

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 3月31日現在

機関番号：25403

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2008～2011

課題番号：20500138

研究課題名（和文） 低精度近似モデルを利用した効率的探索による
大規模問題の汎用的最適化に関する研究研究課題名（英文） A study on large-scale optimization by efficient search methods
using approximation models with low accuracy

研究代表者

高濱 徹行 (TAKAHAMA TETSUYUKI)

広島市立大学・情報科学研究科・教授

研究者番号：80197194

研究成果の概要（和文）：汎用的かつ効率的な最適化アルゴリズムを実現するために、比較推定法の提案・改良を行った。比較推定法は、低精度近似モデルを用いて良好でないと推定された探索点の評価を省略することにより探索効率を大きく向上する方法である。①低精度近似モデルとして potential モデルを提案し、②誤差余裕及び混雑度を導入し、③Differential Evolution の新しいパラメータ設定法を提案し、④ ϵ 制約法と組み合わせる方法を提案した。これにより、汎用性を損なうことなく探索効率の高い最適化アルゴリズムが実現できることを示した。

研究成果の概要（英文）：In this study, we proposed and improved “estimated comparison method”, which reduces the number of function evaluations by omitting the function evaluations when the result of comparison can be judged by approximation values, in order to realize a general purpose efficient optimization algorithm. In this study, it is shown that the efficient general purpose algorithm can be built by introducing the potential model that is an approximation model with low accuracy, introducing the margin error parameter and the congestion parameter, proposing a new way of parameter settings for differential evolution and combining the method with the epsilon constrained method.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	500,000	150,000	650,000
2009年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2010年度	500,000	150,000	650,000
2011年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総計	2,900,000	870,000	3,770,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・知能情報学

キーワード：最適化アルゴリズム, 進化的計算, Differential Evolution, 低精度近似モデル, 近似モデル, 機械学習, 制約付き最適化, Expensive Optimization

1. 研究開始当初の背景

近年、様々な分野において複雑で大規模な最適化問題に対するニーズが高まってきているため、最適化の対象となる目的関数の評価コストが増大する傾向にある。例えば、計算流体力学(CFD)シミュレーションを要する

空力設計最適化では、CFDシミュレーションのために1回の計算に数10時間かかる場合もある。このため、最適化のための探索過程において、目的関数の評価回数を抑えることのできる効率的な最適化アルゴリズムの開発が大きな課題となってきている。

関数評価回数を大幅に削減するための代表的な方法として、目的関数の近似モデルを構成し、近似値を利用して探索を行う研究が進化的アルゴリズムを中心に活発に行われている。確かに、精度の高い近似モデルを学習し探索に利用できれば、関数評価回数を大きく削減できるが、以下のような問題がある。

- ① 汎化性能の高い高精度の近似モデルを学習することは非常に困難である。また、訓練データに対して近似精度の高い近似モデルの汎化性能が高いとは限らないという問題もある。
- ② 近似する目的関数によって適切な学習方法が異なるため、試行錯誤的に学習パラメータを調整しなければならず、利用のための汎用性があまり高くない。
- ③ 高精度の近似モデルを学習するためには、一般に大きな計算コストを要するため、大規模問題の中でも中程度のコストの目的関数の最適化に利用すると学習コストが評価回数の削減効果を超えてしまうこともある。

このように、従来の研究は、高精度の近似モデル、すなわち近似誤差が小さく汎化能力の高いモデルを得るために、最適化問題毎に、どのような近似モデルを用い、どのように学習するかを検討する必要があった。したがって、最適化対象によって近似モデルや学習方法を変更する必要があり、学習パラメータの調整も必要となるため、近似モデルを含む最適化システム全体としての汎用性が失われる結果となっている。

