◆目的

本稿は、佐藤君の原稿構想をサポートする目的で執筆したものである。

◆スケジュール

8月31日～9月3日：発表

6月15日：原稿投稿締切

6月5日：実験結果まとめる、研究構想まとめる、原稿執筆（可能な箇所から）

◆タイトル

有制約最適化のためのDifferential Evolutionの基礎検討

◆構成案

1章　はじめに

2章　有制約最適化

　2.1節　有制約最適化問題の定式化

　2.2節　制約対処法

2.3節　多様化・集中化

3章　有制約最適化のための近傍生成法の解析

　3.1節　有制約最適化へ拡張したDifferential Evolution

　3.2節　先行研究の近傍生成法と課題

3.3節　数値実験検証

4章　多様化・集中化に基づく有制約Differential Evolutionの改良

5章　数値実験検証

6章　おわりに

Appendix１　Multiple Constraint Ranking

◆構想案

●1章　はじめに

・メタヒューリスティクス[1]は、自然現象や物理現象から着想を得た発見的な最適化手法であり、実数値Genetic Algorithm（実数値GA）[2]やDifferential Evolution（DE）[3]が知られている。

・さらに、直接探索・多点探索の特徴を有するため、ブラックボックス最適化や大域的最適化において有力な手法だが、無制約最適化での適用に限定されている。

・そこで、メタヒューリスティクスの直接探索・多点探索の維持・活用を念頭に置きながら、有制約最適化へ拡張するための手法群として、制約対処法（Constraint Handling Techniques：CHT）[4]が知られている。

・有制約最適化では、目的関数と制約を逸脱した量（制約違反量）の両方の景観やトレードオフ関係を考慮しながら、実行可能な最適解を求める必要がある。

・これは、次の候補解（近傍解）を生成する近傍生成法と、候補解の選択・比較において制約条件を考慮するCHTを組み合せることで実現できる。

・代表的なCHTとして、Adaptive Penalty[5]や制約法[6,7]、Multiple Constraint Handling[8]、Infeasibility Driven Evolutionary Algorithm[9]などが知られており、数多く提案されている。

・これらのアルゴリズムは、有制約最適化へ拡張したメタヒューリスティクスという観点で見ると、独自のCHTと近傍生成法で構成されており、特に近傍生成法は実数値GAのビットストリング交叉やSimulated Binary Crossoverなど非常に単純な操作を採用するケースがほとんどである。

・しかしながら、高次元や多数制約など複雑な問題では、CHTだけでなく、近傍生成も探索効率に多大な影響を与える可能性が高い。

・そこで本稿では、多様化・集中化の観点から、有制約最適化における近傍生成の影響を明らかにする。

・さらに、無制約最適化で有力なDEをベースとして、有制約最適化のための近傍生成法を検討し、その探索性能について検証する。

●2.1節　有制約最適化問題の定式化

・有制約最適化問題を記述し、notationを示す。

●2.2節　制約対処法

・CHTのアプローチは、ペナルティベース、分離ベース、多目的最適化ベースの3種類に大別できる。

・ペナルティベースは、制約違反量の総和をペナルティとして目的関数に追加し、無制約最適化問題として解く方法である。

・古典的な方法として、拡張Lagrange関数法が知られているが、ブラックボックス・非凸な目的関数や制約関数が含まれる場合、局所解に停滞する可能性が高い、あるいはペナルティ係数の適切な設定が困難であるなどの問題がある。

・そこで、探索過程で適応的にペナルティ係数を調整するAdaptive Penalty（APM）[5]が提案されている。

・他にも、分離ベースとして制約法[6,7]やMultiple Constraint Handling（MCR）[8]、多目的最適化ベースとしてInfeasibility Driven Evolutionary Algorithm（IDEA）[9]やDeCODE[10]が知られている。

・CHTは、目的関数と制約違反量の両方の景観を考慮するために、メタヒューリスティクスのアルゴリズム中の解の選択・比較方法を工夫する。

・本稿では、解の選択・比較はMCRによって行うことにする。具体的には、アルゴリズムで使用されている目的関数値の順序関係を、MCRによって定められる適合度の順序関係に置き換える。

