

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 8 日現在

機関番号：12701

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2019

課題番号：18K18123

研究課題名（和文）解の特性から最適化指標を生成するサロゲート進化計算と高計算コストな問題への展開

研究課題名（英文）Self-generation of Optimization criteria on Evolutionary Computation for Computationally-expensive optimization problems

研究代表者

中田 雅也（Nakata, Masaya）

横浜国立大学・大学院工学研究院・准教授

研究者番号：00781072

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、自動抽出した解の変数間依存性や解構造を基に最適化指標を生成し、この指標に基づき最適化を促進する進化計算を構築した。生成する最適化指標を利用すると解評価を必要とせず最適化を実行可能であり、解評価を抜本的に削減可能となる。提案法は、当初想定した単一最適化問題に加え、大規模最適化問題ならびに多目的最適化問題へと拡張し、次の成果を上げた。まず、過去の解評価データから有効な解構造を抽出し、この解構造を保持するように最適化する指標では、特に大規模問題を含む単一最適化問題に有効である。また、多目的最適化問題では、解構造を学習したSVMを最適化指標とした方法が、高計算コストな問題で有用である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

工学設計における最適化問題の多くは、1つの解評価に数時間から数日必要となる高計算コストな最適化問題に属する場合が多い。この場合、可能な限り少ない解評価で良好な解の導出を求めることが重要となる。本研究は、専門的な知識がなくとも利用できる使い勝手が良い進化的最適化法に、解評価を必要とせず最適化を促進する方法論とその実装方法明らかにすることで、高計算コストな問題に特化した効率の良い手法を構築した点に意義がある。加えて、この手法は、実最適化問題で頻出する大規模問題、多目的最適化問題にも対応できることを示した。

研究成果の概要（英文）：This project proposed an evolutionary optimization technique that identifies and then uses useful optimization criteria based on solution structure and solution variable dependency. Generated optimization criteria require no additional evaluations of evaluations, and thus the proposed method can be suitable for computationally expensive optimization problems. While the proposed method was initially designed for a single-objective optimization problem, beyond this goal, this project extended our methodology to large-scale optimization problems and multi-objective optimization problems. Accordingly, this project provides the following contributions. Firstly, optimizing based on an extracted solution structure of good solutions can enhance an optimization performance especially in single-objective problems including large-scale optimization problems. Secondly, an SVM-based optimization criterion which predicts good solutions is suitable for multi-objective optimization problems.

研究分野：ソフトコンピューティング

キーワード：進化計算

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

飛行機の翼形状最適化など、産業で扱う実最適化問題の多くは、高次元かつ解評価に長時間かかる高計算コストな問題になる場合が多い。例えば、1つの翼形状(解)の空気抵抗(解の評価値)を計算するために、流体シミュレーションで数時間から数日かかる場合もある。このような問題領域では、十分な数の解を評価できない状況で、いかに最適化を促進するかが課題となる。

進化計算は、汎用的な最適化技術の一つでありこの産業利用が急速に拡大しているが、高計算コストな最適化問題については未だ技術的改良が求められている。具体的には、進化計算の性能を評価する場合、一般的に数千から数万のオーダーで解評価を行う。しかし、1回あたりの解評価に時間がかかる場合、このオーダーでは爆発的に計算時間が増え、現実的な時間で良好な解を導出することが困難となる。この点を改良したサロゲート進化計算[1]は、真の評価関数の代わりとして、推定した評価関数を代理の最適化指標(サロゲート)として最適化する。この方法では、評価関数の推定に計算時間が必要になるが(多くの場合、数十分程度)、少ない数の解評価で最適化を促進できる。このため、解評価に長時間かかる問題において有力なアプローチとなる。

一般的に、代理の最適化指標は、機械学習によって真の評価関数の近似モデルを生成する。このとき学習データは、真の評価関数から計算した解の評価値を学習データとするため、学習データの数だけ解評価が必要になる。この場合、推定精度が高い評価関数を求めることが重要になるが、そのためには十分な数の学習データが必要となる。つまり、評価関数を推定するために、結局のところ多くの解評価(学習データ)が必要になるというジレンマがある。この結果、特に多くの学習データが必要となる高次元な問題では、最適化性能が大きく低下する問題がある。