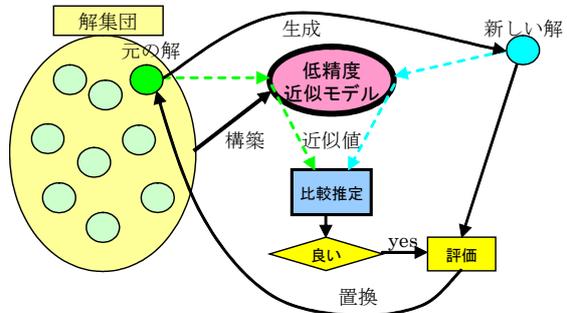
2. 研究の目的

本研究では近似モデルを含む最適化システム全体として汎用性が高く、探索効率も高いアルゴリズムの開発を目的とする。上記のような近似モデルの利用に関する問題点を解決するために、学習が不要あるいは学習コストが極めて小さい低精度の近似モデルを用いて関数評価回数を削減することにより、探索効率を向上させる。学習が不要な低精度近似モデルを有効に利用できれば、汎化能力の高い学習のために必要な様々な学習パラメータの調整が不要となり、広範囲の問題に簡単に利用できる。

低精度近似モデルを利用する最適化アルゴリズムとして、本研究では網羅性と効率性のバランスに優れた集団的降下法を採用する。集団的降下法とは、複数の解により集団を形成し、集団から得られる情報に基づき、集団中の各解に対して新たに解を生成し、この解が良ければ元の解と置換するというアルゴリズムである。代表的なアルゴリズムとしては、差分進化 (Differential Evolution, DE) や粒子群最適化がある。

本研究では、集団的降下法における古い解と新しい解の比較操作に注目し、比較のみに

近似モデルによる推定値を用いることにより関数評価回数を削減する比較推定法を提案する。比較推定法の概要を下図に示す。最初に、解集団から低精度の近似モデルを構築する。次に、各々の解から新しい解を生成した後、低精度近似モデルによりそれぞれの解の近似値を求める。新しい解が良いと推定された場合のみ、その解の真の関数値を評価し、新しい解の真値が元の解の真値より良ければ元の解を置き換える。



これにより、比較推定が正しければ、良いすなわち降下方向と推定される解のみが実際に評価されることになり、降下方向以外と推定される解の評価を削減できることになる。集団的降下法においては、一般に降下方向の解が見つかる頻度は低いため、十分な削除効果が期待できる。

比較推定法の重要な特長は、低精度の近似モデルを使用できることである。比較推定法では推定値同士を比較するため、推定値により大小関係が正しく判断できれば、真の関数値との誤差が大きくても、最適解を見つけることができる。さらに、比較推定法では、近似誤差に配慮し、良くなりそうな解を排除しないための余裕パラメータを指定する。このため、低精度の近似モデルを用いても有効に関数評価回数の削減が可能となる。したがって、従来のように汎化性能の高い高精度の近似モデルを学習する必要がなくなり、推定値を効率よく求められるため、比較的低関数の最適化にも利用可能となる。

3. 研究の方法

本研究では比較推定法を中心に下記の項目について研究を進めた。

- ① 基本となる集団的降下法のアルゴリズム
集団的降下法の選定及び選定したアルゴリズムの性能向上について検討する。
- ② 低精度の近似モデル
学習が不要な低精度近似モデルとして potential 法を提案しているが、学習が不要あるいは学習コストが極めて小さい他の近似モデルについても検討する。
- ③ 近似誤差への配慮
低精度近似モデルでは、誤差が避けられないため、良くなる可能性のある解を排除する

ことがある。このような解を排除しすぎると、局所解に陥ることになるため、誤差余裕について検討する。

④ 非線形制約付き問題への対応

近似モデルを利用した最適化では制約のない最適化問題や上下限制約のみの最適化問題についての研究が多いが、実際的な最適化問題の多くは非線形制約を有しているため、制約付き最適化への対応も考慮する。

4. 研究成果

主な研究成果を年度毎に記述する。

(1) 2008 年度の成果

比較推定法において、学習が不要な低精度近似モデルとして提案した potential モデルを用い、最適化アルゴリズムとして集団的降下法であり進化的アルゴリズムである DE を用いた potentialDE を考案した。potentialDE を単純な単峰性関数、変数依存性の強い関数、悪スケール関数、多峰性関数という典型的な 4 種類の関数に適用し、DE と比較して関数評価回数をそれぞれ 57%, 14%, 15%, 49% 削減できることを示した。

