

解更新の成功実績を選定基準とする適応サロゲート進化計算

西原 慧[†] 中田 雅也[†]

横浜国立大学[†]

1 はじめに

航空機翼形状の最適化¹⁾など、実社会の最適化問題では解評価に多くの計算時間を要する場合がある。このような問題は、高コストな最適化問題 (Expensive Optimization Problem: EOP) と呼ばれ、一般に数百から数千の解評価回数が想定される²⁾。サロゲート進化計算 (Surrogate-assisted Evolutionary Algorithm: SAEA) は、EOPに対して有効なアプローチであり、目的関数値を推定する機械学習モデル (サロゲート) を活用することで、少ない解評価回数で最適化を促進できる³⁾。SAEAの探索効率はサロゲートの性能に強く依存するため、この性能改善に取り組む研究が盛んに行われている³⁾。

近年では、サロゲートをオンラインで調整する適応SAEAが主流となりつつある⁴⁾。適応SAEAでは、問題や探索状況に応じて好適な機械学習手法やその設定が異なる点に着目し、これらを適応的に選択することでサロゲートの性能を改善する。例えば、SUMO⁵⁾は7種類の機械学習手法からそれぞれサロゲートを構築し、このうち一つを選択する。また、aRBF-NFO⁶⁾は放射基底関数ネットワーク (Radial Basis Function Network: RBFN) で設定するカーネルごとにサロゲートを生成し選択する。したがって、適応SAEAでは、サロゲートの選定基準を適切に定義することが肝要となる。

他方、SAEAの探索効率を向上させるために、どの観点からサロゲートの性能を改善すべきかは明らかになっていない。つまり、SAEAに適したサロゲートを議論する上で有効な性能指標は定まっていない。現在までに、目的関数値に対する推定誤差や順位相関などが用いられてきた。しかし、高々数百から数千程度の学習データ (評価済

み解) の下では、これらの性能指標は信頼性に欠ける。実際、推定誤差が最小のサロゲートを用いても、SAEAの性能が改善しない場合がある⁷⁾。

しかしながら、第2章で関連研究をまとめる通り、ほとんどの適応SAEAはサロゲートの選定基準に推定誤差や順位相関を用いている。著者らの調査の限り、これ以外の選定基準を採用した適応はない。したがって、SAEAの探索効率の改善に有効な選定基準が設定できれば、適応SAEAの性能はさらに改善する可能性がある。

そこで本稿では、親個体の評価値を下回らず評価値の高い解を実際に発見できたか否か、つまり、解更新の成功実績をサロゲートの選定基準とする適応SAEAを提案する。具体的には、適応候補数だけサロゲートを構築し、差分進化 (Differential Evolution: DE)⁸⁾で生成した未評価の子個体から、それぞれのサロゲートで最良解と予測する解を適応候補数と同数得る。これらを実際の目的関数で評価し、解更新に成功した上で最良評価値を持つ子個体を予測したサロゲートを翌世代で用いる。以降の世代では、選定されたサロゲートのみを用い、解更新に失敗した場合に、翌世代で再びサロゲートの選定を行う。本稿では、性質の異なる適応候補から選定するために、RBFNとKrigingを用いる。

本稿の貢献は以下の通りである。

- 著者らの調査の限り、解更新の成功実績を選定基準とする適応SAEAを初めて導入する。この結果、適応SAEAの性能の飛躍的な改善が可能であることを示す。
- 加えて、サロゲートを評価する有効な性能指標が定まっていない現状に対し、解更新の成功実績が有効な指標となり得ることを示す。

本稿の構成は、以下の通りである。第2章では関連研究として適応SAEAを、第3章ではDEと、RBFNとKrigingを紹介する。第4章で提案手法を説明する。第5章で実験結果を示し、第6章で解

Surrogate-assisted Evolutionary Algorithm using Solution Update Performance as a Selection Criterion

[†] Kei Nishihara (nishihara-kei-jv@ynu.jp)

[†] Masaya Nakata (nakata-masaya-tb@ynu.ac.jp)

Yokohama National University (†)

更新の成功実績を選定基準とする適応の妥当性を、解更新成功率などの観点から定量的に考察する。最後に、第7章で本稿の結論をまとめる。

2 関連研究

本章では、関連研究として適応SAEAを紹介する。関連研究の一覧をTable 1に示す。なお、本稿では制約なし単一目的最適化問題を扱うが、サロゲートの選定基準を数多く例示するために、多目的最適化問題や制約つき最適化問題での例も併せて述べる。

ほとんどの研究が、Table 1で緑色で示すように、推定誤差を指標とする適応を行う。ここに分類される適応SAEAでは、評価済み解からテストデータを抽出し、MAEやMSE、RMSEなどの推定誤差指標でサロゲートの精度を評価する。SUMO⁵⁾は機械学習手法の種類を適応する手法であり、学習済みのRBFNやKriging、ANNなどの7種類の機械学習手法からサロゲートを構築し、テストデータでMSEが最小のサロゲートを選択する。ASMDEとASMP¹⁰⁾はRMSEが小さいサロゲートをエリートとして、それらから予測される評価値の重み付き和サロゲートとエリートサロゲートからRMSEが最小のサロゲートを選択する。機械学習手法の設定を適応する方法としては、RBFN⁹⁾、三浦らの手法¹¹⁾、aRBF-NFO⁶⁾、HESNFO¹²⁾、SACOBRA-MQ-Cubic¹⁴⁾、SACOBRA¹⁵⁾、SAMO-COBRA¹⁷⁾などが存在する。これらはRBFNのカーネルや、カーネルが持つspreadパラメータ、目的関数と制約スコアが急勾配な場合の緩和であるPlog変換の有無をMAEやMSE、RMSEを用いて適応する。

一方で、Table 1で桃色で示すように、テストデータでの評価値と予測値の相関関係を指標として適応を行う研究も少数存在する。ASAGA¹³⁾は、学習済みのRBFNやKriging、SVMなどの6種類の機械学習手法からテストデータでの相関係数が高いサロゲートを選択する。洞口らの手法では、多目的最適化問題を複数の単一目的最適化問題に分割する際に使用するスカラー化関数を4種類用意し、それぞれRBFNでサロゲートを構築する。テストデータでのkendallの順位相関係数が最大のサロゲートを使用する。

