



横河電機株式会社 マーケティング本部 イノベーションセンター インキュベーション部 O&Mデザイン Gr.

2020年10月30日



# 目的とサマリ

- ■本検討の目的
  - ◆ 有制約最適化\*の方法を調査・開発・検証する。
    - ▶有制約最適化:有制約·混合整数·非凸最適化
- ■本報告のサマリ
  - ◆ 安田君の卒研の方法を実装し、挙動が正しそうであることを確認。
  - ◆ 数値実験を通じて、複雑な条件への対処は有制約最適化における次の課題だと推測される。
    - ▶ 混合整数の問題に拡張し、適用した結果、一応大域的最適解を得ることができたが、ある試行では局所解に陥ることがあった。
    - ▶ さらに、高次元の問題に適用した結果、全ての試行で実行可能解を得ることができなかった。(特に離散制約を満たせない)



# 1. おさらい 非凸・混合整数・有制約への拡張

- ■拡張対象①②では、混合整数or有制約への対処を 検討する必要がある。
  - ◆元々の課題と拡張する際の課題を認識し、それらを同時に 解決することを目指したい

#	①非凸・連続・有制約	②非凸・混合整数・無制約
方法	大域的最適化に制約対処法を追加	凸緩和を導入した分枝限定法
元々の課題	制約関数の多さや非凸性への対処	計算量の多さ
拡張する際の課題	混合整数をどのように扱うか? ⇒要調査だがありそう	制約条件をどのように扱うか? ⇒要調査だがなさそう

着目するが、研究課題は多い

比較対象



# ①の技術構成案

- ■非凸・混合整数・有制約のための最適化技術
  - ◆メタヒューリスティクスを中心とする大域的最適化手法と、 制約対処法を融合

#### 大域的最適化手法



#### 制約対処法

・メタヒューリスティクス 候補 (Natured Inspired) ・力学モデル

右との親和性高く、優秀なアルゴリズムを選択・開発

근ᄼᆂ

・数理最適化向け

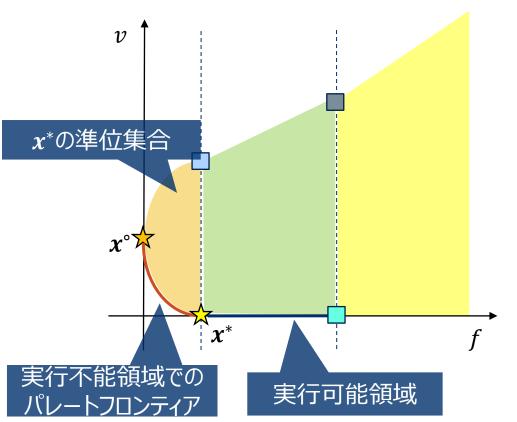
・メタヒューリスティクス向け

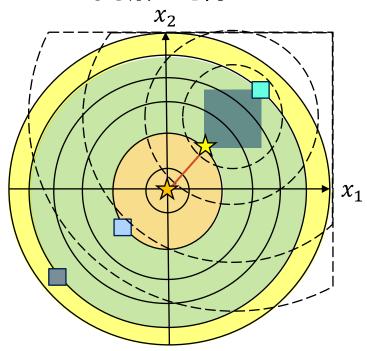
左との親和性が高く、 優秀な方法を開発



# f - v空間と設計変数空間の対応関係

- 制約違反量を「実行可能領域からの遠さ」と捉えると、実行不能領域で 目的関数とトレードオフとなる領域(パレートフロンティア)が現れる。
  - lacktriangle ただし、最終的にはパレートフロンティア上のv=0となる解 $x^*$ を得たい





実線: $f = x^{T}x$ の等高線

破線:νの等高線

f - v**空間** 

設計変数空間

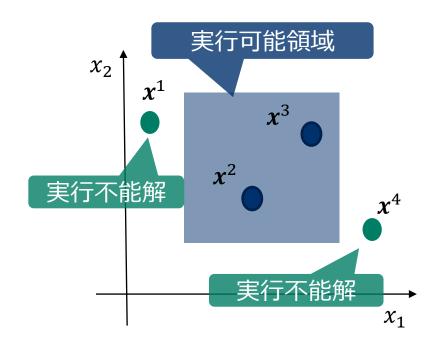
YOKOGAWA <sup>\*</sup>



Co-innovating tomorrow

### メタヒューリスティクスのための制約対処法

- 多点探索では、探索過程で獲得した実行可能解と実行 不能解をバランス良く活用することが重要だと考えられる。
- ◆ 実行可能解だけを積極的に活用すると、実行可能領域に探索点 群が過度に集中化し、大域的最適解の獲得が困難となる



### 実行不能解の活用度によって4種類に大別される

- 主に解の評価で工夫することが多い。
- 近傍生成の工夫は有効性が高くないが、解の評価の都合 上、有効な場面がある。
  - ◆ シミュレーションで評価する場合、シミュレータ側の都合により、入力時点でその制約を満たす必要がある、などでは有効
    - ▶リサンプリング法は制約を満たす解が生成されるまで近傍生成を繰り返す
    - ➤解の修復はその制約を満たすように無理やり修正する

不能解の活用度対処方法		変更する部分
①なし	リサンプリング法、解の修復	近傍生成
②低(非明示的)	問題変換法	解の評価(適合度の計算式)
③中(非明示的)	目的関数と制約違反量の分離	解の評価(適合度の計算式)
④高(明示的)	多目的最適化	解の評価(適合度の計算式)



# 解の評価を工夫する制約対処法

- ■解の選択基準を、探索点群の目的関数値や制約違反量に応じた適合度に置き換える。
  - ◆ メタの特徴(解直接探索法・多点探索)を大いに活用している
  - ◆ 適合度を工夫することで実行可能領域への圧力を生じている

不能解の活用度	例	適合度の比較式
なし	通常	$f_1 \le f_2$
②低(非明示的)	Adaptive Penalty Method	$f_1 + \sum_{j=1}^{J} r_j v_{1,j} \le f_2 + \sum_{j=1}^{J} r_j v_{2,j}$
③中(非明示的)	ε制約法	$f_1 \le f_2, \phi_1 \le \phi_2$
	Multiple Constrained Ranking	$R_{f,1} \le R_{f,2}, R_{v,1} \le R_{v,2}$
④高(明示的)	二段階解法 (優越関係)	$(f_1, V_1) \le (f_2, V_2)$



# 2. 制約対処法の分類と課題 **既存の制約対処法**

# 先行研究の制約対処法によって適用可能だが、非効率となることがある

項目	問題変換法 (APM)	適合度の切替 (ε制約法)	ランキング (MCR)	優越関係 (二段階解法)
制約違反 減少優先	多少ある	かなりある(実行可能領域への圧力が強すぎ?)	かなりある(実行可能領域への圧力が強すぎ?)	かなりある(実行可能領域への圧力が強すぎ?)
パラメータ 設定	不要	εスケジューリングのパラ メータ (推奨値はある)	不要	多目的最適化のパラメータ (推奨値はある)
制約関数 間のスケー ル差	弱い	弱い	依存しない	そこまで影響しない
トレードオ フの領域で の挙動	弱い?	探索が停滞	制約違反量が少ない 方にバイアスをかける	パレートフロンティアに接 近できる