誤差余裕パラメータをより正確に設定・制御するために、比較推定の成功率に基づいて誤差余裕パラメータを動的に変化させる方法を提案し、同じ関数について評価回数をそれぞれ 64%, 28%, 26%, 51% 削減できることを示した。さらに、我々が開発した制約付きアルゴリズムへの変換法である ϵ 制約法を potentialDE に適用することにより、効率的な制約付き最適化アルゴリズム ϵ DEpm を提案し、従来法と比較して代表的な 13 個の制約付き最適化問題が 1/4 以下の関数評価回数で解けることを示した。

(2) 2009 年度の成果

現在提案している potential モデル以外の低精度近似モデルについて検討した。低精度近似モデルの候補として、カーネル関数を利用した kernel smoother を取り上げ、kernel average smoother と nearest neighbor smoother を potential モデルと比較した。数値実験の結果、potential モデルが kernel smoother より優れており、kernel smoother の中では nearest neighbor smoother が優れていることを示した。

比較推定法では、低精度近似モデルを利用して解を比較し、有望でない解の評価を省略することによって評価回数を削減する。しかし、低精度近似モデルはある程度の誤差を含むため、近似誤差が比較推定法の性能に大きく影響する。このような誤差に対処するために、比較の際の許容誤差を設定する誤差余裕パラメータを導入していたが、解の近傍に点が少なく近似精度が低いと予想される場合に解の評価を省略することを避けるために、混雑度パラメータを導入した。この 2 つのパ

ラメータについて数値実験を行ったところ、適切なパラメータ値は対象とする問題によって変化することが分かった。適切なパラメータ値は探索過程によっても変化すると予想されるため、パラメータ値を動的に制御する方法について検討した。生成された新しい解が古い解よりも優れている確率を探索の成功率として捉えると、成功率が高い場合には近似が容易であり、成功率が低い場合には近似が困難であると考えられる。これを利用して、近似が容易な場合にはパラメータ値を小さく設定して誤差の許容度を減少させ、近似が困難な場合にはパラメータ値を大きく設定して誤差の許容度を増加させることにより、動的にパラメータを制御する方法を提案し、良好な結果が得られることを示した。

(3) 2010 年度の成果

比較推定法を用いた制約付き最適化の効率化を中心に検討した。我々が提案してきた汎用的な制約付き最適化手法である ϵ 制約法において、制約領域の緩和量を調整するパラメータである ϵ レベルの新しい調整法を提案した。Differential Evolution (DE) に ϵ 制約法を適用した制約付き最適化アルゴリズムである ϵ DE に対して、この調整法とアーカイブを導入した ϵ DEag を提案し、国際会議 IEEE Congress on Evolutionary Computation 2010 で開催された Competition on Real-Parameter Optimization に参加し、優勝することができた。さらに、この調整法と DE のパラメータを動的に調整する方法を導入した ϵ ADE を提案し、 ϵ DE と比較して代表的な制約付き最適化問題が 1/2 程度の関数評価回数で解けることを示した。

(4) 2011 年度の成果

主な成果は下記の 3 点である。

①最適化アルゴリズムの改良

本研究では、最適化アルゴリズムとして Differential Evolution (DE) を採用しているが、DE を効率的に実行するためには、アルゴリズムパラメータを適切に設定する必要がある。このための新しい試みとして、ランク情報に基づくパラメータ調整法を提案した。探索の起点となる基本ベクトルを目的関数値の良さによってランク付けし、良い基本ベクトルが選択された時にはその近傍を探索するためスケールリングファクター (F) を小さく交叉率 (CR) を大きくし、悪い基本ベクトルが選択された時には大域的な探索を行うために F を大きく CR を小さくする方法である。本手法を RDE (rank-based DE) と名付け、その有効性を示した。

