

令和 6 年 6 月 12 日現在

機関番号：12401

研究種目：若手研究

研究期間：2021～2023

課題番号：21K17826

研究課題名（和文）二値分類機械学習モデルを用いる高コスト最適化問題に対する進化的アルゴリズム

研究課題名（英文）Evolutionary Algorithms Using Pairwise Ranking Machine Learning Models for Expensive Optimization Problems

研究代表者

原田 智広（Harada, Tomohiro）

埼玉大学・理工学研究科・准教授

研究者番号：40755518

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,600,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、進化的アルゴリズム(EA)のための新しい二値分類型サロゲートモデルELDRを提案した。ELDRを用いたEAを制約あり・なし最適化問題に適用し、既存手法より優れた性能を示し、特に高次元問題で大きな性能向上があった。さらに、ELDRを実世界の最適化問題に適用し、ELDRにより従来より少ない評価回数で良好な設計が可能であることを示した。研究全体を通じ、ELDRの提案、ELDRを用いたEAの確立と有効性検証、実問題への適用など、幅広い成果を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、進化的アルゴリズムによる効率的な解探索のために、少ないデータ数で高精度に評価値を推定可能な新しい二値分類型サロゲートモデルELDRを提案し、その有効性を検証した。実世界の多くの最適化問題は、解候補の評価にシミュレーションや複雑な数値計算を用いるため評価コストが高く、最適解の獲得までに莫大な計算時間を要する。本研究の研究成果によって、このような実世界の高コストな最適化問題に対して、従来より少ない評価回数で高品質な解を効率的に獲得できることが期待される。

研究成果の概要（英文）：This research proposed a new binary classification surrogate model called ELDR for evolutionary algorithms (EAs). By applying the EA using ELDR to constrained and unconstrained optimization problems, this research demonstrated superior performance compared to existing methods, with particularly significant performance improvements for high-dimensional problems. This research applied ELDR to a real-world optimization problem and showed that it enables better designs with fewer evaluations than conventional methods. This research achieved a wide range of results, including the proposal of ELDR, the establishment and validation of the effectiveness of EAs using ELDR, and the application to real-world problems.

研究分野：計算知能

キーワード：進化計算 機械学習 最適化

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

進化的アルゴリズム (Evolutionary Algorithm: EA) は、対象となる問題の特性によらず適用可能な最適化の一手法であり、工学設計や、製薬、無線通信網最適化など幅広い分野に応用されている。実世界の最適化問題 (以降、実問題) は、設計候補 (解) の評価にシミュレーションや複雑な数値計算を用いるため莫大な計算時間を要する。

EA に要する計算時間を削減する方法として代替評価モデル (サロゲートモデル) を用いる EA (SAEA) が提案されている。SAEA は、計算コストの高い解評価の代わりに、解評価を推定するサロゲートモデルを機械学習 (ML) を用いて構築し、サロゲートによる推定評価値を用いて EA を実行することで、有望な解を探索する。そして、有望解のみ計算コストの高い実評価を適用し、正しい評価値を算出する。サロゲートによる評価値推定は、シミュレーションなどを用いる実評価と比べて計算時間が非常に短いため、最適化時間を削減できる。

しかし、従来 SAEA は、探索過程で実評価した数百から数千個程度の解集合を学習データとして用いてサロゲートモデルを構築するが、学習データ数が少ないため高精度の推定ができない問題がある。推定精度の低い代替評価モデルを用いる最適化では、実評価値の高い有望解を獲得できず探索性能が低下する課題がある。

2. 研究の目的

本研究では、少ない解評価回数で最適解を獲得可能な SAEA を確立し、その有効性を検証することを目的とする。提案 SAEA では、EA が解同士の優劣付けに基づいて親選択や世代交代の操作を実行する点に着目し、解の優劣を判別する二値分類モデル (以下、分類モデル) を SM として扱う。また、実問題では制約条件を満たす解 (実行可能解) を早期に発見することが重要なため、分類モデルを用いた実行可能解生成のための近傍探索を組み込む。さらに、高精度な二値分類モデルを少ない学習データで構築するために、EA で最適解を探索する以外に学習データの質を向上させるための解を積極的に探索する機構を考案する。これにより、従来と同じ学習データ数であっても高精度な分類モデルを学習可能にする。

