

解説：特集

スマートワールドへの実展開を目指す
新たなシステムズアプローチ

ブラックボックス最適化と応用

安田 恵一郎*・熊谷 渉**

* 東京都立大学大学院 システムデザイン研究科 東京都八王子市南大沢 1-1
 ** 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 東京都武蔵野市中町 2-9-32
 * Graduate School of Systems Design, Tokyo Metropolitan University, 1-1 Minami-Osawa, Hachioji, Tokyo, Japan
 ** Innovation Center, Market Headquarter, Yokogawa Electric Corporation, Ltd., 2-9-32 Nakacho, Musashino, Tokyo, Japan
 * E-mail: k-yasuda@tmu.ac.jp
 ** E-mail: Wataru.Kumagai@yokogawa.com

キーワード：ブラックボックス最適化 (Black-Box Optimization), 逐次近似最適化 (Sequential Model-Based Global Optimization), メタヒューリスティクス (Metaheuristics), 変換不変性 (Invariance), CMA-ES (Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy), PSO (Particle Swarm Optimization), 有制約最適化 (Constrained Optimization).
 JIL 0012/20/5912-0001 © 2020 SICE

1. はじめに

近年、製品設計の複雑化・高効率化、新規素材・遺伝子による製造プロセスの抜本改革、さらに、運用独立性と管理独立性を有する多様なシステムが連結し、新たなシステムを構築する「超システム (System of Systems : SoS)」の概念の提唱・発展などを背景に、「実用的な最適化」の必要性が急速に高まっている。この実現には、最適化理論だけでなく、シミュレーション技術や、AI を基盤とするモデリング技術、General Purpose of Graphics Processing Unit (GPGPU) のようなコンピューティング技術、などの周辺技術が融合した、総合的な最適化の方法論が必要である。この最適化は、シミュレータやセンサからデータをオンラインで獲得しながら最適化を実行するデータ駆動の形態で、ブラックボックス最適化 (Black-Box Optimization : BBO) と呼ばれる。これは、最適化問題における目的関数が、その景観が不明なブラックボックス関数であることから、ある設計変数とその目的関数値しか得られないため、目的関数の解析的情報 (勾配や Hesse 行列) や性質 (凸性や変数間依存性など) を使用する数理最適化などの最適化アルゴリズムの適用が不可能な問題クラスである。以上の背景から、最適化技術を取り巻く環境は急速に変化しており、これらの変化に対応可能な BBO 技術が求められる。本稿では、BBO の代表的なアプローチを概観しながら、中でもメタヒューリスティクス¹⁾を取り上げ、その概要、具備すべき性質、制約条件の対処方法などの研究動向を述べていく。

2. ブラックボックス最適化

BBO の代表的なアプローチとして、直接探索法や逐次近似最適化 (Sequential Model-Based Global Optimization : SMBO, 応答曲面法)²⁾が挙げられる。直接探索法は、設計変数とその目的関数値のみを用いる直接探索型の最適化アルゴリズムであり、メタヒューリスティクスや進化計算が代表的である。直接探索法は、目的関数の勾配を使用しないため、局所的最適解に陥りにくいことから、大域的最適化としての特徴ももつ。SMBO は、①設計変数と目的関数値のデータから、目的関数の代理

モデルを生成する、②代理モデルの最適解を得る、③得られた解に基づきサンプリングする、の3つの操作を逐次繰り返すことで、ブラックボックス関数の最適解を探索する方法である。近年の SMBO としては Bayes 最適化 (Kriging 法)³⁾が代表的である。Bayes 最適化は、①サンプルデータから、確率モデル (ガウス過程回帰など) に基づき代理モデルを生成する、②確率モデルに対応する獲得関数を構成し、その最大点を求める、③その最大点にサンプリングする、という操作を繰り返す。ほかにも、カーネル法や深層学習などの AI を代表するモデリング技術、直接探索法などの大域的最適化アルゴリズム^(注1)、サンプリング方法を自由に組み合わせることで、優秀な SMBO を新たに開発することが期待できる⁴⁾。