②制約付き最適化の効率化

ϵ 制約法と RDE を統合した ϵ RDE を提案し、その有効性を示した。

③多峰性問題への対応

多峰性問題は近似精度が低下しやすい困

難な問題である。低精度近似モデルである potential モデルでは解集団の各解の目的関数値を滑らかにつなぐように近似するため、最適解が隠され、局所解の方へ探索が進み、探索効率の低下や局所解への収束に陥ることがある。これに対処するために、種分化により解を棲み分けることにより、局所解に陥りにくい探索を行う方法について検討した。種分化により解を棲み分ける方法について研究を行い、種分化の手法として、k-means クラスタリング、k-最近傍法、ランダムに種分化を行う方法について実験し、k-最近傍法が最も良好な性能を有することを示した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 20 件)

- ① Takumi Ichimura, Hiroshi Inoue, Akira Hara, Tetsuyuki Takahama, Kenneth J. Mackin, A Proposal of Memory and Prediction Based Genetic Algorithm Using Speciation in Dynamic Multimodal Function Optimization, Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics, 査読有, 15, 1082-1094, 2011
- ② Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Fuzzy C-Means Clustering and Partition Entropy for Species-Best Strategy and Search Mode Selection in Nonlinear Optimization by Differential Evolution, Proc. of 2011 IEEE International Conference on Fuzzy Systems, 査読有, 290-297, 2011, DOI: 10.1109/FUZZY.2011.6007625
- ③ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Efficient Nonlinear Optimization by Differential Evolution with a Rotation-Invariant Local Sampling Operation, Proc. of 2011 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 査読有, 2215-2222, 2011, DOI: 10.1109/CEC.2011.5949889
- ④ 阪井節子, 高濱徹行, Differential Evolutionによる非線形最適化—直交ベクトルを用いた回転不変性を有する交叉の実現—, 不確実性下における意思決定問題, 数理解析研究所講究録 1734, 査読無, 188-195, 2011
- ⑤ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Solving Nonlinear Optimization Problems by Differential Evolution with a Rotation-Invariant Crossover Operation using Gram-Schmidt process, Proc. of the World Congress on Nature and Biologically Inspired Computing, 査読有, 533-540, 2010, DOI: 10.1109/NABIC.2010.5716327
- ⑥ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Efficient Constrained Optimization by the ϵ Constrained Adaptive Differential Evolution, Proc. of 2010 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 査読有, 2052-2059, 2010, DOI: 10.1109/CEC.2010.5586545
- ⑦ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Constrained Optimization by the ϵ Constrained Differential Evolution with an Archive and Gradient-Based Mutation, Proc. of 2010 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 査読有, 1680-1688, 2010, DOI: 10.1109/CEC.2010.5586484
- ⑧ 阪井節子, 高濱徹行, 多次元空間における近傍構造を利用した最適化アルゴリズムに関する一検討, 不確実・不確実性下での意思決定過程, 数理解析研究所講究録 1682, 査読無, 184-192, 2010, <http://repository.kulib.kyoto-u.ac.jp/dspace/handle/2433/141385>
- ⑨ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Akira Hara, Noriyuki Iwane, Predicting Stock Price Using Neural Networks Optimized by Differential Evolution with Degeneration, International Journal of Innovative Computing, Information and Control, 査読有, 5, 5021-5031, 2009, <http://www.ijicic.org/isii08-228-1.pdf>
- ⑩ 柴坂美祐喜, 原章, 市村匠, 高濱徹行, 種分化を導入したDifferential Evolutionによる複数解をもつ多峰性関数の最適化, 電子情報通信学会論文誌, 査読有, J92-D, 1003-1014, 2009, <http://harp.lib.hiroshima-u.ac.jp/handle/harp/6022>
- ⑪ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Fast and Stable Constrained Optimization by the ϵ Constrained Differential Evolution, Pacific Journal of Optimization, 査読有, 5, 261-282, 2009
- ⑫ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, A Comparative Study on Kernel Smoothers in Differential Evolution with Estimated Comparison Method for Reducing Function Evaluations, Proc. of 2009 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 査読有, 1367-1374, 2009, DOI: 10.1109/CEC.2009.4983103