●2.3節　多様化・集中化

・メタヒューリスティクスは近接最適性原理（POP）に基づき、解空間の偏り構造を把握・活用することで、効率的な探索を行う。

・POPを効果的に活用する探索戦略として、多様化・集中化が知られている[1]。

・多様化は、探索範囲・探索点分布を広くしておくことで、解空間の偏り構造を把握する指針で、集中化は、把握した偏り構造を活用し、探索範囲・探索点分布を有望領域に徐々に狭めて解の改善を狙う指針である。

・メタヒューリスティクスでは、多様化・集中化が適切に実現することで、探索性能が向上することが確認されていることから、多様化・集中化の実現が重要である[11,12]。

●3.1節　有制約最適化へ拡張したDifferential Evolution

・DEにはいくつかの演算モデルがあり、X/Y/Zという表記で区別される。Xは突然変異の基準ベクトル、Yは突然変異における差分ベクトルの個数、Zは交叉の演算モデルである。

・本稿では、rand/1/binの演算モデルを使用する。（4章の改良手法に合わせる）

は探索点群からランダムに選んだ探索点、はパラメータである。

・有制約最適化へ拡張するためには、無制約最適化のDEにおける解の選択・比較で、目的関数値の順序関係を、CHTで与えられる適合度の順序関係に置き換えれば良い。

・本稿では、適合度はMCRによって与えられるものとする。MCRの具体的なアルゴリズムはAppendix 1を参照されたい。

・有制約最適化へ拡張したDEのアルゴリズムを示し、次世代の選択部分を「探索点群と近傍解集合を合わせた解集合から、適合度に基づいて上位個を選び、次世代の探索点群とする。」という記述にしておく。

●3.2節　先行研究の近傍生成法と課題

・2章で挙げたCHTの先行研究で使用されている実数値GAの近傍生成法について述べる。

・実数値GAの近傍生成は交叉と突然変異で構成される場合があるが、交叉が主要な影響を与える一方、突然変異はあくまで補助的な手段で、探索性能への影響は比較的小さい[2]ため、本稿では交叉のみに注目する。

・Lemongeら[5]や高濱ら[6]は、ビットストリング型の交叉（一点交叉や一様交叉）を使用している。

・ビットストリング型の交叉は、実数値ベクトルをビットストリングに変換してから要素を組み替えるため、解空間上で目的関数の景観や探索点の分布をほぼ考慮しない近傍解が生成される。

・Garcia ら[8]は、Blend Crossover-（BLX-）、Rayら[9]らは、Simulated Binary Crossover（SBX）を使用している。

・これらの交叉は二つの探索点を基準に、要素毎に確率分布（BLX-αは一様分布、SBXは多項式分布）に基づいて近傍解を生成するが、探索点間の相互作用の活用度合いは低い。

・このように、これらの先行研究では、独自のCHTを提案している一方、近傍生成法は非常に簡易的な方法を採用しているが、数値実験は20次元などの比較的易しい条件での性能検証に留まっている。

・しかしながら、高次元などの複雑な条件になった場合、CHTによって制約条件を考慮した解の比較・選択が可能になっているものの、これらの交叉では、有望な近傍解が生成できないため、探索効率が低下すると考えられる。

・一方、DEは探索点間の差分ベクトルを使用するため、探索点間の相互作用が比較的強い上に、探索点分布のスケールや偏りが近傍に反映されやすい。

・さらに、

・このため、実数値GAの簡易的な交叉よりも、多様化・集中化の実現が期待できる。

・先行研究では、有制約DEがいくつか提案されている。

・Takahamaら[7]は、制約法とDEを組み合わせたDEを提案しており、近傍生成では、rand/1/expの演算モデルを使用しているが、多様化・集中化に基づく分析や工夫などは行われていない。