3. 研究の方法

本研究では、実問題の多くが含まれる制約付き最適化問題を対象とする。提案手法の汎用性を示すために、進化計算分野のトップカンファレンスである GECCO で開催されるコンペティションで利用される最適化ベンチマークを扱う。また、提案手法の実応用可能性を検証するために、マツダ株式会社が提供する複数車種の同時最適化問題や、日立製作所が提供する風力発電用風車の設計最適化問題などの実問題を扱う。既存の SAEA と比較し、提案 SAEA が少ない評価回数で最適解を獲得可能であることを明らかにする。

提案 SAEA を実現するため、本研究では以下の 3 つのサブテーマを設定して研究に取り組む。

- ・サブテーマ 1: 既知解の組み合わせを学習データとする分類モデルを用いた有望解探索法
- ・サブテーマ 2: 分類モデルを用いる局所探索による実行可能解生成
- ・サブテーマ 3: 分類モデルの識別精度を向上させる学習データの質向上のための解探索法

4. 研究成果

本研究の目的達成に向けて、2021 年度は EA のための新しい二値分類型サロゲートモデルとして、ニューラルネットワークの 1 種である Extreme Learning Machine (ELM) と、文書検索に用いられるランク学習手法である DirectRanker を組み合わせた Extreme Learning Machine-based DirectRanker (ELDR) を考案した。ELDR をサロゲートとして用いる EA を提案し、制約なし最適化ベンチマーク問題と制約付き単目的最適化ベンチマーク問題を用いる計算機実験を実施した。まず、無制約単目的最適化問題では、既存の SAEA の最新手法と比較して提案手法が有意に優れる性能を示すことを明らかにした。特に、設計変数の次元数が多い高次元問題において従来手法を大きく上回る探索性能を有することを示した。次に、制約付き単目的最適化問題では、目的関数だけでなく制約条件も考慮した優劣関係を ELDR を用いて推定し、評価の改善が見込まれる有望解のみを評価する手法を提案した。ELDR を用いない EA と比較する実験の結果、ELDR を援用することで少ない評価回数で制約条件を満たす実行可能解を発見し、かつ目的関数値を改善できることを示した。

2022 年度は 2021 年度に提案した ELDR を、実世界の最適化問題であるハイブリッドロケットエンジン (Hybrid Rocket Engine: HRE) 設計問題に適用した。HRE 設計問題は制約付き単目的最適化問題として定式化され、解の評価にシミュレーションを必要とするため評価コストの高い問題である。これに対し、ELDR による解の優劣推定を導入することで、既存の解よりも劣ると推定される解の評価 (シミュレーション) をせずに棄却する方法を導入することで、評価値の改善が見込める解にのみコストの高い評価シミュレーションを実行でき、高効率化を実現できる。ELDR を制約付き最適化問題の解法の一つである差分進化と組み合わせた手法を用い、ELDR を用いない差分進化と比較する実験の結果、ELDR を用いることで従来よりも少ない評

価回数で良好な HRE 設計を実現できることを示した。このことから、提案手法の実世界の最適化問題に対する適用可能性を示した。

2023 年度は引き続き ELDR を用いた制約付き最適化問題に対する EA を探求した。具体的には、従来のサロゲートモデルでは最適化問題の目的関数と制約条件のそれぞれに対して学習を行う必要があるため、特に制約数の増加に伴いサロゲートの学習コストが増加する問題があった。これに対し、ELDR は目的と制約の数によらず 1 つのモデルを学習するだけで推定が可能であるため、制約数が増加しても一定の学習コストで実行できる利点がある。また、2023 年度には、サロゲートモデルの推定精度が SAEA の探索性能に与える影響を分析することで、SAEA が十分な性能を発揮するために求められるサロゲートの精度と、精度に応じて有効な SAEA の探索戦略が異なることを示した。さらに、SAEA に関する研究を発展させ、EA を用いた最適化の環境負荷を考慮し、サロゲートモデルを使用することで計算時間を削減できるだけでなく、最適化に要するエネルギー消費を削減可能かどうかの初期検討を開始した。