2. 研究の目的

本研究では、真の評価関数を用いずに計算できる解の特性を組み合わせ、これを代理の最適化指標とする方法を提案する。具体的には、解の変数間依存性(変数間の相関など)をはじめとする解の特性は、評価が良い解の探索に寄与する指標となり、真の評価関数を用いずに計算できる。提案法では、この点に着目し、解の特性を組み合わせることで、評価関数を推定しなくても、評価が高い解を探索できる最適化指標が生成できる。この結果、多くの解評価(学習データ)を必要とせず最適化を促進するサロゲート進化計算が実現できることが期待できる。本研究では、この高効率なサロゲート進化計算の有効性を実証することを目的とする。

3. 研究の方法

解の変数間依存性(変数間の相関など)をはじめとする解の特性を用いて、代理の最適化指標を生成し、これに基づき最適化を進める高効率なサロゲート進化計算方法を構築する。そして、ベンチマーク最適化問題においてその有効性を検証する。具体的には、以下の手順を進める。

単一最適化問題における基本メカニズムの設計: 解の変数間依存性をはじめとする解の特性を学習し、これを反映した代理の最適化指標を生成可能な方法を構築する。ここでは、「解の評価値を厳密に近似する代理の最適化指標は必要なく、評価が高い解を探索できる最適化指標さえ生成できればよい」という本研究のアイデアを実現するために、従来手法の問題点である「最適化指標の精度と評価回数の増加」のトレードオフを解消する方法を実現する。

多目的最適化問題への拡張: 上記で構築した方法を、目的数が増えることで解法困難となる多目的最適化問題へ拡張する。ここでは、複数の目的関数から単一目的スカラー化関数を複数形成し、この関数ごとに上記のフレームワークを適用することで、多目的最適化問題に拡張可能な方法を考案する。多目的最適化ベンチマーク問題を用いて提案手法を評価する。

構造学習の融合と大規模高次元最適化問題への展開: 優良解の解の特性を自動分析し、優良解の存在領域を効率的に特定する方法を構築する。この方法により、問題次元に対する提案手法のスケラビリティの改善を狙う。大規模最適化ベンチマーク問題を用いて提案手法を評価する。

4. 研究成果

本研究の主な貢献は、評価値の高い優良解が存在する領域を特定する代理の最適化指標を用いることが、従来手法の問題点である「代理の最適化指標の精度と評価回数の増加」のトレードオフを解消する方法として有効であることを実験的に示した点にある。加えて、これらの方法は、単一目的最適化問題だけでなく、1000次元程度の高次元最適化問題領域、複数の目的関数を扱う多目的最適化問題領域にも有効であることを明らかにした。これは、当初想定していた実最適化問題の困難性である1)高計算コストに加え、2)多目的、3)高次元という異なる困難性が混在するより複雑な問題となる。

(1) 解の特性に基づく代理の最適化指標に基づくサロゲート進化計算法の基本メカニズム構築

解の変数間依存性(変数間の相関など)をはじめとする解の特性が形成する代理の最適化指標の性質を考える。このとき、評価値の高い解(優良解)の特性が形成する代理の最適化指標は、解空間において、優良解が存在する部分領域(多様体)を捕捉することに相当すると考えられる。

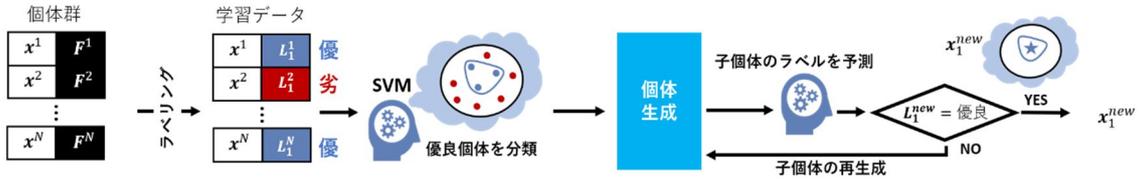


図 1 提案フレームワーク

図 1 に提案手法のフレームワークを示す。本研究では、評価値が低い劣解と優良解の境界領域を推定するために、サポートベクトルマシン(SVM)を用いた。具体的には、通常の進化計算に従って蓄積された評価済み解を学習データとし、評価値の閾値パラメータを用いて、優良解と劣解のラベルを付与する。そして、このラベル付き学習データをもとに、優良解の境界領域を推定する SVM 型のサロゲート進化計算を構築した。図 2 左に示すように、SVM によって獲得される学習モデルは、解空間において紫色で示される優良領域を学習するとともに、黄色で示される劣解の領域を推定する。そして、この学習モデルには、優良解が持つ(評価値の向上に優位な)解の特性を捕捉した高次元特性空間への射影として扱うことができる。したがって、未評価解を SVM に入力し“優良解”と判定される場合は、学習された優位な解の特性を内包していると考えられる。