- ⑬ 阪井節子, 高濱徹行, 退化を導入した Differential Evolution により最適化されたニューラルネットワークによる株価予測, 不確実性と意思決定の数理, 数理解析研究所講究録 1636, 査読無, 79-87, 2009,
<http://hdl.handle.net/2433/140497>
- ⑭ 高濱徹行, 阪井節子, 低精度近似モデルを利用した ϵ 制約 Differential Evolution による効率的な制約付き最適化, 人工知能学会論文誌, 査読有, 24, 34-45, 2009,
http://www.jstage.jst.go.jp/article/tjsai/24/1/24_34/_article/-char/ja
- ⑮ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Akira Hara, Noriyuki Iwane, Predicting Stock Price using Neural Networks Optimized by Differential Evolution with Degeneration, 2008 International Symposium on Intelligent Informatics, 査読有, 20, 2008
- ⑯ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Efficient Optimization by Differential Evolution using Rough Approximation Model with Adaptive Control of Error Margin, Proc. of the Joint 4th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 9th International Symposium on Advanced Intelligent Systems, 査読有, 1238-1243, 2008
- ⑰ 阪井節子, 高濱徹行, 低精度近似モデルを利用した DE による効率的な最適化—許容誤差パラメータに関する適応制御の提案—, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2008 年秋季研究発表会アブストラクト集, 264-247, 2008
- ⑱ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Reducing Function Evaluations in Differential Evolution using Rough Approximation-Based Comparison, Proc. of 2008 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 査読有, 2307-2314, 2008, DOI: 10.1109/CEC.2008.4631105
- ⑲ 高濱徹行, 阪井節子, 原章, 低精度の近似モデルを用いた比較推定法による Differential Evolution における関数評価回数の削減, 電子情報通信学会論文誌, 査読有, J91-D, 1275-1285, 2008,
<http://harp.lib.hiroshima-u.ac.jp/handle/harp/6021>
- ⑳ 阪井節子, 高濱徹行, 多目的最適化手法 NSGAIII における等距離選択の効果について, 不確実な状況における意思決定の理論の展開と応用, 数理解析研究所講究録 1589, 査読無, 53-64, 2008,
<http://hdl.handle.net/2433/81586>
- [学会発表] (計 15 件)
- ① 阪井節子, 制約付き最適化手法 ϵ 制約 Differential Evolution における探索点のランク情報の利用法に関する一考察, RIMS 研究集会「不確実・不確定環境下における数理的な意思決定とその周辺」, 2011 年 11 月 7 日, 京都大学数理解析研究所 (京都)
- ② Tetsuyuki Takahama, Fuzzy C-Means Clustering and Partition Entropy for Species-Best Strategy and Search Mode Selection in Nonlinear Optimization by Differential Evolution, 2011 IEEE International Conference on Fuzzy Systems, 2011 年 6 月 28 日, 台北(台湾)
- ③ Tetsuyuki Takahama, Efficient Nonlinear Optimization by Differential Evolution with a Rotation-Invariant Local Sampling Operation, 2011 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 2011 年 6 月 8 日, ニューオーリンズ(米国)
- ④ Tetsuyuki Takahama, Solving Nonlinear Optimization Problems by Differential Evolution with a Rotation-Invariant Crossover Operation using Gram-Schmidt process, World Congress on Nature and Biologically Inspired Computing, 2010 年 12 月 17 日, 北九州国際会議場 (北九州)
- ⑤ 阪井節子, Differential Evolution による非線形最適化-直交ベクトルを用いた回転不変性を有する交叉の実現-, RIMS 研究集会「不確実性下における意思決定問題」, 2010 年 11 月 25 日, 京都大学数理解析研究所 (京都)
- ⑥ Tetsuyuki Takahama, Constrained Optimization by the ϵ Constrained Differential Evolution with an Archive and Gradient-Based Mutation, 2010 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 2010 年 7 月 21 日, バルセロナ (スペイン)
- ⑦ Tetsuyuki Takahama, Efficient Constrained Optimization by the ϵ Constrained Adaptive Differential Evolution, 2010 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 2010 年 7 月 23 日, バルセロナ (スペイン)
- ⑧ 阪井節子, 多次元空間における近傍構造を利用した最適化アルゴリズムに関する一検討, RIMS 研究集会「不確実・不確実性下での意思決定過程」, 2009 年 11 月 12 日, 京都大学数理解析研究所 (京都)
- ⑨ Tetsuyuki Takahama, A Comparative Study on Kernel Smoothers in Dif-

ferential Evolution with Estimated Comparison Method for Reducing Function Evaluations, 2009 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 2009年5月20日, トロンハイム(ノルウェー)