以上より、既存の適応SAEAにおけるサロゲートの性能指標は推定誤差か相関関係のみであり、かつ有効な性能指標は明らかになっていない。

3 要素技術

本章では提案手法で解探索に用いるDEと、適応対象となるRBFNとKrigingについて説明する。

3.1 DE

DEは、制約なし実数値連続単一目的最適化問題 $f: \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$ (D は問題の次元数) 向けの解集合ベースの進化計算である。

探索の最初に、DEは解集合 $\mathcal{P} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$ を初期化する。各解 $\mathbf{x}_i = [x_{i,1}, \dots, x_{i,D}]^T$ は範囲を $x_{i,j} \in [x_j^l, x_j^u]$ とした一様分布からサンプリングされる。ここで、 x_j^l と x_j^u はそれぞれ、 j 次元目の定義域の下限と上限である。

各世代において、DEはまず、各解 \mathbf{x}_i について突然変異個体 $\mathbf{v}_i = [v_{i,1}, \dots, v_{i,D}]^T$ を突然変異戦略に従って生成する。ここで、EOPでは少ない解評価回数での最適化が求められるため、局所探索性能を高められる設定として、提案手法は突然変異戦略に $best/1$ を採用する。 $best/1$ は次で示される。

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{x}_{best} + F(\mathbf{x}_{r_1} - \mathbf{x}_{r_2}), \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{x}_{r_1} と \mathbf{x}_{r_2} は互いに、そして \mathbf{x}_i とも異なるように現在の解集合 \mathcal{P} からランダムに選ばれた解である。 \mathbf{x}_{best} は \mathcal{P} のうち最良評価値を持つ解である。 $F \in [0, 1]$ はスケール係数と呼ばれるDEのハイパーパラメータである。

続いて、各解 \mathbf{x}_i について子個体 $\mathbf{u}_i = [u_{i,1}, \dots, u_{i,D}]^T$ を交叉戦略とハイパーパラメータである交叉率 $CR \in [0, 1]$ を用いて生成する。交叉戦略は基本となる *binomial* を使用し、その定義を次に示す。

$$u_{i,j} = \begin{cases} v_{i,j} & \text{if } rand(0, 1) \leq CR \text{ or } j = j_{rand}, \\ x_{i,j} & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (2)$$

ここで、 j_{rand} と $rand(0, 1)$ はそれぞれ、 $[1, D]$ と $(0, 1)$ から選ばれた整数乱数と実数乱数である。

最後に、 \mathbf{u}_i を評価した後に、解更新として、最小化問題では $f(\mathbf{u}_i) \leq f(\mathbf{x}_i)$ であれば \mathbf{x}_i を \mathbf{u}_i で更新する。以降、探索終了条件まで突然変異から解更新までのプロセスを繰り返す。

3.2 放射基底関数ネットワーク (RBFN)

RBFNは、放射基底関数 $\phi(r)$ をカーネル関数として用いたノンパラメトリックな補間法である。本稿では、aRBF-NFO⁶⁾ の定義と実装に従う。

Table 1 適応サロゲート進化計算

手法名	問題クラス	使用する機械学習	適応対象	選定基準
SUMO ⁵⁾	SOP	RBFN, Kriging など	機械学習の種類 (7種類より)	MSEが最小
RBFBS ⁹⁾	SOP	RBFN	spreadパラメータ	LOOCVでRMSEが最小
ASMDE ¹⁰⁾	SOP	RBFN, Kriging など	機械学習の種類 (5種類より)	RMSEが小さいサロゲートと それらの重み付き和からRMSEが最小
ASMPSO				
三浦らの手法 ¹¹⁾	SOP	RBFN	RBFNのカーネル (5種類より)	RMSEが最小
aRBF-NFO ⁶⁾	SOP	RBFN	RBFNのカーネル (5種類より)	RMSEが最小
HESNFO ¹²⁾	SOP	RBFN	RBFNのカーネル (5種類より)	RMSEが最小
ASAGA ¹³⁾	CSOP	RBFN, Kriging など	機械学習の種類 (6種類より)	相関係数が最大
SACOBRA- ¹⁴⁾	CSOP	RBFN	RBFNのカーネル (2種類より), spreadパラメータ	MAEが最小
MQ-Cubic				
SACOBRA ¹⁵⁾	CSOP	RBFN	Plog変換の有無	MAEが最小
洞口らの手法 ¹⁶⁾	MOP	RBFN	スカラー化関数 (4種類より)	ケンドールの順位相関係数が最大
SAMO-COBRA ¹⁷⁾	CMOP	RBFN	RBFのカーネル (6種類より), Plog変換の有無	MSEが最小

問題クラスについて, SOP/MOPはそれぞれ単一目的最適化/多目的最適化を, C- は制約つきであることを示す. MAE (Mean Absolute Error) は平均絶対誤差, MSE (Mean Squared Error) は平均二乗誤差, RMSE (Root MSE) は二乗平均平方根誤差である.

Table 2 RBFNのカーネル

名称	定義	表記
cubic	$\phi(r) = (r + \varepsilon)^3$	ϕ_{CB}
multi-quadric	$\phi(r) = \sqrt{r^2 + \varepsilon^2}$	ϕ_{MQ}
inverse multi-quadric	$\phi(r) = 1/\sqrt{r^2 + \varepsilon^2}$	ϕ_{IMQ}
thin plate spline	$\phi(r) = r^2 \ln(r + \varepsilon)$	ϕ_{TPS}
Gaussian	$\phi(r) = e^{-(r/\varepsilon)^2}$	ϕ_{GA}

\mathcal{X} を重複のない有限の点列 $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n$, \mathbf{f} をそれぞれの関数値ベクトル $\mathbf{f} = [f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2), \dots, f(\mathbf{x}_n)]^\top$ とする. 任意の未知の点 \mathbf{x} について, $f(\mathbf{x})$ の予測値は次のように定義される.

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) + p(\mathbf{x}). \quad (3)$$

ここで, $\lambda_i \in \mathbb{R}$ は重み係数ベクトル $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]^\top$ の i 番目の要素である. $p(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^\top \mathbf{x} + c_0$ ($\mathbf{c} \in \mathbb{R}^D, c_0 \in \mathbb{R}$)は線形多項式による正則化項である. 一般的に用いられ, aRBF-NFOで適応候補となるカーネル関数をTable 2に示す. ε は近似関数の形状の複雑さを制御するspreadパラメータである.

