが評価をつけやすくするために乱数を用いて生成する。そこで、ユーザは提示された解に対して、評価点をつける。次にシステムはユーザがつけた評価点を基に最小二乗法によって最適な重みパラメータを求める。ここで、ユーザが評価した解の数と比べてパラメータ数が多い場合はリッジ回帰 [9] を用いて重みパラメータを推定する。推定したパラメータを用いて GA を実行し、その準最適解をユーザへ提示する。ここで、この解がユーザにとっての最適解であればここで終了するが、ユーザが最適解でない判断する場合は再度これらの処理を繰り返す。以上の処理のイメージを図 1 に示す。

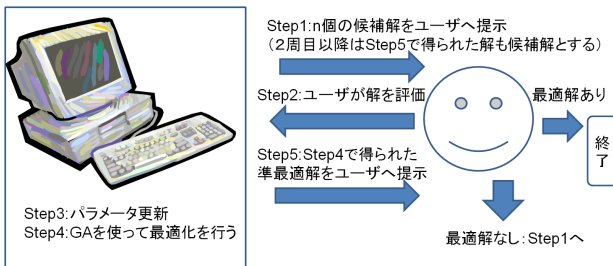


図 1. 提案手法のイメージ

3.2 提案手法の詳細

まず、前節で説明した最小二乗法を用いたパラメータ推定法について述べる。ユーザが解 i に対して付与した得点 $f(i)$ が (1) 式に従うと仮定し、

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} f(1) \\ \vdots \\ f(n) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}(1)^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}(n)^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1(1) & \cdots & x_m(1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1(n) & \cdots & x_m(n) \end{bmatrix}$$

とおけば、最小二乗法による重みパラメータの推定値は以下のように示される。

$$Q(\mathbf{w}) = \|\mathbf{f} - \mathbf{w}^T \mathbf{X}^T\|^2 \quad (2)$$

$$\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{f} \quad (3)$$

$\hat{\mathbf{w}}$: 推定された重みパラメータのベクトル

ユーザが評価した解の個数と比べて、重みパラメータの数が少なければ上記の (2) 式 (最小二乗法) を用いて推定すればよいが、ユーザが評価する解の個数と比べて、重みパラメータの数 (評価要素数) が多い場合は上記の (2) 式を求めることができない。そこでリッジ回帰を用いる。リッジ回帰では通常最小二乗法に加えて、重みパラメータの絶対値が大きくなりすぎないようにするために以下の $Q(\mathbf{w})$ を最小化する。

$$Q(\mathbf{w}) = \|\mathbf{f} - \mathbf{w}^T \mathbf{X}^T\|^2 + \lambda \mathbf{w}^T \mathbf{w} \quad (4)$$

λ : 重みパラメータのペナルティを調節するための定数

(5) 式が最小となるように推定された重みパラメータは以下のように与えられる。

$$\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{f} \quad (5)$$

ただし、 \mathbf{I} は $m \times m$ の単位行列を表す。

次に提案手法のアルゴリズムを示す。

Step0: アルゴリズムの繰り返し数を $j=1$, ランダムに生成した解を初期解 \hat{i} とする。

Step1: \hat{i} と候補解生成のためのサブアルゴリズムにより $(n-1)$ 個の多様な候補解を生成し、 n 個の解をユーザへ提示する。

Step2: ユーザは n 個の解から最も良い解 i^* を選び、残り $(n-1)$ 個の解に対して i^* を 100 として相対評価を行う。

Step3: \hat{i} とランダムに生成した解集合により、GA の初期母集団を生成する。ユーザが与えた得点 $f(1), f(2), \dots, f(n)$ に対して (3) 式または (5) 式を用いて重みパラメータを推定する。

Step4: Step3 で推定されたパラメータを用いた評価関数を使い、GA を実行し準最適解を求める。

Step5: Step4 で得られた準最適解を \hat{i} とし、ユーザへ提示する。

ここで、提示された準最適解をユーザが最適と判断すれば \hat{i} が最適となり終了。そうでなければ $j = j + 1$ として Step1 へ。

(ただし、Step1 の候補解生成のためのサブアルゴリズムは紙面の都合上詳細を省略する)

