3V-03　多目的非線形最適化手法 Vector Simplex II

○高濱　徹行　　　阪井　節子
広島市立大学情報科学部†　　広島修道大学商学部‡

1　はじめに

近年，社会的ニーズの多様化とともに，多目的最適化手法に対する要求が高まってきている．多目的最適化問題では，ある目的を改善するためには少なくとも他の1つの目的を改悪しなければならないというパレート最適解が重要視されている．多目的最適化問題の解法としては，パレート最適解集合全体を求め，意志決定者が大局的な見地から適切な解を選択するという方法が望ましいと考えられる．しかし，パレート最適解集合全体を直接求める数理的手法についての研究は少なく，多目的最適化問題を何らかの方法で単一目的最適化問題に変換するスカラー化手法，目標計画法，妥協計画法，あるいは局所的な選好情報に基づき解を決定する対話的手法などが研究されてきている．

我々は，パレート最適解集合を直接求める方法として，非線形最適化手法である Simplex 法 [1] を応用した Vector Simplex 法 [2] を提案した．Vector Simplex 法では,「より良いもののない解の集合」,「より悪いもののない解の集合」などを定め，鏡映・拡張・収縮・縮小という操作を後者の集合の要素に対して行い，悪い要素を順次改善して行くことによってパレート最適解集合を求める方法である．Vector Simple 法により，パレート最適解候補集合を求め，その中から大局的に解を選択するという手順で多目的最適化問題を解くことが可能となったが，得られた解に偏りがあり全解空間に均等に広がる解集合を得にくい，また解の収束精度が不十分であるという問題があった．

そこで本研究では，Vector Simplex 法を改良した Vector Simplex II 法を提案する．Vector Simplex II 法は，解の間に距離を定義し，距離を利用して全解空間に広がる解を求める．さらに，多目的問題を一目的問題に変換し，それを解くことにより収束精度を向上させる．本手法の有効性を示すために，Vector Simplex II 法により制約のない多目的最適化問題を解き，Vector Simplex 法と比較することによりその有効性を示す．

---

*Multiobjective Nonlinear Optimization Method "Vector Simplex II"
†Faculty of Information Sciences, Hiroshima City Univ.
‡Faculty of Commercial Sciences, Hiroshima Shudo Univ.

2　多目的最適化問題

多目的最適化問題は，ベクトル値最小化問題として以下のように定式化できる．

$$(\mathrm{P})\quad \begin{array}{l}\text{minimize } \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \\ \text{subject to } \boldsymbol{x} \in X = \{\boldsymbol{x} \in R^n | \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \le \boldsymbol{0}\}\end{array}$$

ここで，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$ は n 次元決定変数ベクトル，$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_m(\boldsymbol{x}))$ は m 次元ベクトル値目的関数，$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = (g_1(\boldsymbol{x}), g_2(\boldsymbol{x}), \cdots, g_k(\boldsymbol{x}))$ は k 次元ベクトル値制約関数である．

(P) の解として，ある目的関数の値を改善するためには少なくとも1つは他の目的関数の値を改悪するしかない解であるパレート最適解 $\boldsymbol{x}^*(\in X)$ は，以下のように定義される．

$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) < \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^*)$ となる $\boldsymbol{x} \in X$ が存在しない．
ただし，$\boldsymbol{f} < \boldsymbol{f}^* \Leftrightarrow \forall j f_j < f_j^*$

3　Vector Simplex II 法

Simplex 法は，R^n 上に幾つかの点を幾何的に配置し，それらの点での目的関数の値を比較することにより，最適解を探索する方法であり，制約のない一目的非線形最適化問題，特に微分不可能な問題を解く効率の良い方法として知られている．R^n 上の $(n+1)$ 個のアフィン独立な点の凸包である単体の頂点を $\boldsymbol{x}^i \in R^n (i = 1, 2, ..., n+1)$ とし，頂点全体の集合を $U = \{\boldsymbol{x}^i\}$ とする．U 中で f の最小値を与える最良の頂点，f の最大値を与える最悪の頂点などを求め，鏡映，拡張，収縮，縮小などの操作により最悪の頂点を改良して行き最小値を求める．