欠点

良い点

どちらでもない

相対的に性能が良かった



### 卒研の方法

- 卒研では、ランキングベースの優越関係を利用した制約対処法を開発
  - 相補的課題を解決(スケール差の影響緩和とトレードオフ領域における探索)

#### 適合度の定義

二つのランキング適合度の二目的最適化とする

評価値ランキング適合度  $F_i$ 



目的関数値ランク  $F_i$ 

制約違反ランキング適合度 
$$V_i = N_i + \sum_{h=1}^H v_i^h$$



制約違反量ランク  $v_i^h$ 

制約違反数ランク  $N_i$ 

rank:優越関係

$$(F_1, V_1) \le (F_2, V_2)$$

### 全て実行不能解

同一rankの中で、制約違反ランクViの順に割当

#### sub-rank

#### 実行可能解がある

同一rankの中で、理想点zまでの距離が小さい順に割当

理想点:  $\mathbf{z} = \operatorname{argmin}\{F(\mathbf{x}) | \mathbf{x} \in \mathbf{Z}\}$ 

理想点集合:  $\mathbf{Z} = X^{\text{fea}} \cup \{x_{vmin}\}$ 

実行可能解集合:  $X^{fea} = \{x \in X \cap S\}$ 

 $x_{vmin} = \operatorname{argmin}\{V(x)|x \in X^{\operatorname{rank}}\}$ 

Co-innovating tomo

rank ument Number | July. 6, 2020 | → okogawa Electric Corporation V For Internal Use Only

YOKOGAWA 🔸

### 既存と卒研の比較実験:実験条件



- ◆ 交叉: SBX(交叉率0.8)
  - > 交叉の元をバイナリートーナメントで選択
- ◆ 突然変異: Polynomial Mutation (変異率1/N)
- ◆ 選択・淘汰:全ての上位解をそのまま次世代の探索点として残る
  - ▶ 探索点群の上位10%をエリート解として必ず次世代に保持
- ■共通条件
  - ◆ 2<sup>N</sup>minima関数(上下限制約)に対して適用する
  - ◆ 探索点数40、反復回数500、試行数50(1試行で15分)
- 評価指標
  - lacktriangle g-best  $m{p}^g(k_{\max})$ の目的関数値の試行平均:MF
  - lacktriangle g-best  $m{p}^g(k_{\max})$ の制約違反量の試行平均:MV

探索点群に含まれる 実行可能解集合

実は、太字部分は卒研とは少し異なる。

$$\mathcal{F}(k) \subseteq \mathcal{X}(k)$$

$$\boldsymbol{p}^{g}(k) = \begin{cases} \operatorname{argmin} \left\{ f\left(\boldsymbol{x}^{i}(\kappa)\right) | \boldsymbol{x}^{i}(\kappa) \in \mathcal{F}(\kappa); \kappa = 1, \cdots, k \right\}, \exists |\mathcal{F}(\kappa)| > 0 \\ \operatorname{argmin} \left\{ v\left(\boldsymbol{x}^{i}(\kappa)\right) | \boldsymbol{x}^{i}(\kappa) \in \mathcal{X}(\kappa); \kappa = 1, \cdots, k \right\}, \text{ otherwise} \end{cases}$$

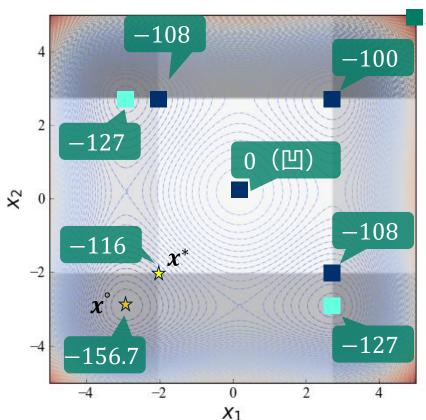


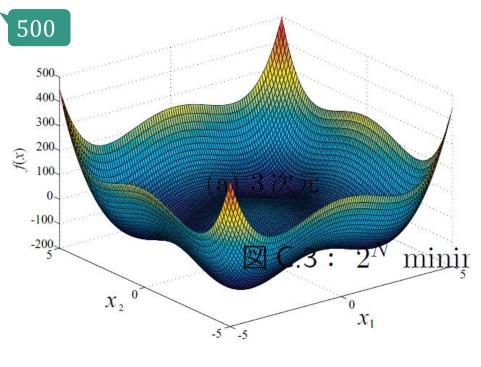
# ベンチマーク関数



- minimize  $f(x) = \sum_{n=1}^{2} x_n^4 16x_n^2 + 5x_n$  (2次元)
- ♦ subj.to  $-2 \le x_n \le 2.7, n = 1,2$
- ◆ 最適解 $x^* = (-2,2)^T$ ,  $f(x^*) = -116$

多峰性かつ最適解が実行 可能領域の端にある





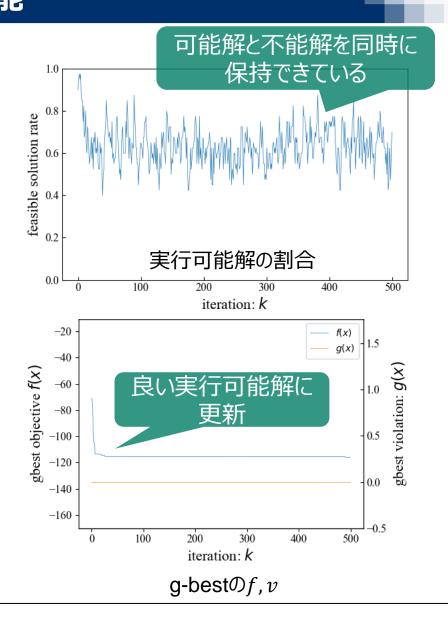


# 2. 制約対処法の分類と課題 既存と卒研の比較実験:探索性能

# ■ほぼ妥当な結果が得られた。

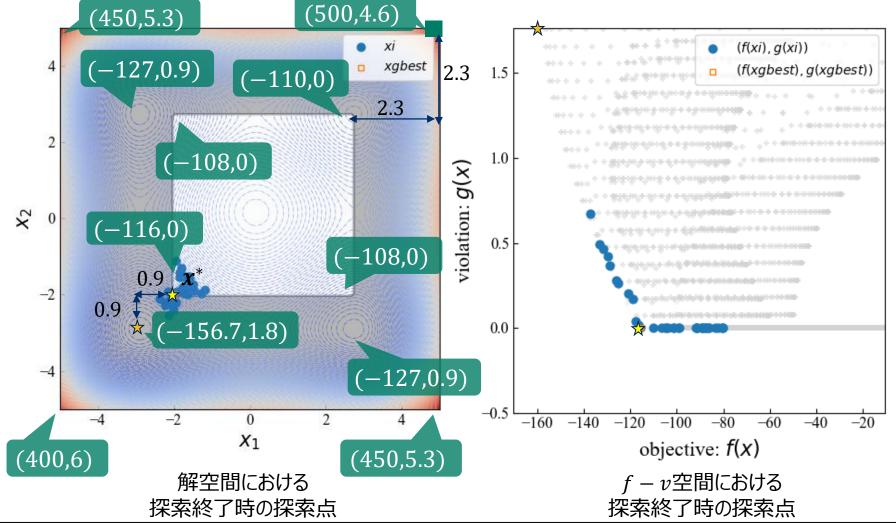
手法	MF	MV
APM	-105.6	0.00
arepsilonCM	-105.8	0.00
MCR	-105.1	0.00
TPF	-110.4	0.00
安田君の結果	-113.8	0.00
熊谷の結果※	-111.9	0.00
最適値	-116	0