4 評価実験

4.1 評価実験の概要

評価実験では、3 つの対象問題「多重価値問題」、「観光スケジュール作成問題」、「多重コスト巡回セールスマン問題」に対して提案手法を適用してその有効性を示す。「多重価値問題」はナップサック問題の価値が複数存在する状況を想定したものである。「観光スケジュール作成問題」は主に市内観光で観光候補地が多数存在するとき、制約時間のもとで効率よく、しかもできるだけ多くの観光地を巡回可能なスケジュール案を探索する問題のことである。「多重コスト巡回セールスマン問題」は 3.1 節で述べたスタンプラリーの問題である。

実験 1 と実験 2 はパラメータ数が少ない場合を想定し、実験 3 と実験 4 はパラメータ数が多い場合を想定した実験である。実験 1 と実験 3 ではユーザが線形モデルに基づいて評価値を付けたと仮定し、実験 2 と実験 4 は実際にユーザに評価値を付与してもらった。

実験 1: 真のパラメータを用意し, 真のパラメータで計算された評価値に揺らぎ (分散) を与えた値をユーザの評価値と仮定して実験を行う (多重価値問題: パラメータ数 3) .

実験 2: 実際に被験者に対して実験を行う (多重コスト巡回セールスマン問題: パラメータ数 3) .

実験 3: 実験 1 と同じ方法で評価項目数が多い場合を想定してリッジ回帰を用いたパラメータ推定法の実験を行う (多重価値問題: パラメータ数 12) .

実験 4: 評価項目数が多い場合に実際に被験者に対して実験を行う (観光スケジュール作成問題: パラメータ数 22) .

実験 5: 対話と GA による探索を 2 回以上繰り返す場合は, 前回の準最適解を GA の初期個体群を混ぜることの有効性を確認する (多重価値問題: パラメータ数 3) .

本稿では紙面の都合上, 実験 1~3 の内容と結果を詳しく示し, 実験 4, 5 については結果の概略のみを示す .

4.1.1 実験 1

真のパラメータ w^* を設定し, ユーザ評価値は $\frac{100}{M} w^{*T} x(i)$ に誤差が加わった値とする . ここで $M = \max_i w^{*T} x(i)$ とする . ユーザの評価値の揺らぎを表す誤差は $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$ と仮定すれば, ユーザの評価値は正規分布 $N(\frac{100}{M} w^{*T} x(i), \sigma^2)$ により与える . σ の値を変えることで, 本研究のモデルがどの程度の揺らぎまで対応できるのかを検証する . 重みパラメータの推定精度として以下の「パラメータ比の二乗誤差」 J と「最適解の誤差」 P を定義する .

・パラメータ比の二乗誤差

$$J = \sum_{k=1}^{m-1} \left(\frac{w_k^*}{w_m^*} - \frac{\hat{w}_k}{\hat{w}_m} \right)^2 \quad (6)$$

・最適解の誤差 (割合)

$$P = \frac{f_{w^*}(i^*) - f_{\hat{w}}(i^*)}{f_{w^*}(i^*)} \quad (7)$$

対象問題は「多重価値問題」とする . 重みパラメータ数は 3 つとし, ユーザが評価する個体の数を 5, 10, 15 と変化させた . またユーザの評価の揺らぎに相当する σ は 2, 4, \dots , 16 と 2 きざみで変化させた . 各問題の最適解と真のパラメータを表 1 に示す . ここで, 表 1 に示した最適解は多重価値問題については全探索して求めているので厳密な最適解である . また, GA の各パラメータを表 2 に示す . 表 2 の下に GA の遺伝的操作の方法を示す .

表 1. 最適解と真のパラメータ

	真のパラメータ
多重価値問題	$w_1 = 0.6, w_2 = 0.2, w_3 = 2.2$

表 2. GA のパラメータ

個体数	世代交代数	交叉率	突然変異率
300	300	0.9	0.1

GA の遺伝的操作の方法

交叉方法: 一点交叉

選択方法: トーナメント選択

エリート保存個数: 1 個

4.1.2 実験 2

実験 1 ではユーザ評価値は正規分布によるゆらぎを想定して, 正規乱数で与えた . ここでは, 実際に被験者 (15 人) に

解を評価してもらうモニタ実験により, 提案手法の実問題への有効性を検証する . ユーザによる解評価終了後にユーザにとって最適な重みパラメータを推定し, そのパラメータのもとの最適解を提示する . その後, 推定パラメータ付近から手動でパラメータを変化させ, 提示された解よりもユーザにとってよい解が見つかるかどうかを確認し, 以下のアンケート項目に回答するものとする . ユーザが評価する解の数を増やすことで提示された準最適解がユーザにとっての最適解に近づいていくかを検証する . なお, 対象問題は「多重コスト巡回セールスマン問題」とし, 重みパラメータの数は 3 とする .