・また、Wangら[10]は、多目的最適化ベースのCHTとDEを組み合わせたDeCODEを提案している。

・DeCODEの近傍生成では、DEの2種類の演算モデル（current-to-rand/1/none、rand-to-best/1/bin）を確率的に選択・使用する。さらに、探索過程で選択確率を線形に増加させ、前者のモデルから後者のモデルへ徐々に使用頻度を移行することで、多様化・集中化の戦略実現を狙っている。

・しかしながら、DeCODEは、近傍生成以外にも多くの発見的な工夫（リスタート戦略など）を併用しているため、上記の近傍生成の効果自体を検証していない、あるいは、多様化・集中化に関する根本的な分析はされておらず、単なる探索性能の数値実験検証に留まっている。

・そこで本稿では、多様化・集中化の観点から、有制約最適化における近傍生成法の影響について明らかにする。

●3.3節　数値実験検証

・探索過程で多様化・集中化がどの程度実現されているのかを評価するための指標として、本稿では下記の探索点間の平均距離を用いる。

ただし、（）は探索点の位置、はユークリッド距離である。式中の分数は正規化のためにかけている。

・探索点間の平均距離が大きい場合、探索点群が解空間内に広く分布しているため多様化、探索点間の平均距離が小さい場合、探索点群が解空間内に狭く分布しているため集中化というように、探索状態を評価することが期待できる。

・さらに、有制約最適化では実行可能な大域的最適解を探索するため、探索点群が実行可能領域の境界に到達しているかどうかは重要である。

・本稿では下記の実行可能解の割合を用いる。

ただし、は条件を満たす集合の要素数である。が1に近い場合、探索点群は可能解の割合が高く、が0に近い場合、探索点群は可能解の割合が低い。

・本稿では、上記の指標を用いることで、有制約最適化における可能解の獲得状況や多様化・集中化の実現状態を評価する。

・次元数が低い場合と高い場合を比較し、実数値GAの探索性能が一気に落ちることを指摘する。

・探索過程の最良解の推移と、評価指標（平均距離や可能解の割合）の推移を示し、多様化・集中化の実現状態と探索効率の関係を指摘する。

・CHTを組み合わせても、実数値GAの近傍生成法を使用する場合、高次元では多様化・集中化の観点で探索効率が落ち、実行可能解が得られないことを指摘する。

・DEは比較的高次元でも効率が落ちないことを指摘する。

・ただし、さらに高次元だと、DEでも効率が落ちるため、改善の余地があることを指摘する。

●4章　多様化・集中化に基づく有制約Differential Evolutionの改良

・卒研の方法を書く。

・卒研の方法は、rand/1の突然変異で終点に該当する探索点を動的に選んでいる。

・ただし、卒研の方法は、探索中盤以降、探索点が向かう領域が上位の探索点付近に限定される上に、DEは改善するときだけ更新するため、強力に集中化する恐れがある。しかも、DEは一度探索点群が集中化すると、分布を広げることが難しくなる。もしその状況が頻発するならば、多様化・集中化に改善の余地がある可能性がある。

・上記の観点で、もしかしたら、current-to-pbestのモデルで、探索点を動的に参照する方法のほうが適しているかも。

・current-to-pbestは、無制約最適化において良好な探索性能を示すDEのモデルとして有名なJADE[13]で提案されており、基準ベクトルを探索点と上位の探索点の内分点とするモデルである。

・current-to-pbest/1の突然変異は下記の式である。

は探索点の位置、は探索点群の上位個の集合からランダムに選んだ探索点、は探索点群からランダムに選んだ探索点、はパラメータである。つまり、との内分点を基準に、差分ベクトルを加えている。

・。はパラメータで、max関数は、が2未満になるのを防いでいる。JADEではが推奨されている。

・current-to-randはとした場合に一致し、current-to-bestはとした場合にほぼ一致すると捉えることができる。

・current-to-pbestで卒研の方法を適用すると、下記の式が調整則となる。

この式は、

とほぼ等価であり、から探索を開始し、を線形に減少させていき、探索終了時にとなるような調整則である。言い換えると、current-to-rand（大域的探索重視）から、current-to-best（局所的探索重視）へ徐々に移行するモデルとして捉えられる。