式 (3)の3つのパラメータ $\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{c}, c_0$ は次の式を解くことによって得られ, これらを式 (3)に代入して未知の点 \mathbf{x} の予測値 $\hat{f}(\mathbf{x})$ を得る.

$$\begin{bmatrix} \Phi & P \\ P^\top & 0_{mat} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{c}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}. \quad (4)$$

ここで, Φ は各要素を $\phi_{ij} = \phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|)$ とする $n \times n$ 行列, $P \in \mathbb{R}^{n \times (D+1)}$ は i 行目が $[1 \ \mathbf{x}_i^\top]$ であ

る行列, 0_{mat} は $(D+1)^2$ の零行列, $\mathbf{c}' = [c_0 \ \mathbf{c}^\top]^\top$, $\mathbf{0}$ は全要素が0の $(D+1)$ 次元列ベクトルである.

3.3 Kriging

Krigingは応答曲面法の一手法群であり, サロゲートで使用される際の実装はガウス過程の場合が多い. 本稿ではDACEモデル ¹⁸⁾ を使用する.

前項と同様の \mathcal{X} と \mathbf{f} が与えられた時, Krigingは $\hat{f}(\mathbf{x}) = \mu + \epsilon(\mathbf{x})$ として近似する. μ は大域的定数モデルであり \mathbf{f} の平均に相当する. $\epsilon(\mathbf{x})$ は μ からの偏差であり, $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ として定義される. 任意の2点 \mathbf{x}_i と \mathbf{x}_j の d 次元目の偏差に関する相関は, 次に示すGaussian相関関数で表される.

$$k_{ij,d}(x_{i,d}, x_{j,d}) = \exp(-\theta_d \|\mathbf{x}_{i,d} - \mathbf{x}_{j,d}\|^2). \quad (5)$$

ここで, $\boldsymbol{\theta} = [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_D]^\top$ は相関の強弱を制御するパラメータである. 相関関数行列 K を, $k_{ij}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \prod_{d=1}^n k_{ij,d}(x_{i,d}, x_{j,d})$ を要素とする $n \times n$ 行列とする. $\boldsymbol{\theta}$ は $\theta_d \in [\theta_d^l, \theta_d^u]$ の範囲で探索し, 尤度 L が最大となる時の値を使用する. この時, μ と σ は次式で陽に与えられる.

$$L(\mu, \sigma, \boldsymbol{\theta}) = -\frac{n}{2} \ln(\sigma^2) - \frac{1}{2} \ln(|K|), \quad (6)$$

$$\mu = \frac{\mathbf{1}^\top K^{-1} \mathbf{f}}{\mathbf{1}^\top K^{-1} \mathbf{1}}, \quad \sigma = \frac{(\mathbf{f} - \mathbf{1}\mu)^\top K^{-1} (\mathbf{f} - \mathbf{1}\mu)}{n}. \quad (7)$$

4 提案手法

4.1 概要

提案手法では, サロゲートが推薦した解の解更新の成功実績を選定基準として適応をする. これ

Algorithm 1 提案手法

```

1: Initialize  $\mathcal{P} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$  by LHS and Evaluate
2:  $\mathcal{F} = \{f(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$ ,  $\mathcal{A} = \{(\mathbf{x}_i, f(\mathbf{x}_i))\}_{i=1}^N$ 
3:  $FE = N$ ,  $flag = 0$ 
4: while  $FE < FE_{\max}$  do
5:    $\mathcal{P}, \mathcal{F} \leftarrow$  Get top  $N$  solutions and their fitness in  $\mathcal{A}$ 
6:   for  $i = 1$  to  $N$  do
7:      $\mathbf{v}_i \leftarrow$  mutation with  $\mathcal{P}, F$  — See Eq. (1)
8:      $\mathbf{u}_i \leftarrow$  crossover with  $\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, CR$  — See Eq. (2)
9:   if  $flag == 0$  then
10:     $\mathcal{ID} = \{m\}_{m=1}^M$ ,  $\mathcal{C} = \emptyset$ 
11:    for  $m = 1$  to  $M$  do
12:       $\hat{f}_m \leftarrow$  Build the  $m$ -th model with  $\mathcal{P}, \mathcal{F}$ 
13:       $\mathbf{u}_m^* = \arg \min \hat{f}_m(\mathbf{u}_i)$ 
14:      if  $\mathbf{u}_m^* \notin \mathcal{C}$  then
15:         $f(\mathbf{u}_m^*) \leftarrow$  Evaluate  $\mathbf{u}_m^*$  with true  $f$ 
16:         $\mathcal{C} = \mathcal{C} \cup \{\mathbf{u}_m^*\}$ 
17:        Update  $\mathbf{u}_m^*$ 's parent if  $f(\mathbf{u}_m^*)$  is not inferior
18:         $\mathcal{A} = \mathcal{A} \cup \{(\mathbf{u}_m^*, f(\mathbf{u}_m^*))\}$ 
19:         $FE = FE + 1$ 
20:       $\mathcal{ID} = \mathcal{ID} \setminus \{m \mid \mathbf{u}_m^* \text{ failed in update}\}_{m=1}^M$ 
21:      if  $\mathcal{ID} == \emptyset$  then
22:         $flag = 0$ 
23:      else
24:        if  $|\mathcal{ID}| > 1$  then
25:           $\mathcal{ID} \leftarrow m$  with the best  $f(\mathbf{u}_m^*)$  for  $m \in \mathcal{ID}$ 
26:        if  $|\mathcal{ID}| > 1$  then
27:           $flag \leftarrow m$  with the minimum
28:             $\|f(\mathbf{u}_m^*) - \hat{f}_m(\mathbf{u}_m^*)\|$  for  $m \in \mathcal{ID}$ 
29:        else
30:           $flag \leftarrow m \in \mathcal{ID}$ 
31:      else
32:         $\hat{f} \leftarrow$  Build the  $flag$ -th model with  $\mathcal{P}, \mathcal{F}$ 
33:         $\mathbf{u}^* = \arg \min \hat{f}(\mathbf{u}_i)$ 
34:        Update  $\mathbf{u}^*$ 's parent if  $f(\mathbf{u}^*)$  is not inferior
35:         $\mathcal{A} = \mathcal{A} \cup \{(\mathbf{u}^*, f(\mathbf{u}^*))\}$ 
36:         $FE = FE + 1$ 
37:        if  $\mathbf{u}^*$  failed in update then
38:           $flag = 0$ 