・解評価終了後に提示された解はあなたにとっての最適解にどの程度近かったですか?

(A) 最適解とほとんど一致していた .

(B) 最適解とは一致しなかったが, その誤差は小さかった .

(C) 最適解とはそれなりの誤差が感じられた .

(D) 最適解と全く違う解が提示された .

4.1.3 実験 3

実験 1 と実験 2 はいずれも重みパラメータの数が 3 つ程度の問題での実験であった . ここではパラメータ数が多い場合を想定して, 3.2 節で述べたリッジ回帰を用いた手法の有効性を検証する . 実験 1 と同様に, 真のパラメータをもとに計算した値をユーザの評価値と仮定する . ここではパラメータの数を 12 とし, ユーザが評価する解の数を $n=5, 10$ と変化させる . また, 実験 1 と同様にユーザの評価の揺らぎに相当する σ を 2, 4, \dots , 16 と変化させた . 以下の表 3 に真のパラメータ一覧を示す .

表 3. 真のパラメータ一覧表

w_1	w_2	w_3	w_4	w_5	w_6
0.3	1.1	1.9	1.4	1.8	1.2
w_7	w_8	w_9	w_{10}	w_{11}	w_{12}
1.0	0.4	1.3	2.0	1.2	0.9

4.2 実験結果と考察

4.2.1 実験 1 の結果と考察

実験 1 の結果 (100 回の平均) を図 2 と図 3 に示す . ここで図 2 はパラメータ比の二乗誤差の標準偏差の関係であり, 図 3 は最適解の誤差と標準偏差の関係である .

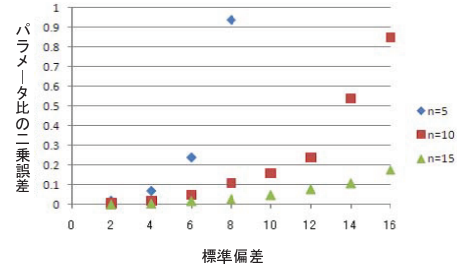


図 2. パラメータ比の二乗誤差

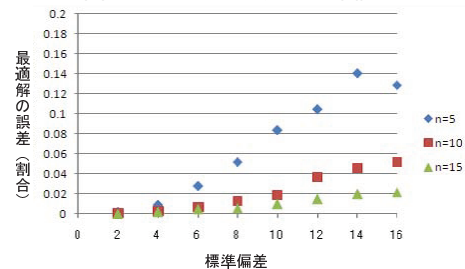


図 3. 最適解の誤差

図2および図3から σ の値を大きくすればするほど、「パラメータ比の二乗誤差」「最適解の誤差」ともに値が大きくなり精度が悪くなることがわかる。その一方で、ユーザが評価する解の数が増えれば誤差は小さくなり、 σ の値が大きいつきでもユーザが評価する解の数を増やせば、小さな誤差に抑えることができる。人間の評価値が(1)式の線形モデルで付与されると仮定したら、 σ が小さいとき最適解を推定できる可能性が高いことがわかる。

4.2.2 実験2の結果と考察

実験2のユーザ実験のアンケート結果を表4に示す。表4からわかるように、ユーザが評価する個体の数 n が増えれば、ユーザによる評価が良くなっていることがわかる。実験2の結果より人間の評価の揺らぎに対しても、 n を増やすことにより対応できることを示した。このことから人間の評価が(1)式の線形モデルにある程度適応していることがわかる。従来のiGAでは評価回数が100回以上になることも多いが、表4では20回程度の評価でユーザにとっての最適解をシステムが見つけ出しているケースが多い。本研究が想定している状況では従来のiGAよりも提案手法を用いたほうがよいことがわかる。

表4. ユーザ実験のアンケート結果(数字は人数)

	(A)	(B)	(C)	(D)
$n = 5$	4	5	4	2
$n = 10$	7	4	4	0
$n = 15$	10	4	1	0
$n = 20$	11	3	1	0

4.2.3 実験3の結果と考察

最適解の誤差と標準偏差の関係(100回平均)を図4に示す。図4から実験1のパラメータ数が3つのときと同様の結果が得られることがわかった。ただし、パラメータ数が増えたため、ユーザの評価値の揺らぎに相当する σ を10程度に増やすと最適解に近い解を求めることが困難となっている。また、実験1の結果と比べると相対的に最適解の誤差が大きくなっていることがわかる。また、 σ が比較的小さい状況では実験1と同様にユーザが評価する解の数 n を増やせば最適解の誤差は小さくなることがわかった。