このことから、提案手法では、生成された解を評価する前に、代理の最適化指標として SVM に入力し“優良解”か“劣解”かの判定を行う。そして、図 2 右に示すように、“優良解”の判定を得た未評価解のみ(図中)を実際に評価することで、推測された優良解の存在領域、すなわち、評価値の向上に優位な解の

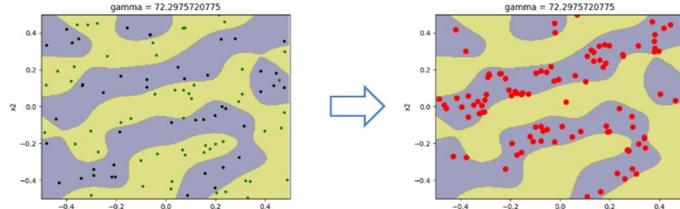


図 2 優良領域の予測と重点的探索

特性を捕捉した解を生成する。したがって、“優良解”の判定が得られるまで、代理の最適化指標をもとに未評価解を最適化する。また、提案手法では、連続最適化問題における進化計算手法の一つである差分進化(Differential Evolution: DE) [2]を用いた。

この方法の利点は、評価関数を近似する学習コストの高い従来のサロゲート手法に対し、領域を推定する学習コストの低いサロゲートを利用している点にある。すなわち、「解の評価値を厳密に近似する代理の最適化指標は必要なく、評価が高い解を探索できる最適化指標さえ生成できればよい」という本研究のアイデアを具体化された位置づけとなる。この結果、近似モデルの精度を高めるために多くの学習データを必要とせず、進化計算が従来通り生成し評価した解データのみを用いて、信頼性の高い代理の最適化指標が構築できる。実際、図 3 単一最適化におけるベンチマーク問題では、複数の問題において提案手法である SVM-DE が DE よりも優れた最適化性能を導出することを明らかにした。

問題次元 (d)		2	10	30	50
Ackley	SVM-DE	0	7.82E-14	0.034917	0.000752
	DE	0	0.000606	1.347572	0.137572
Griewank	SVM-DE	0	0.410896	0.075554	0.000386
	DE	2.22E-16	0.023406	1.03225	0.175383
Rosenbrock	SVM-DE	4.24E-10	6.94892	28.09662	47.80894
	DE	0.002761	7.709566	29.81847	48.05209
Shifted Rotated Rastrigin	SVM-DE	0	36.00561	221.361	403.8503
	DE	0	34.19228	234.0616	421.9209
Shifted Rotated Weierstrass	SVM-DE	2.21E-10	10.41035	42.84639	77.11615
	DE	1.42E-14	7.630562	42.46918	77.00661

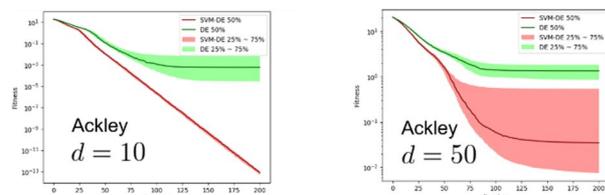


図 3 単一最適化問題における提案手法の性能

(2) 多目的最適化問題への展開

上記(1)の提案手法を、多目的最適化問題(Multi-objective optimization problems: MOP)に拡張した。ここで課題は、複数の目的関数が存在する場合に優良解の数が増えるため、優位な解の特性の補足が困難になることである。MOP の問題領域では、一般的に全ての目的関数を最小化する単一の最適解の存在は見込めず、複数の目的関数間にトレードオフ関係が存在する。したがって、MOP ではトレードオフを高精度に近似するパレート近似解集合の獲得が目的となる。加えて、パレート近似解集合に属するそれぞれの解は、異なる解構造を持つ可能性が高く、補足すべき解の特性は多岐に渡る。結果として、現在の世代でパレート近似解集合に属する解群を単に優良解としてラベリングし学習すると、パレート解の異なる(ヘテロジニアスな)解の特性の学習が困難となり、学習モデルの精度が低下する。これは、単一の目的関数に内在する解の特性を捕捉する単一最適化問題とは、大きく異なる困難性である。