```

により、学習データへの適合度のみでサロゲート選択をする従来手法と比べて、サロゲートの最適化への貢献度を解更新の成否と評価値という直接的な指標で測定できるという設計上の利点を持ち、最適化を促進する適応法の構築が期待できる。この適応方法は、DEのハイパーパラメータを一回の探索中に適応する適応DEから着想を得ている。SHADE¹⁹⁾などの多くの適応DEでは、ハイパーパラメータを変更して解生成を行い、通常数十～数百個から成るすべての解を実際の目的関数で評価する。得られた評価値で解更新の成功を判断し、これを用いて適応の効果を見積もる。適応DEは、数十万回などの評価回数で高い性能を導出する¹⁹⁾。一方で、EOPでは解評価回数が限られているため、提案手法は最大でも十個以下となるサロゲートの適応候補数

だけの解を評価するように設計される。適応した翌世代以降は、選択されたサロゲートが推薦した解が解更新に失敗するまでこのサロゲートを使用し続けることで、解評価回数を節約する。

なお提案手法では、適応候補を機械学習手法の種類と設定のいずれでも、あるいは両方に定められる手法的汎用性を持つ。以下では適応候補の属性にとらわれない一般的な表記を行う。

4.2 アルゴリズム

提案手法のアルゴリズムをAlgorithm 1に示す。最初に、解集合 \mathcal{P} をLatin Hypercube Sampling (LHS)で生成し、解評価を行い評価値集合 $\mathcal{F} = \{f(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$ とアーカイブ $\mathcal{A} = \{(\mathbf{x}_i, f(\mathbf{x}_i))\}_{i=1}^{FE}$ を得る。現在までの解評価回数 FE を N に、1世代目でサロゲート適応を実行するために $flag \in \mathbb{Z}$ は0に設定する。 $flag$ は後述のサロゲート選択世代とサロゲート使用世代を区別するフラグである。

各世代は、アーカイブの上位 N 個体を用いた \mathcal{P} と \mathcal{F} の構成、DEによる解生成、サロゲートの構築、サロゲートによる子個体のスクリーニングと実解評価から成る。サロゲートの適応はサロゲートの構築から実解評価までの間で行われる。具体的には、各世代はサロゲート選択世代($flag = 0$)とサロゲート使用世代($flag \neq 0$)のいずれかとなる。それぞれのメカニズムを述べる。

サロゲート選択世代 ここでは、サロゲートを適応候補数 M だけ構築し、それぞれで子個体 $\{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N$ をスクリーニングする。また、選ばれた解をそれぞれ実際の目的関数で評価し、次世代で用いるサロゲートを決定する。まず、適応候補のID: m をすべて \mathcal{ID} に格納し、 \mathcal{C} を \emptyset で初期化する。続いて、 m 番目のサロゲートを \mathcal{P} と \mathcal{F} で構築し、 $\{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N$ から評価値が最良と見込まれる解 \mathbf{u}_m^* をスクリーニングする。次に、異なる候補サロゲートが同じ解を推薦した際に同一の解を複数回評価することを避けるために、 \mathcal{C} に \mathbf{u}_m^* が存在しなければ \mathbf{u}_m^* を目的関数で評価し、 \mathcal{C} に保存する。ここで、サロゲートが解更新に貢献したかを測るために、解更新の成否($f(\mathbf{u}_m^*)$ が親個体の評価値を下回らないか)を確認しておく。また、 \mathbf{u}_m^* を \mathcal{A} に保存し、 $FE = FE + 1$ とする。

すべての m について解評価まで終わったら、20行目に示すように、解更新に失敗したサロゲートのIDを \mathcal{ID} から消去する。全サロゲートが失敗した場合は、 $flag = 0$ として次世代もサロゲート

選択世代として終了する．以降のサロゲート選択プロセスは、 $|ID| = 1$ となるまで実行される．まず、最も評価値改善に貢献したサロゲートを選択するために、 $f(\mathbf{u}_m^*)$ が最小のサロゲートIDを $flag$ に設定する．スクリーニングで同一の解を推薦した場合など異なる m で $f(\mathbf{u}_m^*)$ が同じになる場合、予測評価値と実際の評価値の予測誤差が最小のサロゲートをIDを $flag$ とする．

サロゲート使用世代 サロゲート選択世代でサロゲートが選択された場合は、解更新に失敗するまではサロゲート使用世代となる（32行目以降）．すなわち、 $flag$ 番目の機械学習手法の種類/設定で \mathcal{P} と \mathcal{F} を用いてサロゲートを構築し、 $\{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N$ から \mathbf{u}^* をスクリーニングして解評価した後、 \mathcal{A} に追加、 $FE = FE + 1$ とする．解更新に失敗した場合は、 $flag = 0$ として次世代はサロゲート選択世代に戻る．

5 実験

本章では、最先端のSAEAとの性能比較を通して、提案手法の有効性を評価する．

5.1 実験設定

ベンチマーク問題として、CEC2013 real-parameter single-objective benchmark function suite ²⁰⁾ を使用する．本ベンチマークセットは、F1-F5の単峰性関数、F6-20の多峰性関数、およびF1-F20から選択した関数を合成した関数F21-F28で構成され、全28問である．提案手法の問題次元数 D に対する性能のスケラビリティを確認するために、 $D \in \{10, 30, 50\}$ として、全84（ $= 28 \times 3$ ）ケースで実験を行う．すべての問題で、解 \mathbf{x} の定義域あるいは境界制約は、規定通りに $[-100, 100]^D$ とする．実験は4.8 GHz CPUと16GB RAMで行う．

提案手法のパラメータは、 $N = 100$, $F = 0.5$, $CR = 0.9$ とする．適応候補はRBFNとKrigingであり、 $\varepsilon = 0$, カーネルは ϕ_{CB} を用い、 $[\theta_d^l, \theta_d^u] = [10^{-5}, 10^2]$, $\theta_{init} = 10^{-2}$ とする．

提案手法の適応候補を鑑みて、比較手法は、RBFNを用いたSAHO ²¹⁾, Krigingの改良手法を用いたIKAEA ²²⁾, 適応SAEAとしてRBFNのカーネルを適応するaRBF-NFO ⁶⁾を採用する．パラメータ設定は原著通りである．SAHOに関しては、 $N = 5D$ ($D < 50$) または $100 + \lfloor D/10 \rfloor$ ($D \geq 50$), $F = 0.9$, $CR = 0.5$, $K = 30$, $neighbor = 5D$ ($D < 50$) または D ($D \geq 50$)

