

Quality Diversity Algorithm ベンチマークの性能評価

荒井泰帆

(指導教員：オベル加藤ナタナエル)

1 はじめに

科学や工学の多くの分野で最適化アルゴリズムは利用されている。例えば NASA が宇宙に飛ばしたアンテナの設計、特許取得可能な電子回路設計の発見、科学的発見を自動化を図ったり、ロボットの人工知能の創造などである。これらのアルゴリズムは広く使用されており、これを改善することは社会に大きな利益をもたらす。[1]

本研究では Comparing Continuous Optimizer platform (以下 coco)[2] を用いて Quality Diversity Algorithm (以下 qd アルゴリズム) を評価する。この研究は新たな標準的な qd アルゴリズムのベンチマークを開発することを最終的な目標とする。

2 先行研究

qd アルゴリズムとは与えられた問題に対して多様で高品質な解を生成するための最適化アルゴリズムの一種であり、進化計算、機械学習、最適化などで使われる [3]。qd アルゴリズムの特徴は従来の最適化アルゴリズムとは異なる特徴をもっている。

特徴の一つ目は最適解を見つけることよりも、多様な高性能な解の集合を提供することに焦点をあてていることだ。これによりユーザーは自身の知識や目的に基づいて最も興味深い解を選択できる。また問題空間全体を効果的に探索し、局所最適解に陥るリスクを軽減することができる。

さらに、qd アルゴリズムは解のふるまいを記述する“行動記述子空間”を重視している。行動記述子空間は、解の多様性をとらえるために重要でありアルゴリズムの収束を促進する。また qd アルゴリズムは解の集合を断続的に拡張し改善することで、多様性と性能の両方を向上させることができる。

しかし現在の qd アルゴリズムのベンチマークは限られていることが問題となっている。先行研究では標準化されたベンチマークの必要性について説き実際にそのようなベンチマークを作成しようと試みた論文がある。[4]

この論文では qd アルゴリズムの 3 つの課題に焦点をあてて、それぞれの課題に対応するベンチマークが提案された。

- ・行動メトリックのバイアス (Behavior Metric Bias) 行動空間の構造に一致しないメトリックの使用によって生じるバイアスに対処するためのベンチマーク

- ・行動プラトー (Behavioral Plateaus) 異なる特性を持つ行動プラトーに対処し、それから脱出するための適応型 qd アルゴリズムを必要とするベンチマーク

- ・進化の罠 (Evolvability Traps) 遺伝子型のわずかな変化が大きな行動変化をもたらす進化の罠に対処

するためのベンチマーク

この研究では今後新たな課題についても特定され、それに対処するための新たなベンチマークが提案されることが期待されている。本研究では新たなベンチマークを最終的に提案することを目標に、今回は既存のベンチマークを coco に導入してその結果を比較する。

今回使用する coco について説明する [2]。

coco プラットフォームは数値最適化アルゴリズムのベンチマークを行うためのオープンソースプラットフォームである。ベンチマークプロセスが自動化されており、200 以上のアルゴリズムの実験データが蓄積されている。そしてそれを最適化アルゴリズムの性能を客観的に比較する為に使用することができる、他プラットフォームと比べ再現性の高い評価をすることができるツールである。

多様なベンチマーク関数や実験設定を提供し、ユーザーが自身の最適化アルゴリズムを評価するための環境を提供する。

いくつかのアルゴリズムを実際に coco に当てはめ、ブラックボックス最適化の多様性と品質のトレードオフについての研究もされている。本研究と類似している研究となっている。[5] この研究では 2 次元から 10 次元の探索空間で、ランダムサンプリング、既存の最適化手法、マルチモーダルアルゴリズム*2(以下 MMO アルゴリズム) について 24 種類の BBOB テスト関数で性能を評価し、多次元空間での振る舞いを分析している。この研究の実験ではランダムサンプリングがしばしば既存の最適化アルゴリズムより良い結果を返すことがある。既存の最適化手法ではいずれも品質または多様性のどちらか一方にのみ重点を置いているものが多いため、今回の結果を基礎として両者のバランスをとることを目指した新しいアルゴリズムの開発が必要とされている。問題の性質、関数の構造や次元によって最適なアプローチは異なるため柔軟な手法が必要である。新しいアルゴリズム設計に向けた提案として、例えば MMO アルゴリズムなどの既存のアルゴリズムに距離制約を明示的に組み込むことでトレードオフの性能を向上させられる可能性がある」と述べている。

この研究では本研究の対象となっている qd アルゴリズムは使われていないが、品質と多様性のバランスを取るアルゴリズムの基盤として参照されていて、この手法を今後のアルゴリズム設計に応用できる可能性が示唆されている。本研究では実際に qd アルゴリズムをブラックボックス最適化、coco に当てはめて評価する実験を行った。