- ⑩ 高濱徹行, 低精度近似モデルを導入したDifferential Evolutionと ϵ 制約法による効率的制約付き最適化, 進化計算シンポジウム2008, 2008年12月20日, ホテルまほろば(登別)
- ⑪ Tetsuyuki Takahama, Predicting Stock Price using Neural Networks Optimized by Differential Evolution with Degeneration, 2008 International Symposium on Intelligent Informatics, 2008年12月12日, 東海大学(熊本)
- ⑫ 阪井節子, 退化型DEにより最適化されたニューラルネットワークによる株価予測, RIMS研究集会「不確実性と意思決定の数理」, 2008年11月10日, 京都大学数理解析研究所(京都)
- ⑬ Tetsuyuki Takahama, Efficient Optimization by Differential Evolution using Rough Approximation Model with Adaptive Control of Error Margin, Joint 4th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 9th International Symposium on advanced Intelligent Systems, 2008年9月20日, 名古屋大学(名古屋)
- ⑭ 阪井節子, 低精度近似モデルを利用したDEによる効率的最適化—許容誤差パラメータに関する適応制御の提案—, 日本オペレーションズ・リサーチ学会2008年秋季研究発表会, 2008年9月11日, 札幌コンベンションセンター(札幌)
- ⑮ Tetsuyuki Takahama, Reducing Function Evaluations in Differential Evolution using Rough Approximation-Based Comparison, 2008 IEEE Congress on Evolutionary Computation, 2008年6月20日, 香港(中国)

[図書](計7件)

- ① Setsuko Sakai, Tetsuyuki Takahama, Kyushu University Press, Social Systems Solutions Applied by Economic Sciences and Mathematical Solutions, 「A Comparative Study on Neighborhood Structures for Speciation in Species-Based Differential Evolution」の章を分担, 111-135, 2012
- ② Setsuko Sakai, Tetsuyuki Takahama, Kyushu University Press, The New Viewpoints and New Solutions of

Economic Sciences in the Information Society, 「RIDE: Differential Evolution with a Rotation-Invariant Crossover Operation for Nonlinear Optimization」の章を分担, 85-108, 2011

- ③ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Springer-Verlag, Computational Intelligence in Expensive Optimization Problems, 「Reducing Function Evaluations Using Adaptively Controlled Differential Evolution with Rough Approximation Model」の章を分担, 111-129, 2010
- ④ Setsuko Sakai, Tetsuyuki Takahama, Kyushu University Press, Social Systems Solution by Legal Informatics, Economic Sciences and Computer Sciences, 「A Parametric Study on Estimated Comparison in Differential Evolution with Rough Approximation Model」の章を分担, 112-134, 2010
- ⑤ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Springer-Verlag, Constraint-Handling in Evolutionary Optimization, 「Solving Difficult Constrained Optimization Problems by the ϵ Constrained Differential Evolution with Gradient-Based Mutation」の章を分担, 51-72, 2009
- ⑥ Setsuko Sakai, Tetsuyuki Takahama, Kyushu University Press, Research on Information Society and Social Systems, 「Multiobjective Optimization by Improved NSGA-II with Extended Crossover and Uniform Distance Selection」の章を分担, 121-142, 2008
- ⑦ Tetsuyuki Takahama, Setsuko Sakai, Springer-Verlag, Advances in Differential Evolution, 「Constrained Optimization by the ϵ Constrained Differential Evolution with Dynamic ϵ -level Control」の章を分担, 139-154, 2008

6. 研究組織

(1) 研究代表者

高濱 徹行 (TAKAHAMA TETSUYUKI)
広島市立大学・情報科学研究科・教授
研究者番号: 8 0 1 9 7 1 9 4

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者