とし、カーネルは ϕ_{CB} を用いる．IKAEAに関しては、 $N_{init} = 100$, $N = 50$, $F = 0.8$, $CR = 0.8$, $\epsilon = 10^{-6}$, $[\theta_d^l, \theta_d^u] = [10^{-5}, 10^2]$, $\theta_{init} = 1$, $\ln L_{min} = -10^8$ である．aRBF-NFOに関しては、 $N = 100$, $c = 1.3$, $CR = 0.1$, $|test| = N/2$, $\varepsilon = 1$, カーネルはTable 2の5つである．

最大解評価回数を1,000回とし、その時点での最良解の評価値を15試行の平均値で議論する．また、有意水準0.05の下でWilcoxonの順位和検定を行う．“+”は比較手法が提案手法に統計的有意差をもって優位、“−”は提案手法が比較手法に統計的有意差をもって優位、“~”は統計的有意差があるとは言えないことを示す．

5.2 実験結果

Table 3に、 $D \in \{10, 30, 50\}$ における解評価回数1,000回時点での最良解の評価値を15試行の平均値で示す．4手法のうち、最良値のセルを緑色で、最悪値のセルを桃色で示している．提案手法（Ours）は、 $D = 10, 30, 50$ の順に14, 18, 15個の問題で最良値を導出し、最悪値はそれぞれ1個の問題のみである．単峰性・多峰性・合成関数といった関数の特徴に対して、提案手法は満遍なく最良値を獲得しており、中でも複雑で最適化が困難な合成関数で顕著に最良値を導出している．検定結果では、提案手法が有意差をもって優位であることを示す“−”は次元数・手法ごとの比較で少なくとも10個、最大で25個となり、提案手法の高い性能が窺える．また、全252回の比較では、 $+/-/\sim = 25/164/63$ となる．Table 3の最下部に示す平均順位でも、いずれの次元数でも提案手法が最高順位となっており、解評価回数1,000回時点の提案手法の有効性が示された．

また、収束速度を確認するために、解評価回数1,000回に加えて500回と750回時点での検定結果をTable 4に示す．まず、解評価回数（FEs）に関して、500, 750, 1,000回と解評価回数が増えても、すべての組合せで $+/-/\sim$ の数が大きく変わらないことから、提案手法は高い収束性能を持ちつつ、解評価回数に関して性能のスケラビリティを持つことが確認できる．同様の傾向が次元数 D に関しても見られる．具体的には、次元数が $D = 10, 30, 50$ と上がっても、 $+/-/\sim$ の数は大きく変わらず D に対するスケラビリティも確認できる．SAHOとの比較においてのみ、 $D = 50$ かつ解評価回数1,000回のみ競合した結果となっているが、“−”の数が“+”の数を上回らず、

Table 3 評価回数1,000回における最良解の性能比較 ($D \in \{10, 30, 50\}$, 15試行の平均値)