本稿では、BBO の根幹となる直接探索法、特にメタヒューリスティクスを取り上げる。メタヒューリスティクス (または進化計算) は、生物現象などの経験的に優れたメカニズムが実装された発見的な手法であり、Genetic Algorithm や Particle Swarm Optimization が代表的である⁵⁾。共通して、実用的な時間に応じて最適性の高い近似解を求める近似解法、疑似乱数を活用した確率的解法、相互作用を及ぼす複数の探索点を利用する多点探索型という特徴をもつ。特に、確率的解法と多点探索型であるため、多峰な目的関数でも局所的最適解に陥りにくい、または、GPGPU などの並列処理コンピューティングの進化の恩恵を受けやすい、などのメリットがあることから、BBO の有望なアプローチとして期待される。

3. メタヒューリスティクスのロバスト性と適応性

3.1 ロバスト性と適応性

一般的な最適化では、目的関数のクラスや性質に応じて適切にアルゴリズム選択・アルゴリズム内のパラメータ設定を行うことが望ましいが、BBO ではこれらの情報を事前に知ることができない。さらに、メタヒューリスティクスを BBO に適用する際、目的関数のクラスや性質

(注1) 多峰性または非凸の目的関数を想定し、SMBO の代理モデルも複雑な非線型とすることが多いため、大域的最適化の適用が必要である。

から性能が影響を受ける, または, 調整可能なパラメータを有しており, 目的関数のクラスや性質に対して最適なパラメータ設定は依存する, という理由から, ユーザは非効率な試行錯誤を必要とする. このため, BBO を解くメタヒューリスティクスは, 高いロバスト性・適応性を具備すべきだと考えられる. ロバスト性とは, 探索過程でアルゴリズムのパラメータを固定した状態でも, 目的関数の性質変化に対して性能を維持できる性質であり, 適応性とは, 探索過程で得られる目的関数の構造を把握し, アルゴリズムのパラメータを動的に調整することで, 対象問題に適応する性質である.

ロバスト性を実現する性質として変換不変性が挙げられる. 変換不変性は探索過程の疑似乱数系列が同じであれば, 解空間や目的関数の変換に対してアルゴリズムの性能が再現性を有する (同等あるいは類似の結果が得られる) 性質である⁵⁾. メタヒューリスティクスが有する変換不変性は種類によってさまざま, ある変換に対する不変性を欠如しているアルゴリズムは, その変換の有無によって, 性能が大幅に変化することがみられる. たとえば, 解空間の変換としてアフィン変換 (線形変換と平行移動の合成変換), 目的関数の変換として単調増加変換が挙げられる. 困難あるいは必須な目的関数の性質として悪スケール性や変数間依存性, 原点依存性が知られているが, スケール不変性・回転不変性・平行移動不変性を具備すれば, これらの性質に有無に対して探索効率を維持するため, これらの不変性を包含するアフィン変換不変性は重要である. また, 目的関数の単調増加変換不変性を有するアルゴリズムは, 単峰・非凸・不連続な目的関数と, 凸・連続な目的関数の間で, 探索効率を維持する場合がある. このように不変性は, ある実験結果を一般の問題クラスに理論的に一般化して議論できるため, 発見的手法の性能評価において, きわめて有効である.

適応性を実現する機能として, 適応的パラメータ調整が挙げられる. メタヒューリスティクスは, 多様化・集中化の探索戦略を実現することで, 優れた性能を発揮するが, その探索ダイナミクスはパラメータの値によって変化するため, パラメータを適切に設定・調整することが重要である. また, 探索過程における探索ダイナミクスは, 探索点群の探索履歴から評価できる. よって, 探索履歴に基づく適応的パラメータ調整則を用いることで, パラメータ設定の労力を削減しながら, 優れた性能を発揮することが期待できる. さらに, パラメータ調整則はアルゴリズムの不変性に影響を与えることがある. このため, 不変性に基づくパラメータ調整則の設計指針として, 指針 A: アルゴリズムがある不変性を有するとき, それを維持するように調整則を付加する, 指針 B: アルゴリズムがある不変性を欠如するとき, それを補完するように調整則を付加する, が考えられる.

