RBF ネットワークによる多目的逐次近似最適化

メタデータ	言語: Japanese 出版者: 公開日: 2017-10-03 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 北山, 哲士, 荒川, 雅生, 山崎, 光悦, Kitayama, Satoshi, Arakawa, Masao, Yamazaki, Koetsu メールアドレス: 所属:
URL	https://doi.org/10.24517/00008101

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 International License.

RBFネットワークによる多目的逐次近似最適化

北山哲士[*1]　荒川雅生　山崎光悦

Sequential Approximate Multi-Objective Optimization Using RBF Network

Satoshi KITAYAMA, Masao ARAKAWA, Koetsu YAMAZAKI
College of Science and Engineering, Kanazawa University
Kakuma-machi, Kanazawa, 920-1192, Japan

In this paper, a sequential approximate multi-objective optimization procedure by the Radial Basis Function (RBF) network with the Satisficing Trade-Off Method (STOM) is proposed. The sampling strategy is an important issue in the sequential approximate optimization. In this paper, the density function and the pareto fitness function are proposed. The objective of the density function is to find the sparse region in the design variable space. New samplings point are obtained by optimizing the density function. The objective of the pareto fitness function is to find the approximate set of pareto optimal solutions from the given data. New sampling point is obtained by optimizing the pareto fitness function. Both functions are constructed by the RBF network. By using both functions, the approximate set of pareto optimal solutions can be found effectively even when the set of pareto optimal solutions are separeted. Through simple numerical examples, the validity of proposed sampling strategy is examined.

Key Words **: Engineering Optimization, Optimal Design, Sequential Approximate Multi-Objective Optimization, RBF Network, System Engineering**

1. 緒言

近年のシミュレーション技術の発達により，詳細な解析モデルを構築し，最適設計を行うことが可能となりつつある．また数値流体力学(Computational Fluid Dynamics:CFD)と多目的遺伝的アルゴリズムを組み合わせた多目的最適設計に関する研究も行われるようになっており，最適化手法を活用した最適設計のニーズは増している．近年の最適化手法の研究の流れの一つとして，応答曲面法を活用した逐次近似最適化(Sequential Approximate Optimization:SAO)に関する研究が国内外で盛んに行われている[1-8]．逐次近似最適化とは，ある最適化問題が与えられたとき，何らかの最適化手法を直接最適化問題に適用して最適解を求めるのではなく，いくつかのサンプル点とその応答値から目的関数や制約条件を近似する応答曲面を作成し，一度応答曲面の最適解を求め，いくつかのサンプル点を追加して応答曲面の精度を向上させながら，最終的に精度の高い大域的最適解を求めようとするものである．逐次近似最適化の利点は，1回のシミュレーションに要する計算コストの高い設計問題に対する最適化の有効な方法であり，また実験を基調とするような設計問題にも対応できるという点が挙げられる．

近年の逐次近似最適化に関する国際的研究動向として，RBFネットワークを用いた逐次近似最適化に関する研究が盛んに行われている[9-13]．筆者らは，従来よりRBFネットワークを用いた逐次近似最適化に関する研究を行っているが[14]，これらの研究の中心的話題は，いかにして設計変数空間内におけるサンプル点の疎な領域を求め，応答曲面の大域的な近似精度を向上させ，一方で精度の高い大域的最適解を発見するかいう点に重点が置かれており，この問題点に対し，筆者らは密度関数と称する関数を構築することにより，サンプル点の疎な領域を確定的に見つける方法を提案し，その有効性を検討している．これら一連の研究において，対象とする最適化問題は，単一目的の最適化問題であり，筆者らの調べる限りにおいては，逐次近似最適化の考え方を多目的最適化へ応用した事例は単一目的の場合と比較すると少ないと思われる[15-21]．逐次近似最適化を多目的へ応用した研究[15-19]の概略をまとめると，次のようになる．