・一方、current-to-pbestモデルで行う場合、current-to-rand、current-to-best、あるいはに固定したモデルとの性能比較も必要になると考えられる。

●5章　数値実験検証

・次元数が低い場合と高い場合を比較し、提案手法の探索性能は上回ることを指摘する。

・探索過程の最良解の推移と、評価指標（平均距離や可能解の割合）の推移を示し、高次元でも多様化・集中化の観点で探索効率が落ちず、良い実行可能解が得られることを指摘する。

●6章　おわりに

・今後の課題として、

・

●Appendix１　Multiple Constraint Ranking

・MCRは、解集合内で目的関数値のランクや制約違反量のランクなどを算出し、そのトータルランクに基づいて適合度を与える制約対処法の一種である。具体的には、ある解集合に含まれる解同士で比較・評価するとき、あるの適合度を下記で与える。

ただし、は目的関数値のランク、は制約違反量のランク、は制約違反数のランクであり、各ランクは解集合におけるの順位である。本稿では、無制約メタヒューリスティクスのアルゴリズムの中で使用されている目的関数値の順序関係を、上記の適合度の順序関係に書き換えることで、制約条件を扱う。

◆参考文献

1. 相吉・安田 編著：「メタヒューリスティクスと応用」、オーム社（2007）
2. 小野・山村：喜多：「実数値GAとその応用」、人工知能学会誌、Vol. 15、No. 2、pp. 259-266（2000）
3. R. Storn and K. Price: “Differential Evolution - A Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization over Continuous Spaces,” Journal of Global Optimization, Vol. 11, No. 4, pp. 341-359 (1997)
4. E. Mezura-Montes and C. A. C. Coello: “Constraint-Handling in Nature-Inspired Numerical Optimizations: Past, Present and Future,” Swarm and Evolutionary Computation, Vol. 1, No. 4, pp. 173-194 (2011)
5. A. Lemonge and H. Barbosa: “An Adaptive Penalty Scheme for Genetic Algorithms in Structural Optimization,” International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 59, No. 5, pp. 703-736 (2004)
6. 高濱・阪井：「制約遺伝的アルゴリズムによる制約付き最適化」、情報処理学会論文誌、Vol. 47、No. 6、pp. 1861-1871（2006）
7. T. Takahama, and S. Sakai: “Constrained Optimization by the ε Constrained Differential Evolution with Dynamic -level Control,” in U. Chakraborty (ed.) Advances in Differential Evolution, Springer-Verlag, pp. 139-154 (2008)
8. R. Garcia, B. Lima, A. Lemonge, and B. Jacob: “A Rank-Based Constraint Handling Technique for Engineering Design Optimization Problems Solved by Genetic Algorithms,” Computers and Structures, Vol. 188, pp. 77-87 (2017)
9. T. Ray, H.K. Singh, A. A. Isaacs, and W. Smith: “Infeasibility Driven Evolutionary Algorithm for Constrained Optimization,” Constraint-Handling in Evolutionary Optimization, pp. 145-165 (2009)
10. B. Wang, H. Li, Q. Zhang, and Y. Wang: “Decomposition-Based Multiobjective Optimization for Constrained Evolutionary Optimization,” IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics: Systems, Vol. 51, No. 1, pp. 574-587 (2021)
11. K. Yasuda, N. Iwasaki, G. Ueno, and E. Aiyoshi: “Particle Swarm Optimization: A Numerical Stability Analysis and Parameter Adjustment Based on Swarm Activity,” IEEE Transactions on Electrical and Electronic Engineering, Vol. 3, No. 6, pp. 642-659 (2008)
12. 熊谷・田村・土屋・安田：「探索状態の評価と制御に基づく適応型Cuckoo Search」、電気学会C部門誌、Vol. 136、No. 11、pp. 1596-1609（2016）
13. J. Zhang and A. C. Sanderson: “JADE: Adaptive Differential Evolution with Optional External Archive,” IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol. 13, No. 5, pp. 945-958 (2009)