乱数シードが異なるので、完全一致する わけではないが、妥当だと思われる



# 目的関数値と制約違反量の対応関係

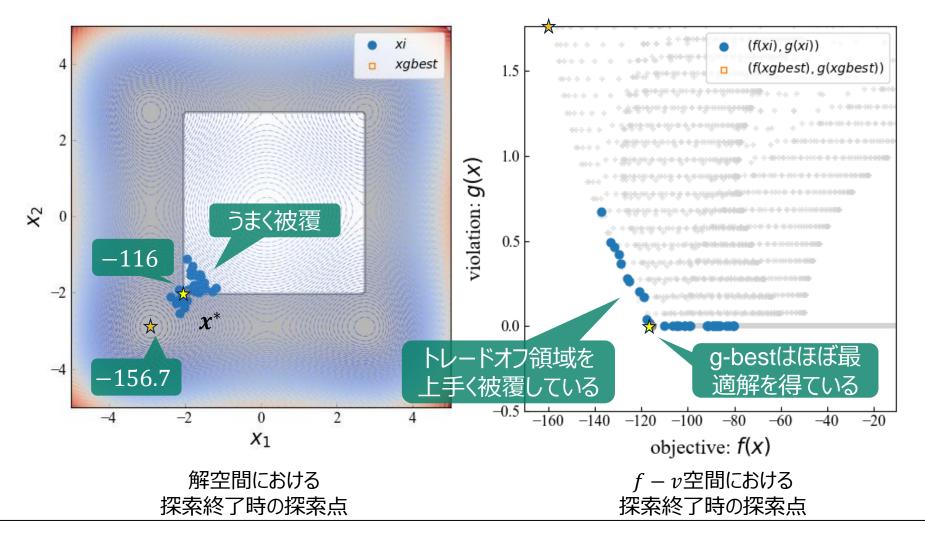






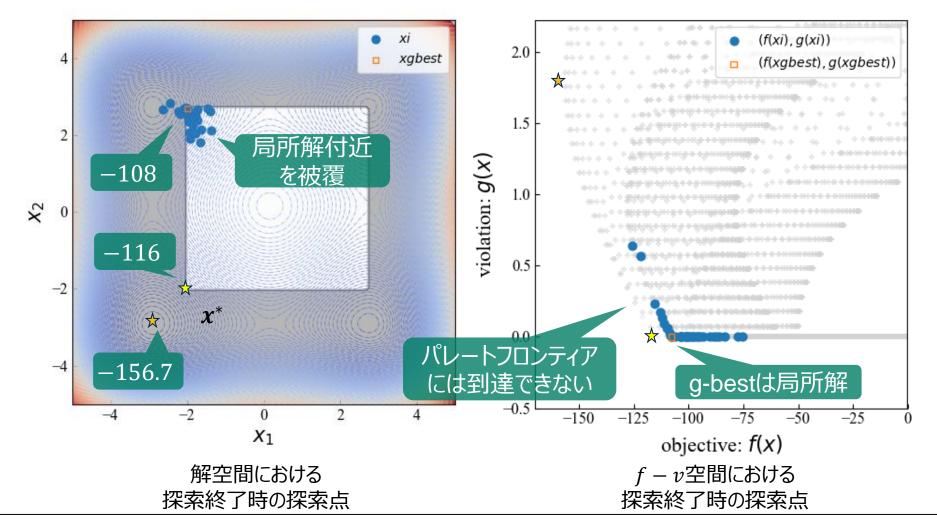
# 既存と卒研の比較実験:探索点群の様子

■ 探索点群がトレードオフ領域に広く配置されている。



# 既存と卒研の比較実験:探索点群の様子(別の試行)

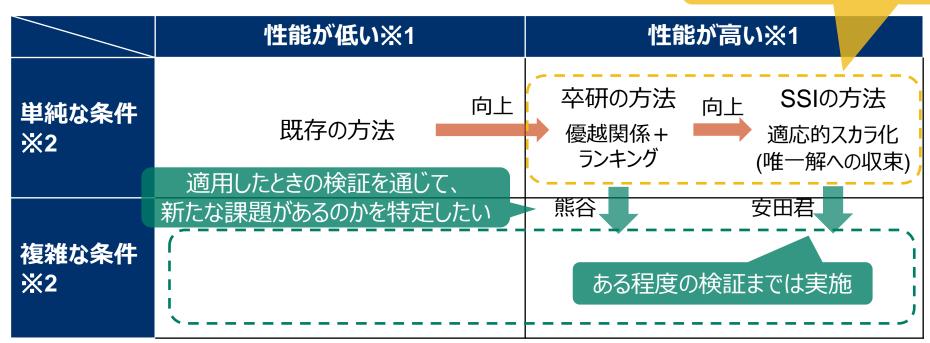
■局所解付近でどう頑張っても、最適解には到達できない。



# 2. 制約対処法の分類と課題 制約対処法の検証に関する現状

# 複雑な条件における有効性は未検証。

多目的アプローチによる 不能解の明示的活用



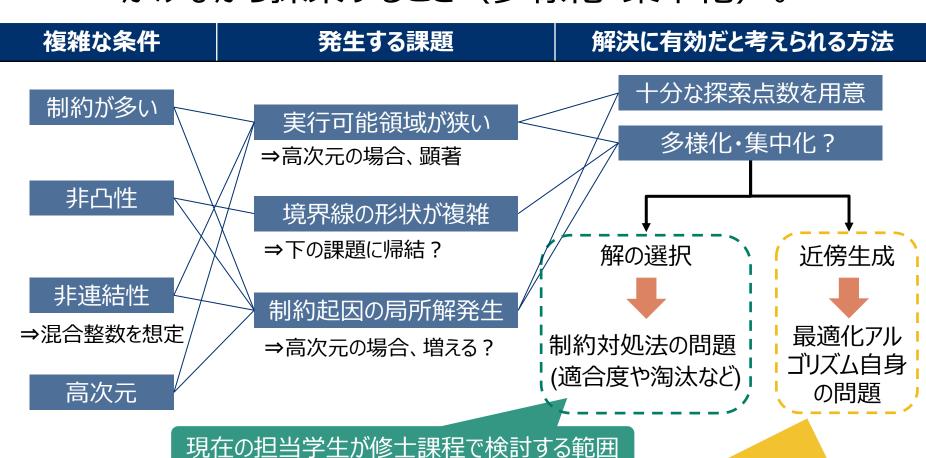
※1:性能 = 悪い局所解に陥らずに、実行可能な大域的最適解・準最適解を探索する性能