(STEP1) サンプル点とその応答値から，各目的関数を個別に応答曲面近似する．

(STEP2) 進化的多目的最適化手法の一つである多目的遺伝的アルゴリズム(MOGA)を応答曲面に対して適

* 原稿受付　平成？？年？月　日
*1正員，金沢大学理工研究域（〒920-1192　金沢市角間町）．
*2正員，香川大学工学部（〒761-0396　高松市林町2217-20）．
E-mail: kitagon@t.kanazawa-u.ac.jp

用し，応答曲面のパレート最適解集合およびパレートフロントを求める[注1]．

(STEP3) 近似パレート最適解集合の中から複数の近似パレート最適解を選び出し，これらを追加サンプル点とし，STEP1へ戻る．

(STEP1)～(STEP3)を繰り返すことにより，実際の設計問題のパレート最適解を精度よく求めることが可能とされている．

多目的最適化の主目的は，パレート最適解（もしくはパレート最適解集合）を求めることと競合する目的関数間のトレードオフ分析を行うことであり，計算コストの高いものや実験を基調とするような多目的設計問題に対応する方法として，上述した方法に特別問題があるわけではない．しかし，多目的設計問題では最終的に一つの設計解に絞り込む必要があり，一つの設計解に絞り込むという意思決定という部分まで考慮した場合，次のような課題が挙げられる．

(1)進化的多目的最適化手法により近似パレート最適解集合を提示することは有効であるが，最終的に一つの設計案に絞るという意思決定という側面まで考慮した場合，対話型多目的最適化手法では希求水準という意思決定を定量化した要素が取り入れられているため，対話型手法を用いるほうが望ましい．

(2)逐次近似最適化では，サンプル点の配置方法が問題となる．単一目的の逐次近似最適化における目的は，少ないサンプル点で精度の高い大域的最適解を求めることであるが，多目的最適化の場合は，上述した二つの目的，すなわち近似パレート最適解を求めること，さらに設計解を一つに絞り込む必要があるため，単純に単一目的の逐次近似最適化におけるサンプル点配置方法を適用しても良好な結果が得られない．そのため，多目的逐次近似最適化においては，単一目的の逐次近似最適化を拡張した新たなサンプル点配置方法を考える必要がある．

(3)現在のところ，対話型多目的最適化手法を用いた多目的逐次近似最適化(Sequential Approximate Multi-Objective Optimization: SAMOO)に関する研究は，筆者らが調べる限り文献[20, 21]程度であるが，サンプル点の配置方法に関しては研究途上である．近似パレート最適解の精度を向上させるために，近似パレート最適解集合内に重点的にサンプル点を配置する方法が望まれる．

また，多目的逐次近似最適化で期待したいこととして，希求水準に対応する精度の高い近似パレート最適解を求めることと同時に，近似パレート最適解集合までも求めることができれば，トレードオフ分析が容易になると考えられる．

そこで本論文では，RBFネットワークと対話型多目的最適化手法の一つである満足化トレードオフ法を組み合わせた多目的逐次近似最適化に関する基礎的検討を行う．特に逐次近似最適化の重要な課題であるサンプル点の配置方法について，密度関数とパレート適合関数と称する関数をRBFネットワークにより構築する．これらの関数を最適化することによって得られた解を追加サンプル点とする．第2章において，RBFネットワークと満足化トレードオフ法について簡単に記述し，本論文で対象とする多目的逐次近似最適化の流れについて説明する．第3章でサンプル点配置戦略の詳細について記述し，第4章において，本論文で提案するサンプル点配置戦略の有効性を簡単な数値計算例を通じて検討する．

2. 問題設定とRBFネットワーク

2.1 多目的最適化問題　多目的最適化問題は一般に次のように定式化される．

$$(f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_k(\boldsymbol{x})) \to \min \tag{1}$$

$$\boldsymbol{x} \in X \tag{2}$$

ここでkは目的関数の数，$f_i(\boldsymbol{x})$はi番目の目的関数を表しており，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$は設計変数ベクトル，$n$は設計変数の数を表す．また$X$は制約集合である．いくつかの目的関数を最大化する場合等は，最大化する目的関数にマイナス記号を付ければ，最小化問題へ帰着される．