a) $D = 10$					b) $D = 30$					c) $D = 50$				
ID	SAHO	IKAEA	aRBF-NFO	Ours	SAHO	IKAEA	aRBF-NFO	Ours		SAHO	IKAEA	aRBF-NFO	Ours	
F1	2.04E-28 +	4.92E-02 -	2.08E+03 -	3.19E-20	1.38E-15 +	3.20E-02 +	1.89E+04 -	1.89E+02		3.10E-06 +	9.96E+00 -	7.27E+04 -	1.71E+00	
F2	1.06E+06 -	8.34E+04 +	1.93E+07 -	5.17E+05	1.16E+07 +	6.77E+07 -	3.81E+08 -	1.76E+07		5.26E+07 ~	1.81E+08 -	1.27E+09 -	6.97E+07	
F3	7.08E+10 -	4.87E+09 -	5.77E+09 -	5.52E+03	3.39E+17 -	1.87E+16 -	1.10E+14 -	3.42E+09		1.17E+16 -	3.79E+15 -	6.43E+15 -	5.92E+10	
F4	2.63E+04 ~	1.59E+04 +	6.27E+04 -	3.78E+04	1.14E+05 +	1.07E+05 +	1.51E+05 ~	1.54E+05		2.21E+05 ~	2.00E+05 +	2.45E+05 ~	2.51E+05	
F5	1.18E-03 -	2.12E+02 -	1.76E+03 -	6.83E-08	1.66E+02 -	3.12E+03 -	2.02E+04 -	3.36E+01		2.35E+03 -	5.62E+03 -	5.46E+04 -	6.02E+02	
F6	9.15E+00 -	2.40E+00 ~	1.34E+02 -	8.15E+00	4.50E+01 ~	2.02E+02 -	1.10E+03 -	4.55E+01		4.76E+01 +	3.20E+02 -	4.19E+03 -	8.17E+01	
F7	3.35E+02 -	1.09E+02 -	1.03E+02 -	2.67E+01	2.82E+05 -	1.37E+05 -	3.24E+03 -	1.63E+02		7.08E+04 -	5.34E+03 -	3.86E+04 -	2.10E+02	
F8	2.08E+01 ~	2.07E+01 ~	2.08E+01 ~	2.07E+01	2.12E+01 ~	2.12E+01 ~	2.12E+01 ~	2.12E+01		2.13E+01 ~	2.13E+01 +	2.13E+01 ~	2.13E+01	
F9	8.11E+00 -	5.68E+00 ~	9.05E+00 -	6.20E+00	3.11E+01 ~	4.36E+01 -	4.35E+01 -	2.93E+01		5.63E+01 ~	7.30E+01 -	7.87E+01 -	6.34E+01	
F10	6.68E-01 -	5.10E-01 -	2.79E+02 -	1.96E-01	1.59E+00 +	9.51E+00 ~	2.67E+03 -	2.98E+01		5.20E+01 +	1.91E+02 ~	8.75E+03 -	2.63E+02	
F11	4.98E+01 -	8.14E+01 -	3.79E+01 -	2.53E+01	2.49E+02 -	2.96E+02 -	4.73E+02 -	1.64E+02		2.73E+02 +	5.52E+02 -	1.18E+03 -	4.13E+02	
F12	3.35E+01 -	8.48E+01 -	8.14E+01 -	2.15E+01	2.17E+02 -	2.97E+02 -	5.47E+02 -	1.83E+02		2.70E+02 +	5.81E+02 -	1.28E+03 -	4.34E+02	
F13	5.95E+01 ~	7.78E+01 -	9.04E+01 -	5.03E+01	3.02E+02 ~	3.00E+02 ~	6.01E+02 -	3.37E+02		6.00E+02 +	5.88E+02 +	1.40E+03 -	7.67E+02	
F14	1.18E+03 ~	8.41E+02 ~	1.03E+03 ~	1.01E+03	6.13E+03 -	6.16E+03 -	8.00E+03 -	4.32E+03		1.41E+04 -	1.24E+04 -	1.54E+04 -	8.62E+03	
F15	1.31E+03 +	1.49E+03 ~	2.05E+03 ~	1.70E+03	6.29E+03 ~	8.75E+03 -	8.78E+03 -	7.25E+03		1.62E+04 -	1.62E+04 -	1.64E+04 -	1.39E+04	
F16	2.16E+00 ~	2.20E+00 ~	2.42E+00 ~	2.44E+00	4.57E+00 ~	4.74E+00 ~	4.27E+00 ~	4.55E+00		5.60E+00 ~	5.45E+00 ~	5.56E+00 ~	5.56E+00	
F17	3.33E+01 ~	8.66E+01 -	7.54E+01 -	3.38E+01	2.79E+02 ~	3.14E+02 -	1.01E+03 -	2.71E+02		6.04E+02 +	6.09E+02 +	3.52E+03 -	7.22E+02	
F18	3.83E+01 ~	8.70E+01 -	1.15E+02 -	5.23E+01	2.95E+02 ~	3.20E+02 ~	1.16E+03 -	3.27E+02		6.16E+02 +	6.37E+02 +	3.79E+03 -	9.42E+02	
F19	2.32E+02 -	3.21E+02 -	1.28E+01 -	2.71E+00	3.33E+05 -	8.89E+03 -	8.20E+03 -	1.26E+01		3.19E+03 -	1.51E+04 -	1.50E+05 -	6.39E+01	
F20	4.58E+00 -	4.11E+00 ~	4.33E+00 -	3.97E+00	1.50E+01 ~	1.50E+01 ~	1.50E+01 ~	1.48E+01		2.50E+01 ~	2.50E+01 ~	2.50E+01 ~	2.48E+01	
F21	3.87E+02 +	6.17E+02 -	5.13E+02 -	4.00E+02	4.37E+03 -	2.22E+03 -	2.65E+03 -	2.73E+02		7.41E+03 -	6.26E+03 -	6.69E+03 -	7.80E+02	
F22	1.67E+03 -	1.08E+03 ~	1.32E+03 ~	1.18E+03	6.09E+03 ~	7.08E+03 -	8.66E+03 -	5.23E+03		1.57E+04 -	1.29E+04 -	1.69E+04 -	1.05E+04	
F23	1.86E+03 ~	1.69E+03 ~	2.23E+03 -	1.85E+03	7.04E+03 ~	8.89E+03 -	9.47E+03 -	7.25E+03		1.67E+04 ~	1.71E+04 -	1.72E+04 -	1.54E+04	
F24	2.16E+02 ~	2.27E+02 -	2.24E+02 -	2.16E+02	2.84E+02 -	2.99E+02 -	3.17E+02 -	2.74E+02		3.34E+02 +	3.77E+02 -	4.17E+02 -	3.59E+02	
F25	2.15E+02 ~	2.28E+02 -	2.25E+02 -	2.19E+02	3.01E+02 -	3.34E+02 -	3.37E+02 -	2.90E+02		3.81E+02 ~	4.41E+02 -	4.55E+02 -	3.78E+02	
F26	2.10E+02 -	2.08E+02 -	2.23E+02 -	2.00E+02	3.52E+02 ~	3.59E+02 ~	3.61E+02 -	3.33E+02		5.15E+02 -	5.13E+02 -	4.96E+02 -	4.34E+02	
F27	5.20E+02 ~	6.03E+02 -	5.92E+02 -	4.97E+02	1.03E+03 ~	1.48E+03 -	1.41E+03 -	1.01E+03		1.74E+03 ~	2.35E+03 ~	2.32E+03 -	1.71E+03	
F28	1.44E+03 -	1.05E+03 -	8.96E+02 -	4.66E+02	7.50E+03 -	5.49E+03 -	4.44E+03 -	1.41E+03		1.24E+04 -	7.70E+03 -	8.83E+03 -	2.54E+03	
+/-/~	3/14/11	2/17/9	0/23/5		4/11/13	2/19/7	0/25/3			9/10/9	5/21/2	0/24/4		
rank	2.46	2.50	3.29	1.64	2.11	2.71	3.29	1.57		2.11	2.36	3.46	1.68	

Table 4 Wilcoxonの順位和検定結果

D	FEs	vs SAHO	vs IKAEA	vs aRBF-NFO
10	500	5/12/11	3/18/ 7	0/22/ 6
	750	2/13/13	3/17/ 8	0/24/ 4
	1,000	3/14/11	2/17/ 9	0/23/ 5
30	500	4/12/12	5/18/ 5	0/22/ 6
	750	4/12/12	3/17/ 8	0/23/ 5
	1,000	4/11/13	2/19/ 7	0/25/ 3
50	500	6/13/ 9	3/18/ 7	0/22/ 6
	750	6/11/11	4/18/ 6	0/23/ 5
	1,000	9/10/ 9	5/21/ 2	0/24/ 4

Table 5 適応候補をaRBF-NFOと揃えてaRBF-NFOと比較した際のWilcoxonの順位和検定結果

FEs	$D = 10$	$D = 30$	$D = 50$
500	0/24/ 4	0/20/ 8	0/20/ 8
750	0/23/ 5	0/23/ 5	0/22/ 6
1,000	0/22/ 6	1/24/ 3	0/22/ 6

提案手法の有効性が損なわれるものではない。

5.3 追加実験

提案手法で、適応候補をaRBF-NFOと同じく5つのカーネルとして、 $\varepsilon = 1$ に設定した実験を、その他の条件は変更せずに行う。この実験の目的は、前項での実験での提案手法とaRBF-NFOの性能差が、適応候補の違いによって生じた可