そこで、上記の課題を解決するために、目的関数空間上で、複数のスカラー化関数を用いる MOEA/D(M multiobjective evolutionary algorithm based on decomposition) [3]に着目する。MOEA/D は、複数の目的関数を統合し、単一目的関数に相当するスカラー化関数を定義する。そ

して、目的関数空間を充足するように、このスカラー化関数を複数定義し、それぞれスカラー化関数を最適化するように解探索を行う。このフレームワークに従えば、提案手法を適用できる。

具体的には、図4に示すように、定義されるスカラー化関数ごとに上記(1)のフレームワークを適用する。各スカラー化関数に内在する優良解の解の特性を捕捉するために、各スカラー化関数値を計算し、この値を用いて定めた閾値により、優良解と劣解のラベルを付与する。そして、この学習データを用いて、SVMを構築し優良解と判定されるまで、そのスカラー化関数における

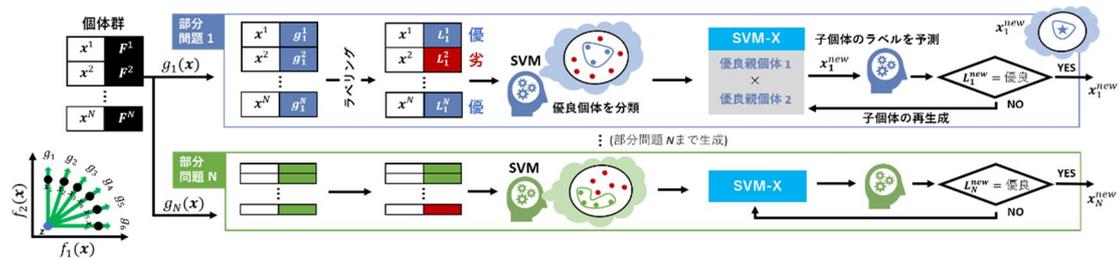


図4 多目的最適化問題における提案手法の拡張フレームワーク

解生成を繰り返す。この手順を他のスカラー化関数にも同様に適用する。この操作によって、SVMが学習する解の特性をそのスカラー化関数に特化させることができる。つまり、パレート解の異なる(ヘテロジニアスな)解の特性の学習を、分割統治法の要領で解決する方針である。また、上記のフレームワークの問題点であった、解生成の繰り返し操作による計算時間の増加を解消するために、提案手法に特化した交叉方法(SVM-X)を導入した。この操作では、優良解と判定された解を親個体として選定し子個体を交叉により生成する。

多目的最適化問題におけるベンチマーク(WFG)では、図4に示すように、提案手法(MOEA/D-S³)従来手法(MOEA/D-DE)と比較して極めて良好な性能を導出することを明らかにした。特に、解評価回数が2500から5000(25世代-50世代, 1世代の解評価回数100回)においても、提案手法は精度の良いパレート近似解を導出することがわかる。