研究期間全体を通じて、(1)二値分類型の新しいサロゲートモデルである ELDR の提案、(2)ELDR を用いた EA の制約あり・なしの最適化問題に対して有効なアルゴリズムの確立と有効性の検証、(3)実社会の最適化問題として HRE 設計を対象とした提案手法の有効性の実証に取り組んだ。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Harada Tomohiro	4. 巻 9
2. 論文標題 A pairwise ranking estimation model for surrogate-assisted evolutionary algorithms	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Complex & Intelligent Systems	6. 最初と最後の頁 6875 ~ 6890
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s40747-023-01113-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Harada Tomohiro, Kino Sohei, Thawonmas Ruck	4. 巻 28
2. 論文標題 Investigating the influence of survival selection and fitness estimation method in genotype-based surrogate-assisted genetic programming	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Artificial Life and Robotics	6. 最初と最後の頁 181 ~ 191
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10015-022-00821-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件（うち招待講演 0件/うち国際学会 6件）

1. 発表者名 Tomohiro Harada, Enrique Alba, Gabriel Luque
2. 発表標題 Energy and Quality of Surrogate-Assisted Search Algorithms: a First Analysis
3. 学会等名 IEEE World Congress on Computational Intelligence (IEEE WCCI 2024) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Yuki Hanawa, Tomohiro Harada, Yukiya Miura
2. 発表標題 Analysis of the Impact of Prediction Accuracy on Search Performance in Surrogate-assisted Evolutionary Algorithms
3. 学会等名 IEEE World Congress on Computational Intelligence (IEEE WCCI 2024) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Hitomi Kano, Tomohiro Harada, Yukiya Miura, Masahiro Kanazaki
2. 発表標題 Hybrid Rocket Engine Design Using Pairwise Ranking Surrogate-assisted Differential Evolution
3. 学会等名 Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation (GECCO '23 Companion) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 狩野 仁深, 原田 智広, 三浦 幸也
2. 発表標題 高コスト制約付き最適化問題に対する制約ランキングサロゲートを用いる適応的差分進化
3. 学会等名 進化計算シンポジウム2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 埴 裕貴, 原田 智広, 三浦 幸也
2. 発表標題 サロゲート型進化計算におけるモデルの推定精度が探索性能に与える影響の分析
3. 学会等名 進化計算シンポジウム2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 狩野 仁深, 原田 智広, 三浦 幸也, 金崎 雅博
2. 発表標題 消炎再着火を考慮したハイブリッドロケット設計に対する優劣推定型サロゲート差分進化の適用
3. 学会等名 日本航空宇宙学会 第54期年会講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hitomi Kano, Tomohiro Harada, Yukiya Miura
2. 発表標題 Differential Evolution Using Surrogate Model Based on Pairwise Ranking Estimation for Constrained Optimization Problems
3. 学会等名 Joint 12th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 23rd International Symposium on Advanced Intelligent Systems (SCIS&ISIS 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 狩野 仁深, 原田 智広, 三浦 幸也, 金崎 雅博
2. 発表標題 優劣推定型サロゲート差分進化を用いたハイブリッドロケット設計
3. 学会等名 第38回ファジィシステムシンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Sohei Kino, Tomohiro Harada, Ruck Thawonmas
2. 発表標題 Investigating the Effect of Survival Selection Policy in Surrogate-assisted Genetic Programming
3. 学会等名 27th International Symposium on Artificial Life and Robotics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Koki Tsujino, Tomohiro Harada, Ruck Thawonmas
2. 発表標題 Adaptation of Search Generations in Extreme Learning Assisted MOEA/D Based on Estimation Accuracy of Surrogate Model
3. 学会等名 IEEE Congress on Evolutionary Computation 2021 (CEC 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 原田 智広
2. 発表標題 解の優劣推定に基づくサロゲート型進化的アルゴリズム
3. 学会等名 進化計算シンポジウム2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 狩野 仁深, 原田 智広, 三浦 幸也
2. 発表標題 制約付き最適化問題に対する解の優劣推定に基づくサロゲートを用いた差分進化
3. 学会等名 第21回進化計算学会研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 辻野 幸希, 原田 智広, ターウォンマツト ラック
2. 発表標題 ELMOEA/Dにおける代替評価モデル構築時の学習データ選択による探索性能への影響分析
3. 学会等名 第49回知能システムシンポジウム
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------