したがって, 変換不変性と適応的パラメータ調整則を

有するメタヒューリスティクスは, BBO のための高いロバスト性・適応性を発揮すると考えられる. 3.2 節では, これを満たすアルゴリズムとして, Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy と回転不変性を有する適応型 Particle Swarm Optimization を解説する.

3.2 ロバスト性と適応性を有するメタヒューリスティクス

(1) Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMA-ES)

Evolution Strategy (ES) は, 生物の進化過程に基づくメタヒューリスティクスであり, 正規分布に基づくランダムウォークにより, 探索点が移動する. ES はスケール不変性を欠如しているため, 1/5 ルールという探索点の改善頻度に応じてスケールパラメータを調整する適応的パラメータ調整則を併用することが一般的である. なお, これは 3.1 節の設計指針 B に該当する. 一方, CMA-ES は, アフィン変換不変性, 目的関数の単調増加変換不変性, 適応的パラメータ調整則を具備する ES で, Hansen らにより開発された以降, さまざまなバージョンが提案されている⁶⁾. ①共分散行列・スケールパラメータをもつ正規分布から探索点のつぎの移動候補 (近傍) をサンプリングする, ②近傍解集合で目的関数値が優れた解のみを用いて平均ベクトルを導出する, ③ Covariance Matrix Adaptation と Step-Size Adaptation によってこれらのパラメータを探索状態に応じて適応的に調整する, という手順によって, 探索過程で得た有望な領域に探索点群を移動させる点が多様化・集中化を実現している. さらに, CMA-ES ではすべてのパラメータに推奨値が設けられており, これは BBO において有意義な特徴である⁵⁾.

(2) 回転不変性を有する適応型 Particle Swarm Optimization

Particle Swarm Optimization (PSO)⁶⁾ は, 生物の群知能に基づくメタヒューリスティクスであり, 各探索点の探索履歴の最良解 (p-best) と全探索点の探索履歴の最良解 (g-best) に向かって, 各探索点が移動する. 文献 6) では, 活性度を用いて PSO のパラメータ空間上の安定・不安定領域を導出した後, 適応的パラメータ調整則を用いて活性度制御を行う AFPSO を提案し, AFPSO の探索性能がさまざまなパラメータ調整則を有する PSO よりも高いことを示した. また, PSO はスケール不変性と平行移動不変性を有するが, 回転不変性を欠如している⁷⁾.

そこで文献 7) では, PSO に回転不変性と適応的パラメータ調整則を付加したアルゴリズムとして, 適応型 CRI-PSO を提案している. 適応型 CRI-PSO の更新則は, (1), (2) 式で表わされる.

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^i(k+1) = & w(k)\mathbf{v}^i(k) + c_1\mathbf{AR}_1\mathbf{A}^T(\mathbf{p}^i(k) - \mathbf{x}^i(k)) \\ & + c_2\mathbf{AR}_2\mathbf{A}^T(\mathbf{p}^g(k) - \mathbf{x}^i(k)) \quad (1) \end{aligned}$$

$$\mathbf{x}^i(k+1) = \mathbf{x}^i(k) + \mathbf{v}^i(k+1) \quad (2)$$

ただし、目的関数 $f: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ の最小化問題を想定しており、 $\mathbf{x}^i(k) \in \mathbb{R}^N$ ($i = 1, 2, \dots, m$) は探索点、 $k \in \mathbb{N}$ は反復回数、 $m \in \mathbb{N}$ は探索点数、 $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ はパラメータ、 $\mathbf{R}_\ell = \text{diag}(R_{\ell 1}, R_{\ell 2}, \dots, R_{\ell N}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ($\ell = 1, 2$)、 $R_{\ell n}$ は一様分布 $\mathcal{U}(0, 1)$ に従う乱数、 $\mathbf{p}^i(k)$ は $\mathbf{x}^i(k)$ の p-best、 $\mathbf{p}^g(k)$ は g-best、 $\mathcal{P}(k) = \{\mathbf{p}^i(k) \mid i = 1, 2, \dots, m\}$ である。 $\mathbf{A} = (\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_N) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ は基底変換行列、 $\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_N\}$ は $\mathcal{P}(k)$ の共分散行列の固有ベクトルで、固有値 $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ ($\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_N$) に対応している。 \mathbb{R} は実数集合、 \mathbb{N} は自然数集合である。また、 $w(k)$ の調整則は (3)~(5) 式で表わされる。