problem	目的数	25世代		50世代		100世代		150世代		300世代	
		MOEA/D-S ³	MOEA/D-DE								
WFG1	4	9.40E+03	9.25E+03	9.51E+03	9.36E+03	9.66E+03	9.51E+03	9.70E+03	9.59E+03	9.83E+03	9.73E+03
	6	9.55E+05	9.42E+05	9.72E+05	9.56E+05	9.86E+05	9.69E+05	9.95E+05	9.75E+05	1.01E+06	9.87E+05
	8	9.73E+07	9.52E+07	9.88E+07	9.72E+07	1.00E+08	9.80E+07	1.01E+08	9.85E+07	1.02E+08	1.00E+08
WFG2	4	1.40E+04	1.39E+04	1.43E+04	1.42E+04	1.44E+04	1.43E+04	1.45E+04	1.44E+04	1.45E+04	1.45E+04
	6	1.63E+06	1.61E+06	1.68E+06	1.66E+06	1.71E+06	1.70E+06	1.73E+06	1.72E+06	1.75E+06	1.74E+06
	8	1.90E+08	1.84E+08	1.97E+08	1.94E+08	2.04E+08	1.99E+08	2.06E+08	2.03E+08	2.10E+08	2.07E+08
WFG3	4	1.21E+04	1.21E+04	1.23E+04	1.23E+04	1.25E+04	1.24E+04	1.25E+04	1.25E+04	1.27E+04	1.27E+04
	6	1.14E+06	1.14E+06	1.17E+06	1.15E+06	1.19E+06	1.17E+06	1.21E+06	1.19E+06	1.23E+06	1.23E+06
	8	1.01E+08	1.00E+08	1.03E+08	1.02E+08	1.06E+08	1.04E+08	1.07E+08	1.06E+08	1.10E+08	1.10E+08
WFG4	4	1.33E+04	1.31E+04	1.36E+04	1.36E+04	1.38E+04	1.38E+04	1.40E+04	1.39E+04	1.42E+04	1.40E+04
	6	1.14E+06	1.15E+06	1.31E+06	1.23E+06	1.42E+06	1.34E+06	1.49E+06	1.40E+06	1.58E+06	1.54E+06
	8	4.97E+07	4.28E+07	6.76E+07	5.61E+07	8.41E+07	6.58E+07	9.80E+07	7.44E+07	1.22E+08	9.54E+07
WFG5	4	1.25E+04	1.24E+04	1.29E+04	1.26E+04	1.33E+04	1.28E+04	1.36E+04	1.31E+04	1.39E+04	1.35E+04
	6	1.34E+06	1.30E+06	1.38E+06	1.35E+06	1.44E+06	1.40E+06	1.48E+06	1.43E+06	1.57E+06	1.47E+06
	8	1.25E+08	1.18E+08	1.33E+08	1.26E+08	1.44E+08	1.35E+08	1.52E+08	1.41E+08	1.62E+08	1.50E+08

図3 多目的最適化問題における提案手法の性能

(3) 構造学習の導入と大規模最適化問題への展開

高次元問題に展開する方法論として、獲得した学習モデル(代理の最適化指標)の構造を進化的ルール学習で自動分析し、その学習モデルの重要構造を転移利用することで、精度の高い学習モデルを効率的に生成する方法を当初計画していた。このために、進化的ルール学習の高次元法則発見問題における性能改善ならびにその理論基盤の構築を進めた。しかしながら、1)現在大規模最適化問題として扱われる1000次元程度のスケールでは未だ十分な性能が導出できないこと、2)進化的ルール学習で想定するボールドウィン効果の不完全性の証明を原因として、進化的ルール学習のフレームワークを簡略した構造学習を用いる方針に変更した。

具体的には、大規模最適化問題を扱うために協調共進化法を用いるとともに、同法に適用可能となるように、推測解を導入しこれに基づき最適化を行う方法を考案した。ここで、協調共進化法とは、協調共進化法で定義される分割された低次元部分問題を扱い、これを最適化する方法である。また、導入した推測解は、低次元部分問題ごとに優良解の解構造モデルであり、探索状況に応じて逐次更新式で解構造を更新する。さらに、推測個体は、各部分問題で定義される解空間において、優良解の存在領域の中心点であることを仮定し、この存在領域周辺に位置するように解を新たに生成することで、上記(1)(2)と同等の効果を、協調共進化法フレームワークで実現することを目的としている。ここで、進化的ルール学習において推測個体は一つの複数のルールに相当し、このルールを逐次的にDelta ruleによって更新するフレームワークを持つ。提案手法では、このフレームワークを簡略化し、部分問題ごとに一つのルールを逐次的に更新する。また、群知能型メタヒューリスティクスであるGWO[4]を協調共進化法に拡張した手法を用いた。

1000次元程度の問題を扱う大規模最適化ベンチマーク(IEEE CEC'2019 LSGO Benchmark

Function)では、図4に示すように、提案手法(CCGWO-AII)は15個中11個の問題において従来手法を超える性能を導出することを明らかにした。特に、F4~F11は解の特性の抽出がより困難となる変数分離不可能な問題であるが、優れた性能を導出している。

Problem	GWO	CCGWO	CCGWO-AII
F1	4.3504E+10	1.0339E+11	8.9455E+10
F2	2.9308E+04	2.7573E+04	2.6041E+04
F3	2.1589E+01	2.0987E+01	2.0982E+01
F4	4.6130E+11	4.4443E+11	2.8449E+11
F5	7.3315E+06	2.5491E+07	2.4798E+07
F6	1.0609E+06	1.0402E+06	1.0405E+06
F7	1.2405E+11	8.5446E+10	1.7078E+10
F8	6.4185E+15	5.6890E+15	2.1493E+15
F9	6.3093E+08	1.9122E+09	1.7093E+09
F10	9.4104E+07	9.2592E+07	9.2390E+07
F11	1.9896E+12	6.9047E+11	4.5859E+11
F12	3.3417E+21	5.4846E+23	4.1080E+20
F13	3.8329E+11	1.2376E+11	6.5888E+10
F14	2.0554E+12	6.9060E+11	4.5672E+11
F15	5.4626E+13	2.3449E+14	3.6064E+13