※2:複雑な条件=制約が多い、非凸性、非連結性、高次元を想定



# 2. 制約対処法の分類と課題 制約対処法の課題 (仮説)

複雑な条件においても、実行可能領域へ適切な圧力をかけながら探索すること(多様化・集中化)。



基本的に既存の方法で優れたものを選ぶが、制約対処法との親和性調査は、現在の担当学生は検討しないかも

# 3. 混合整数への拡張 熊谷が着目している課題

# 非連結性に着目

⇒結局、可能領域の狭さと局所解の課題に帰結するかも

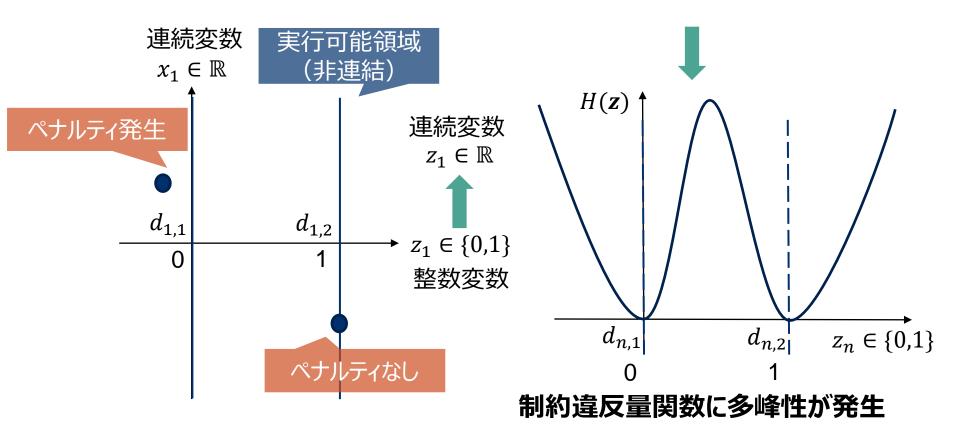
解決に有効だと考えられる方法 複雑な条件 発生する課題 十分な探索点数を用意 制約が多い 実行可能領域が狭い 多様化·集中化? ⇒高次元の場合、顕著 非凸性 境界線の形状が複雑 ⇒下の課題に帰結? 解の選択 近傍牛成 非連結性 制約起因の局所解発生 ⇒混合整数を想定 最適化アル 制約対処法の問題 ⇒高次元の場合、増える? ゴリズム自身 (適合度や淘汰など) 高次元 の問題 混合整数拡張に直結



### 前話してた案:0-1整数制約違反量の定義

# 0-1整数に対する制約違反量関数を定義する

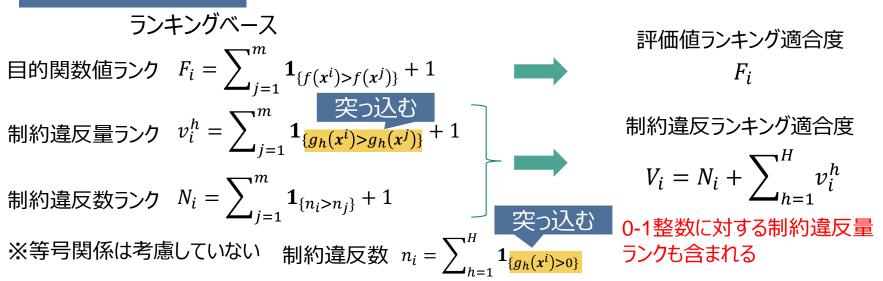
$$H(\mathbf{z}) = \sum_{n=1}^{N_{\mathbb{Z}}} \frac{1}{2} \left[ \sin \frac{2\pi \{z_n - 0.25(d_{n,2} + 3d_{n,1})\}}{d_{n,1} - d_{n,2}} + 1 \right], \mathbf{z} \in \mathbb{R}^{N_{\mathbb{Z}}}$$



### 前話してた案:適合度の定義

- ランキング適合度内の制約関数に追加すれば、同様の枠組みで扱える
  - ◆ 解の選択方法や制約違反の適合度の定義には自由度があるが、最初はそのまま

#### 適合度の定義



これは非連結性を解決するものではなく、適用のために拡張しただけ。これをまず試すことで、非連結性の影響を解析したい。



# 今回やった案:整数等式制約の緩和

# 2つの整数等式制約を不等式に緩和

$$h(z_n) = \begin{cases} z_n - d_{n,1}, z_n \le (d_{n,1} + d_{n,2})/2 \\ z_n - d_{n,2}, z_n > (d_{n,1} + d_{n,2})/2 \end{cases}$$

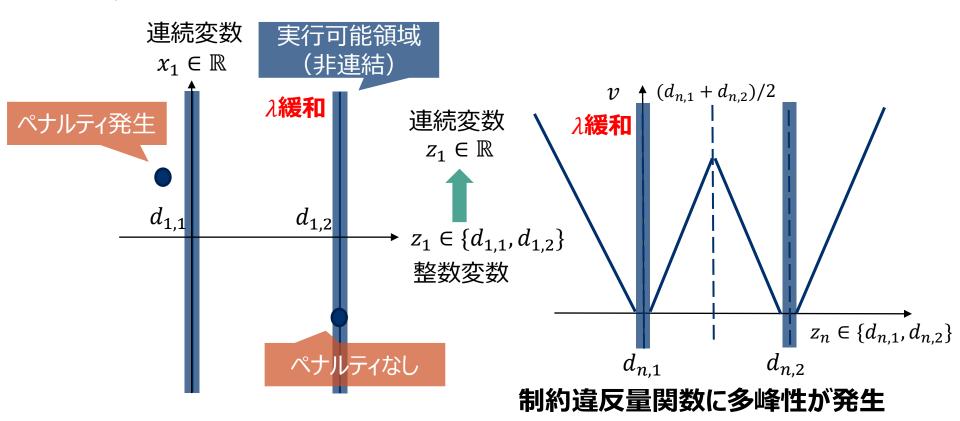
等式制約

**λ緩和** 

 $h(z_n) = 0$ 

不等式制約

 $g(z_n) = h(z_n) - \frac{\lambda}{\lambda} \le 0, \lambda > 0$  $v = \max\{|g(z_n)|, 0\}$ 



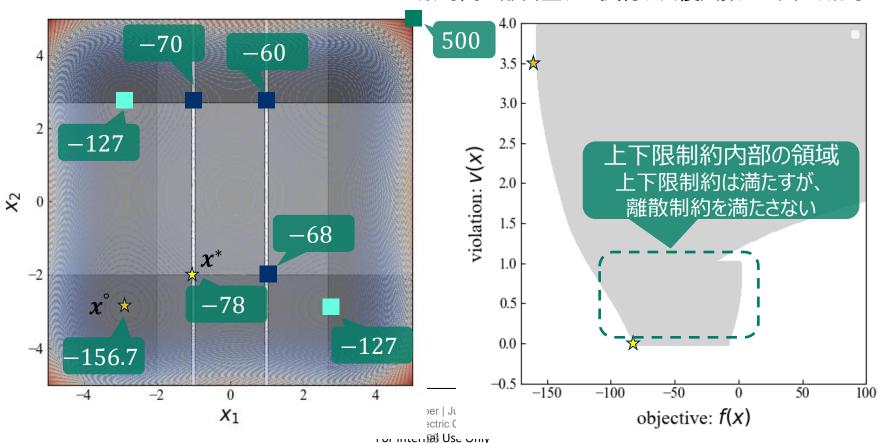
# 3. 混合整数への拡張ベンチマーク関数

 $\mathbf{C}$ 

# ■ 2<sup>N</sup> minima関数に上下限制約・離散制約を課した問題

- minimize  $f(x) = \sum_{n=1}^{2} x_n^4 16x_n^2 + 5x_n$  (2次元)
- subj.to  $-2 \le x_n \le 2.7, n = 1,2; x_1 \in \{-1,1\}$   $\lambda = 0.05$
- ◆ 最適解 $x^* = (-1, -2)^T$ ,  $f(x^*) = -78$  ※赤字は、先ほどと違う条件