多目的最適化問題におけるベクトル値のような半順序集合では，一般に最良解や最悪解を一意的に決定することはできない．そこで Vector Simplex 法では，全体集合 U をより良い頂点のない集合 U^l，より悪い頂点のない集合 U^h に分割し，U^h 中の頂点を改良してゆくという方法を採った．Vector Simplex II 法では，U^h 中の頂点を改良する際に，その頂点より良い頂点のみを参照して操作を行ない，操作の結果得られた頂点との比較を簡略化することにより処理を単純化かつ高速化した．また,

全解空間に均等に広がる解集合を得るために，他の頂点に非常に近い頂点 (近接頂点) を取り除く操作を導入するとともに，多目的問題を一目的問題に変換して Simplex 法で解くことにより，パレート最適解へ収束しにくいと考えられる，他の頂点から離れた頂点 (孤立頂点) を収束させるという方法を導入した．

Vector Simplex II 法のアルゴリズムを C 言語的に表現したものを以下に示す．

vector_simplex(N)
{
　U=N 個の頂点から構成される初期集合;
　while(評価回数 $\le$ 最大評価回数) {
/* U^h の要素を改善し $U = U^l$ の状態にする */
　　U^l=U 中でより良い頂点のない頂点の集合;
　　U^h=$U - U^l$ 中でより悪い頂点のない頂点の集合;
　　for(each $\boldsymbol{x}^h$ in U^h) {
　　　V=U 中で $\boldsymbol{x}^h$ より良い高々n 個の頂点の集合;
　　　$\boldsymbol{x}^0$=V の図心;
　　　$\boldsymbol{x}^r=(1+\alpha)\boldsymbol{x}^0-\alpha\boldsymbol{x}^h$;
　　　if($\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^r) < \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^h)$) $\boldsymbol{x}^h$=$\boldsymbol{x}^r$;
　　　else {
　　　　$\boldsymbol{x}^c=\beta\boldsymbol{x}^h+(1-\beta)\boldsymbol{x}^0$;
　　　　if($\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^c) < \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^h)$) $\boldsymbol{x}^h$=$\boldsymbol{x}^c$;
　　　　else {
　　　　　$\boldsymbol{x}^{l^*}$=U^l 中で $\boldsymbol{x}^h$ に最も近い頂点;
　　　　　$\boldsymbol{x}^h=0.5\boldsymbol{x}^h+0.5\boldsymbol{x}^R$;
　　　　}
　　　}
　　}
　　if($U!=U^l$) continue;
/* 孤立頂点の最適化と近接頂点の削除 */
　　$\boldsymbol{x}^h$=U 中で最も近い頂点との距離が最小の頂点;
　　$\boldsymbol{x}^l$=U 中で最も近い頂点との距離が最大の頂点;
　　V=U 中で $\boldsymbol{x}^l$ に近い n 個の頂点の集合;
　　関数 $f_0(\boldsymbol{x})=\max_j\{f_j(\boldsymbol{x})-f_j(\boldsymbol{x}^l)\}$ を定義;
　/* 一目的問題 minimize f_0 を Simplex 法で解く */
　　$\boldsymbol{x}^{new}$=Simplex($V\cup\{\boldsymbol{x}^l\}$, f_0);
　　if($\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{new}) < \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^l)$)
　　　$\boldsymbol{x}^l$=$\boldsymbol{x}^{new}$;
　　else {
　　　$\boldsymbol{x}^{l^*}$=U 中で $\boldsymbol{x}^l$ に最も近い頂点;
　　　$\boldsymbol{x}^h=0.5\boldsymbol{x}^l+0.5\boldsymbol{x}^{l^*}$;
　　}
　}
}