図4 大規模最適化問題における提案手法(GWO-AII)の性能

<引用文献>

- [1] Y. Jin, Surrogate-assisted evolutionary computation: Recent advances and future challenges, Swarm and Evolutionary Computation, 1(2), pp.61-70, 2011.
- [2] Price, Kenneth V. "Differential evolution." Handbook of Optimization. Springer, Berlin, Heidelberg, 2013. 187-214.
- [3] Zhang, Qingfu, and Hui Li. "MOEA/D: A multiobjective evolutionary algorithm based on decomposition." IEEE Transactions on evolutionary computation 11.6 (2007): 712-731.
- [4] Mirjalili, Seyedali, Seyed Mohammad Mirjalili, and Andrew Lewis. "Grey wolf optimizer." Advances in engineering software 69 (2014): 46-61.

5. 主な発表論文等

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

1. 著者名 Nakata Masaya, Browne Will N.	4. 巻 Early access
2. 論文標題 Learning Optimality Theory for Accuracy-based Learning Classifier Systems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Evolutionary Computation	6. 最初と最後の頁 1~1
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/TEVC.2020.2994314	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 該当する

〔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 栗原 佳祐, 中田 雅也, 濱上 知樹
2. 発表標題 領域予測を用いた局所探索による多目的最適化のための遺伝的アルゴリズム
3. 学会等名 第28回インテリジェント・システム・シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 池原 健矢, 濱上 知樹, 中田 雅也, 佐々木 勇人
2. 発表標題 SVMを用いた優良個体存在領域の予測による差分進化
3. 学会等名 第28回インテリジェント・システム・シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masaya Nakata, Will Browne, Tomoki Hamagami
2. 発表標題 Theoretical adaptation of multiple rule-generation in XCS
3. 学会等名 Genetic and Evolutionary Computation Conference 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中田雅也, Will N. Browne
2. 発表標題 XCSの学習スキームにおけるルールの完全識別条件
3. 学会等名 進化計算シンポジウム2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Keiki Takadama, Daichi Yamazaki, Masaya Nakata and Hiroyuki Sato
2. 発表標題 Complex-Valued-based Learning Classifier System for POMDP Environments
3. 学会等名 IEEE Congress on Evolutionary Computation 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masaya Nakata and Will Browne
2. 発表標題 How XCS Can Prevent Misdistiguishing Rule Accuracy: A Preliminary Study
3. 学会等名 Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Motoki Horiuchi and Masaya Nakata
2. 発表標題 Self-adaptation of XCS learning parameters based on Learning theory
3. 学会等名 Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kei Nishihara and Masaya Nakata
2. 発表標題 Competitive-Adaptive Algorithm-Tuning of Metaheuristics inspired by the Equilibrium Theory: A Case Study
3. 学会等名 IEEE World Congress on Computational Intelligence 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Takumi Sonoda and Masaya Nakata
2. 発表標題 MOEA/D-S ³ : MOEA/D using SVM-based Surrogates adjusted to Subproblems for Many objective optimization
3. 学会等名 IEEE World Congress on Computational Intelligence 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉川太智, 中田雅也
2. 発表標題 大規模最適化問題における変数間依存性を考慮した協調共進化計算
3. 学会等名 情報処理学会第82回全国大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 園田拓海, 中田雅也
2. 発表標題 部分問題ごとにサロゲートを用いたMOEA/Dによる多数目的最適化の精度向上
3. 学会等名 第13回進化計算シンポジウム講演論文集
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 西原慧, 中田雅也
2. 発表標題 競争均衡原理に着想を得たメタヒューリスティクスの適応的アルゴリズム調整
3. 学会等名 第13回進化計算シンポジウム講演論文集
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 堀内素貴, 中田雅也
2. 発表標題 進化的ルール学習における識別精度を調整可能な学習理論
3. 学会等名 第16回進化計算学会研究会講演論文集
4. 発表年 2019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
---------------------------	-----------------------	----