※時間の都合上、10試行、反復回数300回に減らした



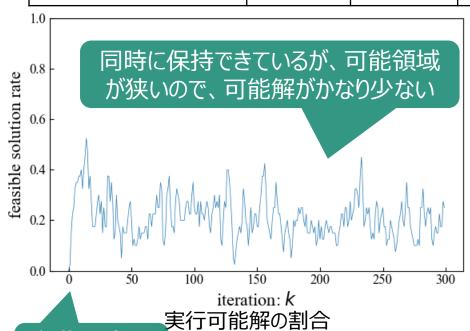
### 実験結果:探索性能

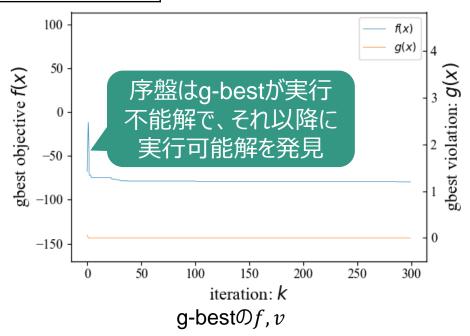
■ 離散制約の影響は強いが、最適解自体は得られた。

手法	MF	MV	Feasible Rate
熊谷の結果	-79.0	0.00%	100%
緩和有り最適値	-79.67	0.05	_
緩和無し最適値	-78	0	_

# どの試行も実行可能解を発見することはできた

※緩和した状態なので、真の違反量は導出していない





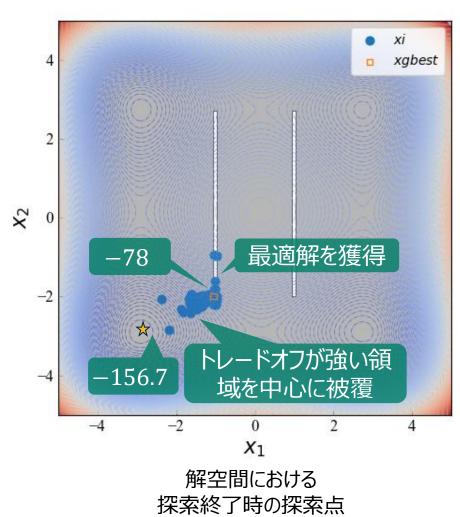
初期は全て 実行不能解 Sammovating tomorrow™

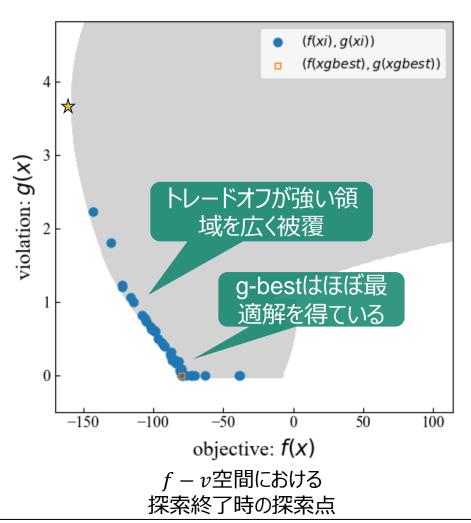
| Document Number | July. 6, 2020 | © Yokogawa Electric Corporation For Internal Use Only



# 実験結果:探索点群の様子



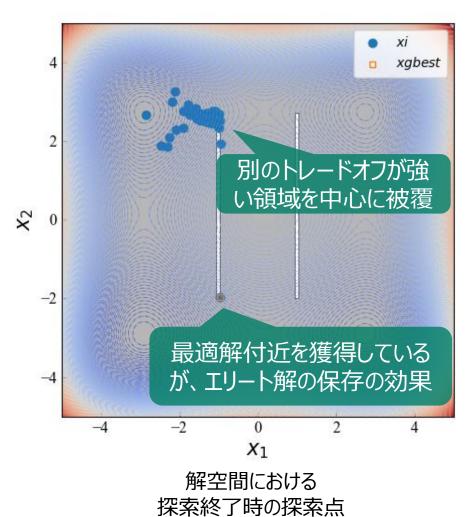


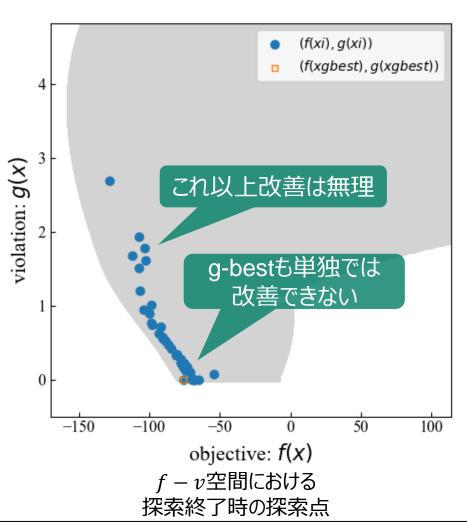




# 実験結果:探索点群の様子(別試行)









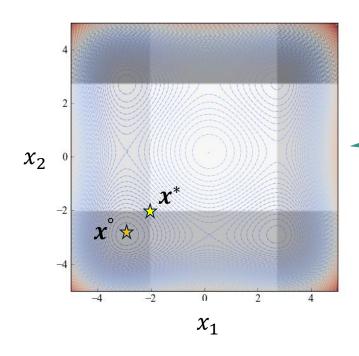
#### 4. 高次元への拡張

### ベンチマーク関数(10次元)



- lacktriangle minimize  $f(x) = \sum_{n=1}^{10} x_n^4 16x_n^2 + 5x_n$  (10次元) ※赤字は、先ほどと違う条件
- ♦ subj.to  $-2 \le x_n \le 2.7, n = 1, \dots, 10$
- ◆ 最適解 $x^* = (-2, -2, -2, -2, -2, -2, -2, -2, -2, -2)^T$ ,  $f(x^*) = -580$

#### 各変数同士の平面



上下限制約のみ (可能領域が広め)



#### 4. 高次元への拡張

# 実験結果:探索性能

どの試行も実行可能解を得られるが、大域的最適解を得ることはできない。

項目		最適値				
<b>坝</b> 口	平均值	標準偏差	最悪値	最良値	<b>自</b> 及见9门 <b>也</b>	
目的関数値	-451.7	9.97	-433.9	-467.0	-580	
違反量総和※	0	0	0	0	0	
Feasible Rate						