Table 6 サロゲート選定基準の違いによる比較におけるWilcoxonの順位和検定結果

D	FEs	vs RMSE	vs MAE	vs R2-score	vs Kendall
30	500	3/12/13	3/13/12	3/12/13	0/12/16
	750	2/11/15	2/11/15	2/11/15	0/12/16
	1,000	2/13/13	2/13/13	2/13/13	0/12/16

能性を排除することである。

紙面の都合上、Wilcoxonの順位和検定結果のみをTable 5に示す。Table 4と同様に、すべての次元数、すべての解評価回数で提案手法が20個以上の“-”を導出していることから、提案手法とaRBF-NFOの性能差は、提案手法のサロゲート適応機構による寄与が大きいことが確認できる。なお、Table 4からTable 5で、対応する実験ケースで最大で2個“-”が減っているが、これは提案手法において適応候補数が増えたことにより、サロゲート選択時に消費する解評価回数が増加したことに起因すると考えられる。

6 考察

本章では、提案手法の設計の妥当性を定量的に検証する。提案手法は、サロゲートの性能指標として、推定誤差や相関関係ではなく、適応候補の各サロゲートが推薦した解の解更新の成

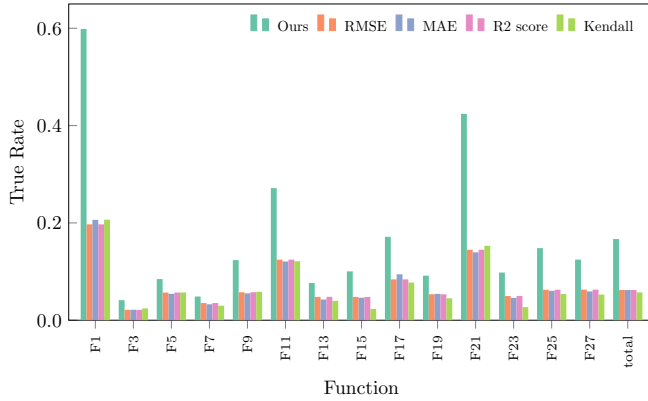


Fig. 1 最良ID予測正解率

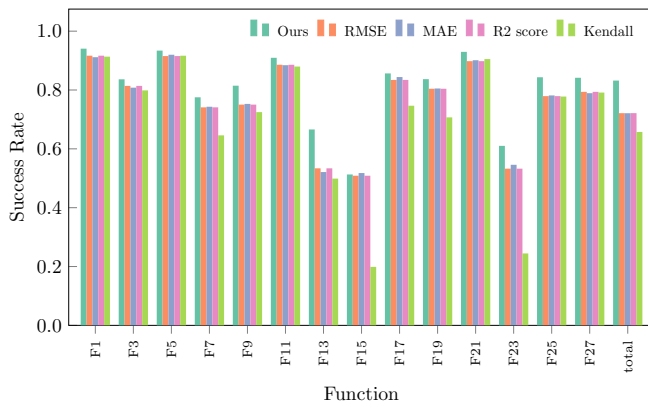


Fig. 2 解更新成功率

功実績でサロゲートを選択する．つまり，評価値をフィードバックして選ばれたサロゲートが，従来手法の推定誤差や相関関係ベースで選ばれたサロゲートと比べてどれだけ最適化へ貢献しているかを，2つの定量的指標を設けて最適化性能と関連づけて議論する．なお，紙面の都合上，本章の図では奇数番目の問題のみを掲載したが，偶数番目の問題でも同様の傾向が得られた．

a) 最良ID予測正解率 提案手法は子個体から実解評価を行う解をスクリーニングする用途でサロゲートを用いる．スクリーニングの目的は，子個体のうち最良評価値を持つ個体を選別することである．したがって，本分析では，実際の目的関数ですべての子個体を解評価して真の最良子個体を特定し，選択されたサロゲートが正しく最良子個体IDを識別できた割合を，次元ごとに各問題で算出する．

b) 解更新成功率 最適化への貢献度合いを測る最も単純な方法は，解更新の成否を調べることである．DEのアルゴリズムでも，親個

体の評価値を子個体の評価値が下回らないことが解更新が有効に働く条件となる．提案手法は，これらを念頭に，選定基準の第一条件やサロゲートを使用し続ける条件に解更新の成功を採用した．そこで，選択されたサロゲートが選別した子個体が解更新に成功した割合を，次元ごとに各問題で算出して分析の指標とする．

比較する性能指標は，推定誤差からは 1) RMSE と 2) MAE，相関関係からは 3) R2 score, 4) ケンドールの順位相関係数を選択する．可能な限り提案手法に近い状況で比較するため，比較手法のアルゴリズムはAlgorithm 1の8行目までは同様とする．以降は， P と F からなるデータを $1 - \delta : \delta$ で学習データとテストデータに分割し，適応候補の数だけ学習データでサロゲートを構築する．次に，テストデータを用いて性能指標が最良のサロゲートを選択し，子個体のスクリーニングに用いる．実験条件は第5章に準じ，提案手法と比較手法は共通してRBFNとKrigingを適応候補とする． $\delta = 0.5$ とする．いずれの手法でも，サロゲート選択が完了した直後の子個体のスクリーニングにおいて，先述の定量的指標で評価する．

$D = 30$ におけるWilcoxonの順位和検定結果をTable 6に示す．提案手法が優位であることを示す“-”がすべての評価回数で11個以上存在し，比較手法が優位であることを示す“+”が高々3個であることから，提案手法の高い性能が確認できる．

次に，提案手法と各選定基準における問題ごとの a) 最良ID予測正解率 と全問題での平均値をFig. 1に示す．図より，最良ID正解率は提案手法が最も高く，特にF1とF21で顕著である．これは，解更新の成功実績で適応をした提案手法が，スクリーニングを正しく行えるサロゲートを選択できていることを示している．

続いて，提案手法と各選定基準における問題ごとの b) 解更新成功率 と全問題での平均値をFig. 2に示す．図では，提案手法が14問題中13問題，また全体の平均値で最も高い値を導出している．つまり，提案手法が選択したサロゲートでスクリーニングされた解は解更新に成功する割合が高く，持続的な評価値向上を達成するサロゲートの選択が行えていることを表している．また，提案手法の，解更新の成功実績を，選定基準の第一条件やサロゲートを使用し続ける条件とすることの妥当性が実証された．