3 実験

今回は qd アルゴリズムの独自ベンチマークを開発する前段階として既存のベンチマークを使って qd アルゴリズムの評価を試みた。今回は qd アルゴリズムの一つ Map-Elites*1[1] を、coco プラットフォームに導入し比較した。

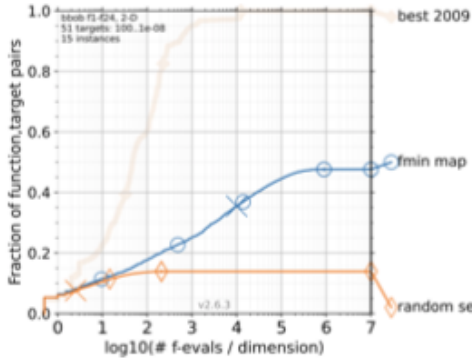


図 1: 経過時間 (横軸) に対する問題の完成度 (縦軸) それぞれランダムサーチ (オレンジ), coco での最も効率的なベンチマーク best2009 薄黄)

Runtime distributions (ECDFs) over all targets

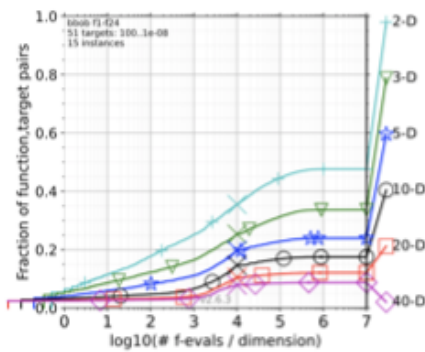


図 2: Map-Elites での実行について次元ごとに結果をまとめている

2つの図から Map-Elites を用いても時間内に 1.0 までに到達せず、coco にとっては効率的なベンチマークでないことが示されている。局所的には問題を解決できる事例が散見されるが全体としては解決できない事例が多い。これは Map-Elites がグリッドの中を網羅的に探索するアルゴリズムであり、best2009 で示されている coco の最も効率的なアルゴリズムと比べると非効率的な探索になることが挙げられる。Map-Elites は多様性の維持という観点では優れた性能を発揮するが、効率性が求められるベンチマークや課題解決ではあまり適さない場面が出てきてしまうという側面がこの実験では浮き彫りになっている。

4 まとめ

今回は最適化アルゴリズムの評価ツール coco を用いて qd アルゴリズムの既存のベンチマークの結果を追った。

今回の実験では追うことが出来なかったが、探索の多様性に重点をおいて計測をすることで qd アルゴリズムのベンチマークの性能をより正確に測ることができると予想できる。上記を重要視した上で、ランダムサーチやさらに qd スコアに注目して比較することができる最適な環境を整えることが今後の課題だ。

5 注釈

*1 Map-Elites は進化アルゴリズム, qd アルゴリズムの一種であり高性能な解の分布を探索空間全体で網羅的にマッピングすることを可能にするアルゴリズムである。

*2 マルチモーダル最適化 (Multimodal Optimization, MMO) は、探索空間内の複数の極値 (最適解) を同時にを見つけることを目的とする最適化手法である。

参考文献

- [1] Jean-Baptiste Mouret and Jeff Clune. [1504.04909] illuminating search spaces by mapping elites. <https://arxiv.org/abs/1504.04909>, Apr 2015. (Accessed on 08/07/2024).
- [2] Nikolaus Hansen (RANDOPT), Anne Auger (RANDOPT), Raymond Ros (TAO), Olaf Mersmann (TU), Tea Tušar (IJS), and Dimo Brockhoff (RANDOPT). [1603.08785] coco: A platform for comparing continuous optimizers in a black-box setting. <https://arxiv.org/abs/1603.08785>, Mar 2016. (Accessed on 08/07/2024).
- [3] Konstantinos Chatzilygeroudis, Antoine Cully, Vassilis Vassiliades, and Jean-Baptiste Mouret. [2012.04322] quality-diversity optimization: a novel branch of stochastic optimization. <https://arxiv.org/abs/2012.04322>, Dec 2020. (Accessed on 08/07/2024).
- [4] Achkan Salehi and Stephane Doncieux. [2205.03207] towards qd-suite: developing a set of benchmarks for quality-diversity algorithms. <https://arxiv.org/abs/2205.03207>, May 2022. (Accessed on 08/07/2024).
- [5] [2408.16393] illuminating the diversity-fitness trade-off in black-box optimization. [Online; accessed 2025-01-08].