<sup>※10</sup>変数×2=20個の上下限制約を逸脱した量の総和。

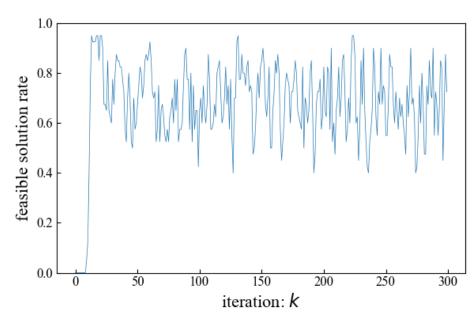


# 実験結果:探索の様子

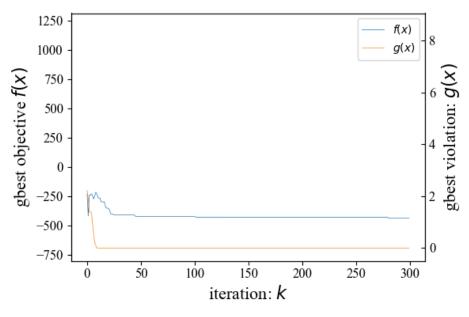
# 探索初期は全て実行不能解だが、

# 可能解獲得以降は可能解と不能解のバランスを維持。

優越関係の効果を確認



実行可能解の割合の推移



g-bestのf, vの推移

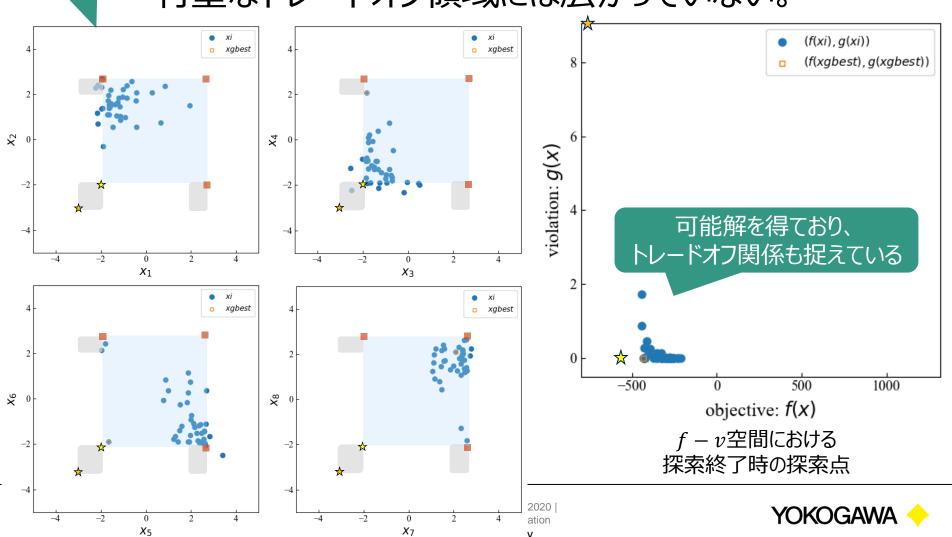
#### 4. 高次元への拡張

# 実験結果:解の様子

g-bestは局所解付近

局所解付近にいるみたいだが、

有望なトレードオフ領域には広がっていない。



#### 5. 混合整数かつ高次元への拡張

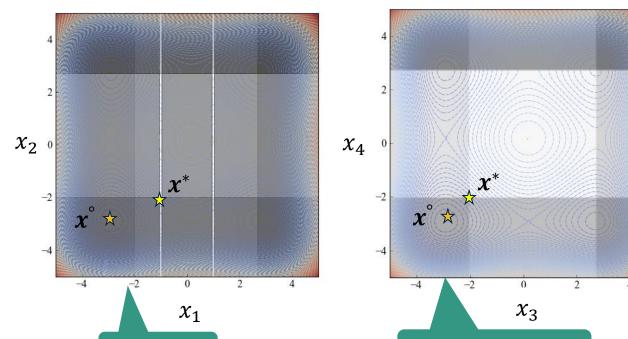
# ベンチマーク関数(10次元)



- lacktriangle minimize  $f(x) = \sum_{n=1}^{10} x_n^4 16x_n^2 + 5x_n$  (10次元) ※赤字は、先ほどと違う条件
- ♦ subj.to  $-2 \le x_n \le 2.7$ ,  $n = 1, \dots, 10$ ;  $x_n \in \{-1,1\}$ , n = 1 λ = 0.05
- ◆ 最適解 $x^* = (-1, -2, -2, -2, -2, -2, -2, -2, -2)^T$ ,  $f(x^*) = -542$

離散・連続同士の平面

連続変数同士の平面



非連結

上下限制約のみ

#### 5. 混合整数かつ高次元への拡張

# 実験結果:探索性能

どの試行も実行可能解を得られるが、大域的最適解を得ることはできない。

百日		探索	<b>最適値※</b> 2				
項目	平均值	標準偏差	最悪値	最良値	緩和有	緩和無	
目的関数値	-418.4	21.0	-389.4	-462.9	-543.67	-542	
違反量総和	0.00	0.00	0.00	0.00	0 (0.05)	0 (0)	
上下限違反量	0.00	0.00	0.00	0.00	0 (0)	0 (0)	
離散違反量※1	0.00	0.00	0.00 0.00		0.00 0.00 0	0 (0.05)	0 (0)
Feasible Rate		100					