$$w(k+1) = w(k) + \text{sgn}(P_t(k) - P(k))\Delta w \quad (3)$$

$$P(k) = \frac{1}{m\sqrt{N}} \sum_{i=1}^m \|\mathbf{v}^i(k)\|_2 \quad (4)$$

$$P_t(k) = \frac{\varepsilon_{\text{start}}}{\sqrt{N}} \left(\frac{\varepsilon_{\text{end}}}{\varepsilon_{\text{start}}} \right)^{\frac{k}{k_{\text{max}}}} \|\gamma_{\text{max}} - \gamma_{\text{min}}\|_2 \quad (5)$$

ただし、 $\gamma_{\text{min}}, \gamma_{\text{max}} \in \mathbb{R}^N$ は初期探索点などから決定するベクトル、 $k_{\text{max}} \in \mathbb{N}$ は反復回数上限、 $\text{sgn}: \mathbb{R} \rightarrow \{-1, 1\}$ は符号関数、 $\Delta w, \varepsilon_{\text{start}}, \varepsilon_{\text{end}} > 0$ 、 $w_{\text{max}}, w_{\text{min}} \in \mathbb{R}$ はパラメータである^(注2)。なお、 $w(k)$ を (3) 式で更新した後、 $w(k) \in [w_{\text{min}}, w_{\text{max}}]$ を満たすように修正する。

この調整則は、活性度 ((4) 式) が目標値 ((5) 式) に追従するように $w(k)$ を調整する。つまり、探索状態を表わす活性度を制御することで、多様化・集中化の探索戦略を確実に実現できるため、高い適応性が期待される。さらに、この更新則はパラメータ調整則を有さないとき、目的関数の単調増加変換不変性、解空間の回転不変性、相似変換不変性、平行移動不変性を具備するが、パラメータ調整則の付加によってこれらの不変性を失わないため、3.1 節の設計指針 A を満たす。したがって、適応型 CRI-PSO は、 $\mathcal{P}(k)$ の分布に応じて乱数による摂動方向を決定しながら活性度を制御する、つまり回転不変性と適応的パラメータ調整則を有するため、高いロバスト性・適応性を発揮することが期待され、性能が PSO や AFPSO よりも優れることが数値実験的に確認されている⁷⁾。

4. 有制約ブラックボックス最適化

4.1 BBO における制約条件の分類

メタヒューリスティクスなどの直接探索法は、無制約最適化問題を想定しているが、実応用では制約条件を考

慮する必要がある。本章では、制約条件の分類や対処方法について述べる。

制約条件は、解析的性質と形式的性質によって分類できる^(注3)。解析的性質に基づくとは、線型制約（非負制約や上下限制約も含む）と非線型制約に分類できる^(注4)。形式的性質に基づく分類は、BBO のようなシミュレーションを含む制約形式に基づく分類である。QRAK 制約分類⁸⁾ は、制約違反量が定量化可能か (Q)、制約違反解の評価が可能か (R)、解の評価にシミュレーションが必要か (A)、制約の存在が既知か (K)、の 4 つの観点の各分岐により計 16 種類に分類する^(注5)。これは、シミュレーションを伴う際の、シミュレータの都合で違反解を評価できない場合や、シミュレーションが正常終了しない場合を包含している。一方、実応用では、QRAK（定量化可能／制約違反解が評価可能／評価にシミュレーションが不要／制約が既知）、QRSK（定量化可能／制約違反解が評価可能／評価にシミュレーションが必要／制約が既知）のケースが多い。この理由としては、実行可能／不可能の二値制約でも、何らかの方法で制約違反量の定量化が可能、または、制約違反解でも合理的な方法で評価することが可能なことが挙げられる。以上のように、BBO では制約条件の種類をより広く捉え、それに応じた対処方法を検討することは意義がある。4.2 節では、QRAK/QRSK 制約の対処方法について解説する。