/* simplex 法による最適化 */
Simplex(V, f)
{
　while(最大繰り返し回数以内 and V が収束していない) {
　　$\boldsymbol{x}^l$=V 中で f に関して最も良い頂点;
　　$\boldsymbol{x}^s$=V 中で f に関して 2 番目に悪い頂点;
　　$\boldsymbol{x}^h$=V 中で f に関して最も悪い頂点;
　　$\boldsymbol{x}^0=V-\{\boldsymbol{x}^h\}$ の図心;
　　$\boldsymbol{x}^r=(1+\alpha)\boldsymbol{x}^0-\alpha\boldsymbol{x}^h$;
　　if($f(\boldsymbol{x}^r) < f(\boldsymbol{x}^l)$) {
　　　$\boldsymbol{x}^e=\gamma\boldsymbol{x}^r+(1-\gamma)\boldsymbol{x}^0$;
　　　if($f(\boldsymbol{x}^e) < f(\boldsymbol{x}^l)$) $\boldsymbol{x}^h$=$\boldsymbol{x}^e$;
　　　else $\boldsymbol{x}^h$=$\boldsymbol{x}^r$;
　　}
　　else if($f(\boldsymbol{x}^r) \le f(\boldsymbol{x}^s)$) $\boldsymbol{x}^h$=$\boldsymbol{x}^r$;
　　else {
　　　if($f(\boldsymbol{x}^r) < f(\boldsymbol{x}^h)$) $\boldsymbol{x}^h$=$\boldsymbol{x}^r$;
　　　$\boldsymbol{x}^c=\beta\boldsymbol{x}^h+(1-\beta)\boldsymbol{x}^0$;
　　　if($f(\boldsymbol{x}^c) < f(\boldsymbol{x}^h)$) $\boldsymbol{x}^h$=$\boldsymbol{x}^c$;
　　　else $\boldsymbol{x}^h=\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^h+\boldsymbol{x}^l)$;
　　}
　}
　return($\boldsymbol{x}^l$);
}

ただし，N は求めたいパレート最適解の数，n は入力変数の次元数である．

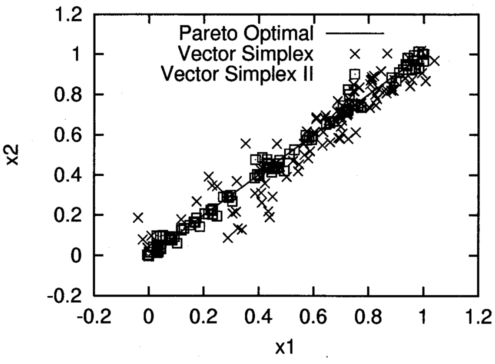
4　数値実験および評価

テスト問題として良く採用されている 2 目的の 2 次関数を例題とする．

例題 minimize f_1, f_2

$$f_1(x)=x_1^2+x_2^2,\ f_2(x)=(x_1-1)^2+(x_2-1)^2$$

例題のパレート最適解集合は，$\{(x_1,x_2)|x_1=x_2, 0\le x_1,x_2\le 1\}$ である．原点を中心とする直径 5 の球上の 100 点を初期集合として Vector Simplex 法および Vector SimplexII 法を実行した結果得られた解のグラフを以下に示す．



解の広がりおよび収束は Vector Simplex 法よりも優れた結果が得られている．しかし，関数の評価回数は Vector Simplex 法では 910 回，Vector SimplexII 法では，第 1 段階に 945 回，孤立頂点の最適化と近接頂点の削除のために 1,057 回，全体で 2,002 回かかっており，より評価回数を減少させる方法を考案する必要がある．

参考文献

[1] 今野浩, 山下浩: 非線形計画法, 日科技連出版社 (1978).

[2] 高濱徹行, 阪井節子: “多目的最適化手法とファジィ制御規則の学習について”, 第 56 回情報処理学会全国大会講演論文集, No.2, pp.72-73 (1998.3).