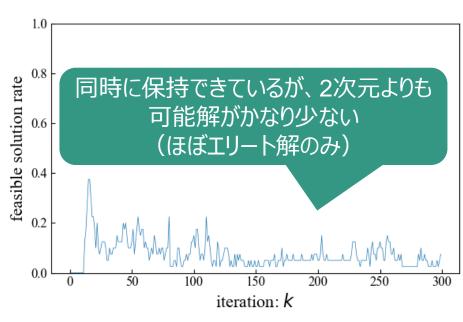
※1:緩和した状態で得た違反量なので、真の違反量は導出していない。

※2:()は真の違反量。 $\lambda \times 1$ 変数 =  $0.05 \times 1 = 0.05$ 。

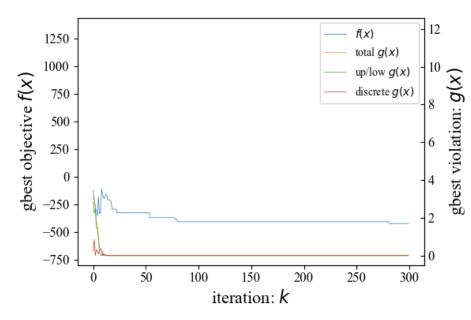


# 探索初期は全て実行不能解だが、少量の可能解を保持している。

#### 優越関係の効果を確認



実行可能解の割合の推移

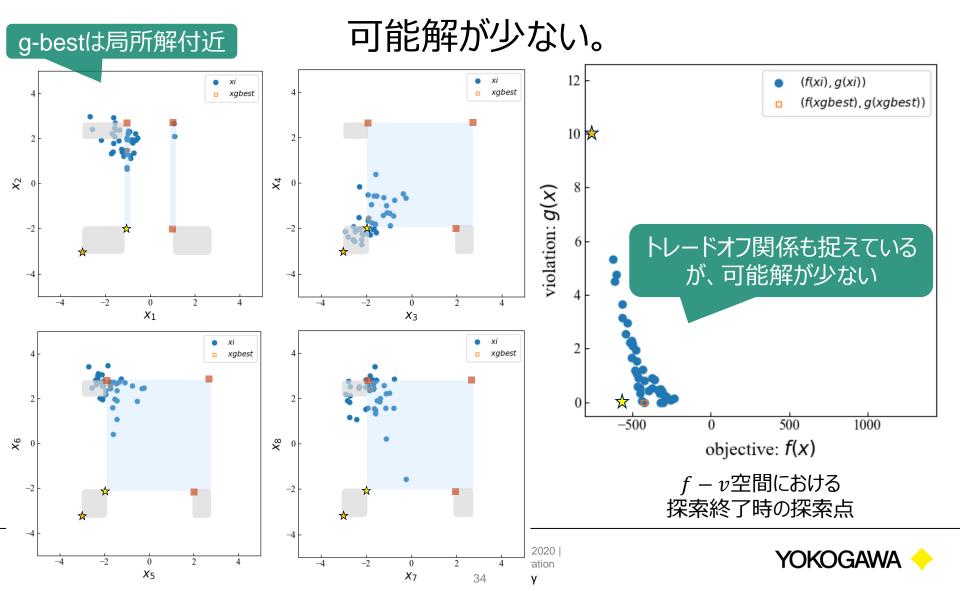


g-bestのf,vの推移

### 5. 混合整数かつ高次元への拡張

# 実験結果:解の様子

# 局所解付近のトレードオフ領域に広がっているが、



# 6. 混合整数かつ高次元かつ多数制約への拡張

# ベンチマーク関数(10次元)

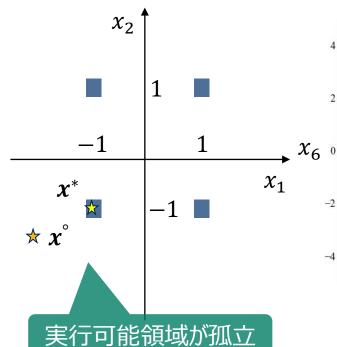


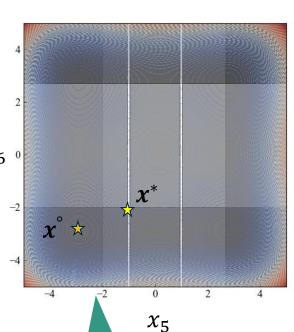
- minimize  $f(x) = \sum_{n=1}^{10} x_n^4 16x_n^2 + 5x_n$  (10次元) ※赤字は、先ほどと違う条件
- ♦ subj.to  $-2 \le x_n \le 2.7$ ,  $n = 1, \dots, 10$ ;  $x_n ∈ \{-1,1\}$ ,  $n = 1, \dots, 5$   $\lambda = 0.05$
- ◆ 最適解 $x^* = (-1, -1, -1, -1, -1, -2, -2, -2, -2, -2)^T$ ,  $f(x^*) = -390$

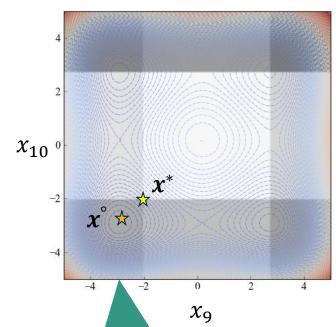
離散変数同士の平面

離散・連続同士の平面

連続変数同士の平面







非連結

© Yokogawa Electric Corporation

For Internal Use Only

上下限制約のみ



#### 6. 混合整数かつ高次元かつ多数制約への拡張

### 実験結果:探索性能

# どの試行も離散制約を満たす実行可能解を得ることができない。 ただし、上下限制約を満たすのは容易。

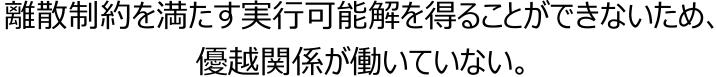
话日		探索	<b>最適値※</b> 2			
項目	平均值	標準偏差	最悪値	最良値	緩和有	緩和無
目的関数値	-147.4	60.3	-75.6	-280.8	-398.4	-390
違反量総和※1	0.14	0.06	0.23	0.06	0 (0.25)	0 (0)
上下限違反量	0.00	0.00	0.00	0.00	0 (0)	0 (0)
離散違反量	0.14	0.06	0.23	0.06	0 (0.25)	0 (0)
Feasible Rate		0				