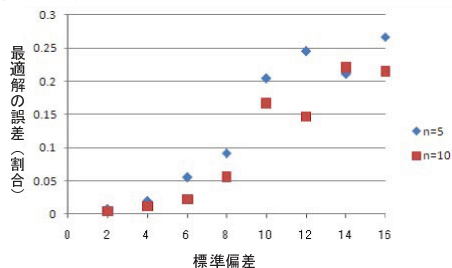


図4. 最適解の誤差(多重価値問題:パラメータ数12)

4.2.4 実験4の結果と考察

実験4では実験2と類似した条件でパラメータ数が多い場合を想定してユーザに対してモニタ実験を行った。その結果、実験2と同様に n を増やすにつれてユーザの評価はよくなった。しかし、実験2と比べるとユーザの評価は下がった。これはパラメータ数が多くなったことで、パラメータ数が少ないときと比べて推定精度が下がり、これがGAの解探索の結果にも結びついたためと考えられる。

4.2.5 実験5の結果と考察

実験5では対話とGAによる探索を2回以上繰り返す際に、前回の準最適解をGAの初期個体群を混ぜることの有効性を確認した。その結果世代数が多いときは、アルゴリズムを改良した効果は見られなかったが、世代数が少ないときは改良した効果が大きいことがわかった。世代数が大きいと計算コストが大きいので、この方法を用いることで世代数が少ない計算コストがかからない条件でも準最適解が得られることがわかる。

5 結論と今後の課題

本研究では、複数の評価項目の重みパラメータがユーザによって異なる状況を想定し、重み推定と解探索を対話的に行う方法を提案した。具体的には評価関数が評価要素の線形和で表わされる場合を想定し、ユーザが解に対して付与した評価値をもとに、最小二乗法により重みパラメータを逐次推定しながら、GAによる解探索を行う方法を提案した。評価実験により、ユーザの評価は線形モデルで表現できるケースが存在し、パラメータが少ないときはユーザにとって最適解を出力できる可能性が高いことがわかった。

今後の課題としては、重みパラメータ数が多い場合の手法の改善が挙げられる。また、今回はユーザは解に対して得点を付けたが、実際にユーザ実験の際に得点づけを負担に感じるユーザも見受けられた。今後は、一対比較を用いた場合を想定した提案手法も検討したい。

参考文献

- [1] Goldberg. D. E, "Genetic Algorithms in search, Optimization, and Machine Learning," Addison-Wesley Professional, 1989.
- [2] 伊藤冬子, 廣安知之, 三木光範, 横内久猛, "対話型遺伝的アルゴリズムにおける嗜好の多峰性に対応可能な個体生成方法の検討," 人工知能学会論文誌 24(1), pp.127-135, 2009.
- [3] Takagi. H, "Interactive Evolutionary Computation fusion of the capabilities of EC optimization and human evaluation," Proceedings of the IEEE, vol.89, No.9, pp.1275 ~ 1296, 2001.
- [4] 渡辺芳信, 吉川大弘, 古橋武, "一対比較評価に基づく対話型遺伝的アルゴリズム," 情報処理学会研究報告, 2007-MPS-63, pp.69-72, 2007.
- [5] Gong. D. W, Yuan. J, Ma. X. P, "Interactive Genetic Algorithm with Large population size," Proceedings of the 2008 IEEE congress on evolutionary computation, pp.887-894, 2008.
- [6] 丸山敦史, 柴田直樹, 村田住洋, 安本慶一, 伊藤実, "P-Tour:観光スケジュール作成支援とスケジュールに沿った経路案内を行うパーソナルナビゲーションシステム," 情報処理学会論文誌, Vol.45, No.12, pp.2678-2687, 2004.
- [7] 山本章夫, 橋本寛, "原子燃料の炉心内配置の最適化 - GA, SAの適用事例," オペレーションズ・リサーチ 11月号, vol44, N0.11, pp.599-603, 1999.
- [8] 森本章雄, 三宅宏典, 高之瀬文明, 大北正昭, 大木誠 "遺伝的アルゴリズムによる看護師勤務表の最適化," FIT2005(第4回情報科学技術フォーラム), A024, pp.57-58, 2005.
- [9] Hoerl. A. E. and Kennard, R. W, "Ridge Regression: Biased Estimation for Nonorthogonal Problems," Technometrics 12(3), 55-67, 1970.