4.2 BBO における制約対処法

制約関数のクラスや性質が自明な場合、それに応じた制約対処法を適用すればよい。たとえば、目的関数・制約関数が凸ならば、ペナルティ関数の導入により凸な拡張 Lagrange 関数を構成し、無制約最適化に変換する（問題変換法）ことで、目的関数の解析的情報を利用する凸最適化によって解くことが可能である。一方、BBO のようなブラックボックス、あるいは非凸な目的関数・制約関数を含む場合、上記の方法は適用できない。

そこで、この問題に対する制約対処法では、実行可能解に加えて、実行不能解の明示的活用が重要であり、その活用度が弱い順に、①問題変換法、②目的関数と制約違反量の分離、③多目的最適化に大別される。①は無制約最適化に変換し直接探索法を適用するが、通常は目的関数・制約関数の単調増加変換不変性を有さないため、制約関数間のスケール差に強く依存する。そこで、文献 9) は解集合内の目的関数値や制約違反量の相対関係に応じて、各制約関数のペナルティ係数を適応的に調整することで、この欠点を緩和する。②は「目的関数値と制約違反量の切替」と「ランキング」に分類できる。一般に、解

(注2) 文献 7) では、これらの推奨値が与えられている。 $\gamma_{\text{min}}, \gamma_{\text{max}}$ は初期配置領域 $S_0 = [\gamma_{\text{min}, n}, \gamma_{\text{max}, n}]^N$ から設定する。また、 $w_{\text{max}}, w_{\text{min}}$ は安定・不安定領域の境界線を挟むように設定すればよい。文献 7) では、パラメータ解析を通じて、 $w \in [0.5, 1.0]$ にその境界線が存在することを確認している。ただし、 $c_1 = c_2 = 1.4955$ のときである。

(注3) 制約条件は不等式制約と等式制約に分類されるが、実際には微小なパラメータを導入し、等式制約を不等式制約に緩和することが多いため、本稿では不等式制約のみを扱う。

(注4) ほかに離散制約や目的関数値の単位集合で定める制約がある。

(注5) 制約の存在が未知の場合、制約関数値を計算できず、制約違反量を定量化できないため、実質的には計 9 種類である。

の選択で比較する指標（適合度）は目的関数値だが、前者は目的関数値と制約違反量を切り替えて採用する方法で、 ε 制約法¹⁰⁾ などがある。これは、閾値 ε を設定し、比較対象の解の制約違反量がすべて ε より小さければ目的関数値を適合度とし、そうでなければ制約違反量を適合度とする。さらに、 ε を探索過程でスケジューリング的に減少させることで、探索序盤では実行可能領域への移動を目指し、徐々に目的関数値の改善を目指す。後者は解集合内のさまざまなランクのみを用いて適合度を構成する方法で、文献 11) などがある。これは、目的関数値のランク、制約違反数ランク、各制約違反量ランクを導出し、この和を解の適合度として使用する。③は目的関数と制約違反量の 2 目的最適化として解く方法で、文献 12) などがある。これは、第 1 段階では制約違反量の総和を最小化する制約充足問題を解き、実行可能解を得た後、第 2 段階で上記の 2 目的最適化を NSGA-II（優越関係）で解く。

以上の方法は、探索過程における解集合内の相対的な関係を用いることから、多点探索かつ直接探索法であるメタヒューリスティクスと親和性が高い点が共通している。さらに、通常の制約違反量は各制約関数の違反量の総和とするため、制約関数の単調増加変換不変性を有さないが、ランキングの方法はこの不変性を有するため、スケール差の影響を受けない。このように、BBO における有制約問題を解く場合、制約対処法と最適化アルゴリズムの親和性や、変換不変性、多様化・集中化を考慮した全体的なアルゴリズム設計が重要である。