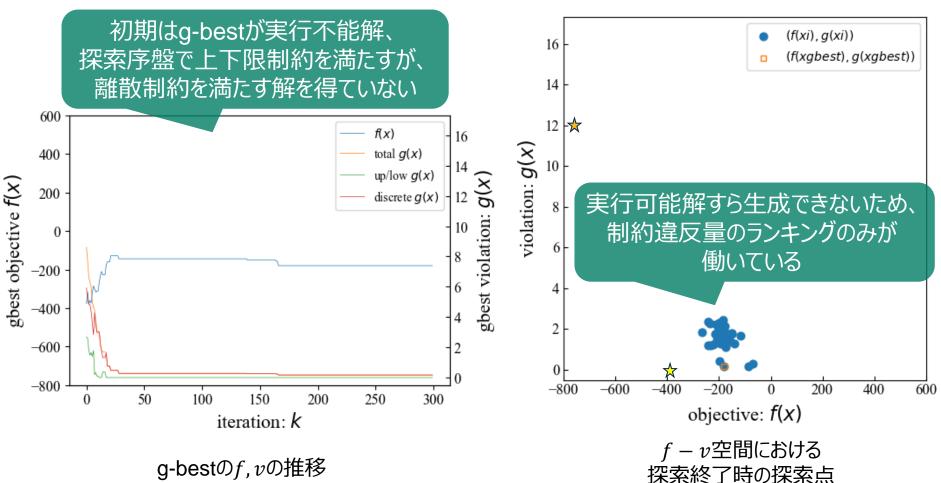
※1:緩和した状態で得た違反量なので、真の違反量は導出していない。

※2:()は真の違反量。 $\lambda \times 5$ 変数 =  $0.05 \times 5 = 0.25$ 。

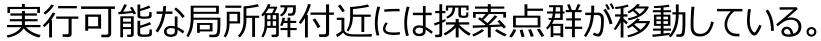


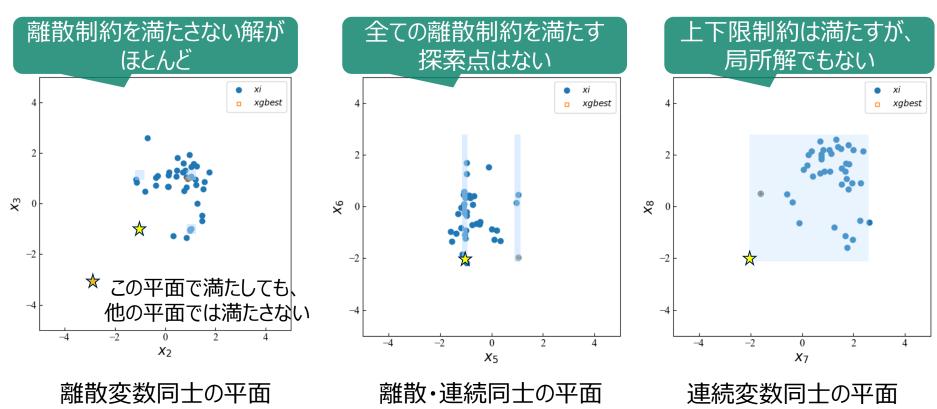
# 6. 混合整数かつ高次元かつ多数制約への拡張 実験結果:解の様子





# 6. 混合整数かつ高次元かつ多数制約への拡張 実験結果:解空間における探索点群の様子



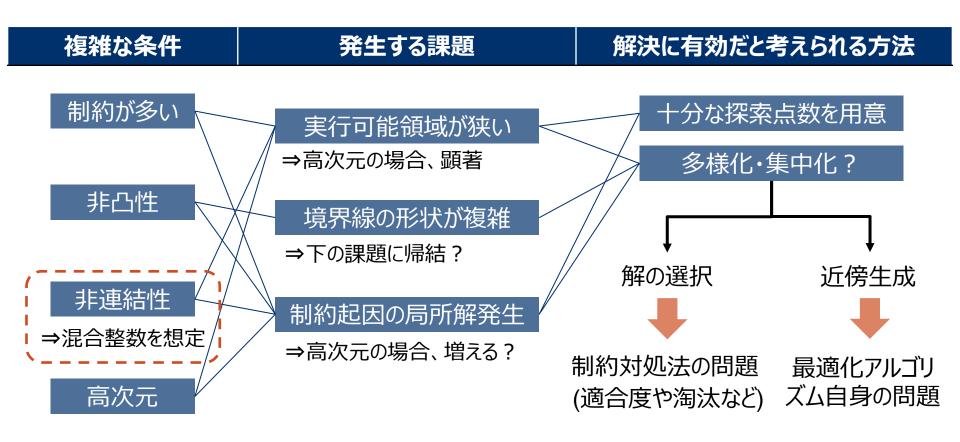


実行可能解を生成できないと、この方法はかなり厳しいのでは?



# 混合整数や高次元に簡単に拡張したが、その影響は大きい。

◆ 本質的に下記課題に帰結すると考えられる



# 高次元・非連結性・多数制約の影響は強い。

分類	灵	定条件	·····································				
刀块	次元	制約条件	実行可能解	探索点集団	探索性能		
低次元/連続	2	上下限	得られる	トレードオフ領域	大域的最適解		
低次元/混合	2	上下限/ 離散1つ	得られる 可能解割合が少ない	トレードオフ領域	大域的最適解 局所解に陥る 試行もある		
高次元/連続	10	上下限	得られる	トレードオフ領域	局所解付近		
高次元/混合	10	上下限/ 離散1つ	得られる 可能解割合が少ない	トレードオフ領域	局所解付近		
高次元/混合/ 多数制約	10	上下限/ 離散5つ	得られない 離散制約を満たせない	実行可能領域 周辺※	局所解付近		

<sup>※</sup>これは卒研が二段階の探索に分けているため(一段階目は制約充足、二段階目は優越関係)。



<sup>※</sup>本当の高次元は少なくとも1000次元を超えるのを想定。

# 今後の予定

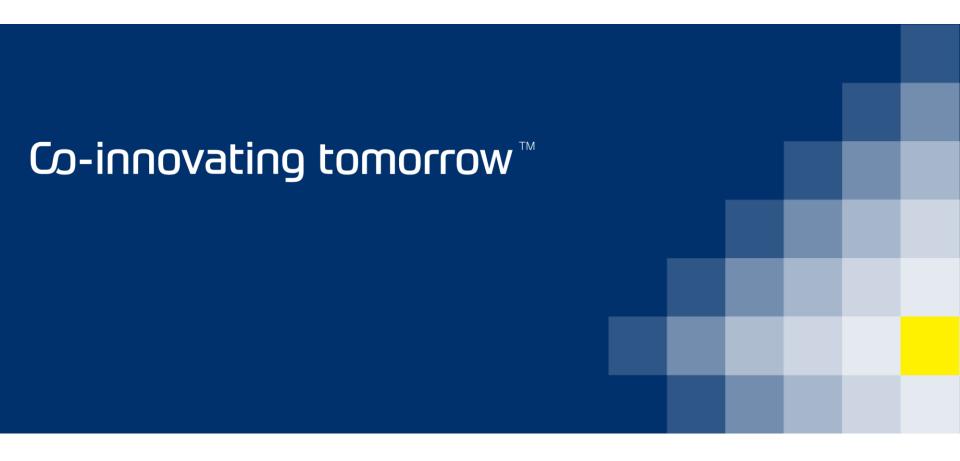
- 今回の実験結果と、今回の議論を踏まえ、「複雑な条件を課したときに発生する課題」の本質性をさらに高める。
- その課題を踏まえ、熊谷と学生側のタスク分担を整理する。
  - ◆ 安田君:スカラ化の詳細解析(~10/E)
    - ▶上記課題の正確性を確認する
  - ◆ 熊谷:スカラ化に移行した上で、より高次元に適用するとか?
    - ▶ テーマが想定している条件に徐々に近づけて、課題の深刻度合を図りたい
  - ◆ 安田君の今後の進め方、陳君のテーマも考慮することが前提
- ■ぼちぼち解決策も考えていきたい。
  - ◆「解の選択」で可能な多様化・集中化は、近傍生成とは異なる
    - ▶前者は目的-制約関数空間上での操作、後者は決定変数空間上での操作
    - ➤ 探索序盤に可能解が得られない状況でも、可能領域へ圧力が適切にかけられるような。。



# 安田君の今後の方向性と陳君のテーマ

- 少なくとも、スカラ化の方法を複雑な条件に適用する検証は実施する。
  - ◆ もし有効性が確認されたら、そこまでの内容を年内を目途にフルペーパーにまとめる > ただし、高次元といっても数十次元程度?
  - ◆ そうでなければ、現時点までの内容を年内を目途にレターにまとめる
  - ◆ 2月~3月は国際会議原稿執筆、3月~7月は就活、8月~10月は中間発表・ 学会発表、という予定だと推測
- それ以降は下記の二つを考えている。
  - ◆ 上記で課題が残っていれば、その解決策検討
  - ◆ 有制約多目的最適化の検討
- また、陳君のテーマを本テーマにする可能性もある。
  - ◆ 安田君や熊谷の検討を通じて、前ページの課題が発生しそうなら、その解決や詳細評価をテーマとするのはアリだと予想される
  - ◆ 一方、本人の能力面やコミュニケーション面を含め、総合的に判断する必要あり







# (Reference) Color Palette

100%	R: 0 G: 0 B: 0	R: 0 G: 79 B: 155	R: 255 G: 238 B: 0	R: 0 G: 49 B: 108	R: 241 G: 188 B: 26	R: 0 G: 105 B: 76	R: 206 G: 78 B: 33	R: 90 G: 112 B: 123
80%	R: 51 G: 51 B: 51			R: 51 G: 90 B: 138	R: 245 G: 201 B: 86	R: 0 G: 126 B: 101	R: 215 G: 114 B: 67	R: 122 G: 142 B: 153
60%	R: 102 G: 102 B: 102			R: 102 G: 131 B: 167	R: 248 G: 215 B: 133	R: 91 G: 153 B: 133	R: 225 G: 150 B: 108	R: 155 G: 172 B: 181
40%	R: 153 G: 153 B: 153			R: 153 G: 172 B: 196	R: 251 G: 229 B: 176	R: 150 G: 185 B: 171	R: 236 G: 186 B: 155	R: 188 G: 201 B: 208
20%	R: 204 G: 204 B: 204			R: 204 G: 214 B: 226	R: 253 G: 243 B: 217	R: 203 G: 220 B: 213	R: 246 G: 222 B: 205	R: 222 G: 229 B: 233