したがって、Table 6, Fig. 1, Fig. 2を総合的に鑑みて、提案手法は a) 最良ID予測正解率と b) 解更新成功率の高い適応を実現したことにより、性能を大きく向上させたと言える。

7 まとめ

本稿では、解更新の成功実績を選択基準とする適応SAEAを提案した。具体的には、適応候補となるサロゲートがスクリーニングにより推薦した解をそれぞれ実関数で評価し、解更新に成功しつつ評価値の高い解を実際に発見できたか否かでサロゲートを選択する。この結果、適応SAEAの性能が向上し、最先端のSAEAよりも顕著に高い性能を導出した。また、性能向上の要因が、従来の推定誤差や相関関係などの性能指標を用いた適応よりも最良解の予測正解率や解更新正解率を高める提案手法の適応方法にあることを特定した。これらより、解更新の成功実績が適応の有効な指標となり得ることを示した。

今後の課題として、さらなる性能向上のために適応候補数を増やすとサロゲート選択時の解評価回数も増えるため、性能向上に寄与しない候補を解評価せずに除外する機構を考案する。

参考文献

- 1) Marian Nemec, David W Zingg, and Thomas H Pulliam. Multipoint and Multi-Objective Aerodynamic Shape Optimization. *AIAA J.*, 42(6):1057–1065, June 2004.
- 2) Songqing Shan and G Gary Wang. Survey of modeling and optimization strategies to solve high-dimensional design problems with computationally-expensive black-box functions. *Struct. Multidiscip. Optim.*, 41(2):219–241, March 2010.
- 3) Hao Tong, Changwu Huang, Leandro L Minku, and Xin Yao. Surrogate models in evolutionary single-objective optimization: A new taxonomy and experimental study. *Inf. Sci.*, 562:414–437, July 2021.
- 4) Jian-Yu Li, Zhi-Hui Zhan, and Jun Zhang. Evolutionary Computation for Expensive Optimization: A Survey. *Mach. Intell. Res.*, 19(1):3–23, February 2022.
- 5) Gorissen, Dhaene, and De Turck. Evolutionary model type selection for global surrogate modeling. *J. Mach. Learn. Res.*, 2009.
- 6) Mingyuan Yu, Jing Liang, Kai Zhao, and Zhou Wu. An aRBF surrogate-assisted neighborhood field optimizer for expensive problems. *Swarm Evol. Comput.*, page 100972, August 2021.
- 7) R V Field. A decision-theoretic method for surrogate model selection. *J. Sound Vib.*, 311(3):1371–1390, April 2008.
- 8) Rainer Storn. Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces. *J. Global Optimiz.*, 11:341–359, 1997.
- 9) Genghui Li, Qingfu Zhang, Jianyong Sun, and Zhonghua Han. Radial Basis Function Assisted Optimization Method with Batch Infill Sampling Criterion for Expensive Optimization. In *IEEE Congr. Evol. Comput. (CEC)*, pages 1664–1671, June 2019.
- 10) Mingyuan Yu, Xia Li, and Jing Liang. A dynamic surrogate-assisted evolutionary algorithm framework for expensive structural optimization. *Struct. Multidiscip. Optim.*, 61(2):711–729, February 2020.
- 11) 三浦岳也, 宮原悠司, and 中田雅也. RBF補間を自動調整する適応型サロゲート粒子群最適化. In **第15回進化計算シンポジウム講演論文集**, pages 210–217, December 2021.
- 12) Mingyuan Yu, Jing Liang, Zhou Wu, and Zhile Yang. A twofold infill criterion-driven heterogeneous ensemble surrogate-assisted evolutionary algorithm for computationally expensive problems. *Knowl. Based. Syst.*, 236:107747, January 2022.
- 13) Liang Shi and Khaled Rasheed. ASAGA: an adaptive surrogate-assisted genetic algorithm. In *Annu. Conf. Genet. Evol. Comput. (GECCO)*, GECCO '08, pages 1049–1056, New York, NY, USA, July 2008. Association for Computing Machinery.
- 14) Samineh Bagheri, Wolfgang Konen, and Thomas Bäck. Online selection of surrogate models for constrained black-box optimization. In *IEEE Symp. Ser. Comput. Intell. (SSCI)*, pages 1–8, December 2016.
- 15) Samineh Bagheri, Wolfgang Konen, Michael Emmerich, and Thomas Bäck. Self-adjusting parameter control for surrogate-assisted constrained optimization under limited budgets. *Appl. Soft Comput.*, 61:377–393, December 2017.
- 16) 洞口裕真 and 中田雅也. 代理モデル多目的進化計算におけるスカラー化関数の適応. In **第21回情報科学技術フォーラム**, number 2, pages 135–142, September 2022.
- 17) Roy de Winter, Bas van Stein, and Thomas Bäck. SAMO-COBRA: A Fast Surrogate Assisted Constrained Multi-objective Optimization Algorithm. In *Evol. Multi-Criterion Optimiz. (EMO)*, pages 270–282. Springer, 2021.
- 18) S N Lophaven, H B Nielsen, and J Søndergaard. DACE: A MATLAB Kriging Toolbox. Technical Report IMM-REP-2002-12, Informatics and Mathematical Modelling, DTU, August 2002.
- 19) Ryoji Tanabe and Alex Fukunaga. Success-history based parameter adaptation for Differential Evolution. In *IEEE Congr. Evol. Comput. (CEC)*, pages 71–78, June 2013.
- 20) J J Liang, B Y Qu, P N Suganthan, and Alfredo G Hernández-Díaz. Problem Definitions and Evaluation Criteria for the CEC 2013 Special Session on Real-Parameter Optimization. Technical report, Comput. Intell. Lab., Zhengzhou Univ., Zhengzhou, China, and Nanyang Tech. Univ., Singapore, 2013.
- 21) Jeng-Shyang Pan, Nengxian Liu, Shu-Chuan Chu, and Taotao Lai. An efficient surrogate-assisted hybrid optimization algorithm for expensive optimization problems. *Inf. Sci.*, 561:304–325, June 2021.
- 22) Dawei Zhan and Huanlai Xing. A Fast Kriging-Assisted Evolutionary Algorithm Based on Incremental Learning. *IEEE Trans. Evol. Comput.*, 25(5):941–955, October 2021.