5. おわりに

本稿では、今後も、バイオエコノミー・超スマート社会などへの移行に伴い、実システムが SoS のように大規模化・複雑化する一方、急速に発展する周辺技術との融合により、実用的なシステム最適化が実現することから、これらの変化に対応可能な BBO 技術が求められることを述べた後、BBO の主要なアプローチ、特にメタヒューリスティクスについて解説した。期待される応用例として、代替エネルギー資源の開発・利用、疾病の根本治療、食品の高機能化・品質向上、製造プロセスの高効率化において有効な素材・化合物・遺伝子・細胞の新規設計など、多用途に対応した新物質探索が挙げられる¹³⁾。以上の動向から、有制約への拡張や周辺技術との融合が可能な SMBO は、今後ますます重要性を増すと考えられる。

(2020 年 8 月 24 日受付)

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, 電気学会, オーム社 (2007)
- 2) J. Bergstra, R. Bardenet, Y. Bengio, and B. Ke'gl: Algorithms for Hyper-Parameter Optimization, *Proc. of the 24th International Conference on Neural Information Processing Systems*, 2546/2554 (2011)
- 3) J. Snoek, H. Larochelle, and R. P. Adams: Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms, *Proc. of the 25th International Conference on Neural Information Processing Systems*, **2**, 2951/2959 (2012)
- 4) 河原林, 安田: Particle Swarm Optimization とモデリングを用いた統合的最適化, 計測自動制御学会論文集, **45**-11, 1/8 (2008)
- 5) 秋本洋平: Evolution Strategies による連続最適化—CMA-ES の設計原理と理論的基盤, システム/制御/情報, **60**-7, 292/297 (2016)
- 6) 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*, **3**-6, 642/659 (2008)
- 7) 熊谷, 安田: 回転不変性を有する適応型 Particle Swarm Optimization, 電気学会 電子・情報・システム部門誌, **139**-10, 1201/1214 (2019)
- 8) S. L. Digabel and S. M. Wildy: A Taxonomy of Constraints in Simulation-Based Optimization, arXiv:1505.07881v1 (2015)
- 9) A. Lemonge and H. Barbosa: An Adaptive Penalty Scheme for Genetic Algorithms in Structural Optimization, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **59**, 703/736 (2004)
- 10) T. Takahama and S. Sakai: Constrained Optimization by ε Constrained Particle Swarm Optimizer with ε -Level Control, *Proc. of the 4th IEEE International Workshop on Soft Computing as Transdisciplinary Science and Technology*, 1019/1029 (2005)
- 11) R. Garcia, B. Lima, B. Jacob, and A. Lemonge: Handling Optimization Problems with Constraints of Different Magnitudes Using Evolutionary Algorithms, *Proc. of the XXXVI Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering* (2015)
- 12) S. Venkatraman and G. G. Yen: A Generic Framework for Constrained Optimization Using Genetic Algorithms, *IEEE Trans. on Evolutionary Computation*, **9**-4, 424/435 (2005)
- 13) 経済産業省: スマートセルインダストリー (生物による物質生産) の可能性, https://www.meti.go.jp/shingikai/sankoshin/shomu_ryutsu/bio/pdf/003.08.00.pdf (2020 年 8 月 23 日アクセス)

[著 者 紹 介]

やす だ けい いち ろう 君 (正会員)
安 田 恵 一 郎 君 (正会員)



1960 年 9 月 10 日生。1989 年 北海道大学大学院工学研究科電気工学専攻博士課程修了。同年 東京都立大学工学部助手, 1991 年 東京都立大学工学部助教授, 2006 年 首都大学東京大学院 (現 東京都立大学大学院) 理工学研究科教授となり, 現在に至る。システム最適化ならびに電力システム工学の研究に従事。電気学会, 進化計算学会, IEEE の会員。工学博士。



くま がい わたる 君
熊 谷 渉 君

1991 年 7 月 8 日生。2016 年 横河電機株式会社入社, 2020 年 東京都立大学大学院理工学研究科電気電子工学専攻博士後期課程修了, 現在に至る。システム最適化, 機械学習, およびエネルギー最適化に関する研究に従事。電気学会の会員。博士 (工学)。