2.2 RBFネットワークの学習　RBFネットワークは3層型のフィードフォワード型のニューラルネットワークである．このネットワークでは基底関数として一般にガウス関数が用いられ，その重ね合わせにより応答曲面$\hat{y}(\boldsymbol{x})$を作成する．応答曲面は

$$\hat{y}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{m} w_j h_j(\boldsymbol{x}) \tag{3}$$

で表され，mは中間層素子数，w_iは重みを表す．また$h_j(\boldsymbol{x})$は基底関数であり，次式で与えられる．

$$h_j(\boldsymbol{x}) = \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)}{r_j^2}\right) \tag{4}$$

上式において$\boldsymbol{x}_j$とr_jはそれぞれj番目の基底関数の中心と半径である．学習用データ$\boldsymbol{x}_i$と対になる教師データy_i（$i = 1, 2, \cdots, p$）とすると，RBFネットワークにおける学習は次式を最小化する問題となる．

$$E = \sum_{i=1}^{p} (y_i - \hat{y}(\boldsymbol{x}_i))^2 + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j w_j^2 \to \min \tag{5}$$

注1：　本論文では以降，応答曲面のパレート最適解を近似パレート最適解，近似パレート最適解を目的関数空間へ写像したパレートフロントを近似パレートフロントと呼ぶ．

上式において，第1項はネットワークの出力値と教師データの誤差の二乗和であり，第2項のλ_jは一部の素子だけが過剰に反応するのを避けるための重みに対するパラメータであり，これによりデータに含まれるノイズの影響を抑制するとともに，学習過程における正規性を保証している．RBFネットワークの学習とは，式(5)を満足する重みベクトル$\boldsymbol{w}$を見つけることであり，次の式により求まる．

$$\boldsymbol{w} = (\boldsymbol{H}^T\boldsymbol{H} + \boldsymbol{\Lambda})^{-1}\boldsymbol{H}^T\boldsymbol{y} \tag{6}$$

ここで上式の$\boldsymbol{H}$，$\boldsymbol{\Lambda}$，$\boldsymbol{y}$はそれぞれ

$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} h_1(\boldsymbol{x}_1) & h_2(\boldsymbol{x}_1) & \cdots & h_m(\boldsymbol{x}_1) \\ h_1(\boldsymbol{x}_2) & h_2(\boldsymbol{x}_2) & \cdots & h_m(\boldsymbol{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_1(\boldsymbol{x}_p) & h_2(\boldsymbol{x}_p) & \cdots & h_m(\boldsymbol{x}_p) \end{bmatrix} \tag{7}$$

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_m \end{bmatrix} \tag{8}$$

$$\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_p)^T \tag{9}$$

で与えられる．さらに式（6）において，

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{H}^T\boldsymbol{H} + \boldsymbol{\Lambda} \tag{10}$$

とおけば，RBFネットワークの学習は，$\boldsymbol{A}^{-1}$を求めることに帰着される．さらにその性能を特徴付けるものとして，追加学習と忘却が存在する．特に追加学習はマトリックスの操作のみで簡単に行うことができ，逐次近似最適化が容易となる．以降では，サンプル点の数pと中間層素子数mは同じとする．また基底関数の中心はサンプル点上におくものとする．そのため，サンプル点が追加されれば，基底関数の数が増加し，応答値の計算も行うことになる．

2.3　満足化トレードオフ法　満足化トレードオフ法(Satisficing Trade-Off Method:STOM)は，各目的関数の希求水準$f_i^A\,(i=1,2,\cdots,k)$を与え，パレート最適解およびパレート最適値を求める対話型多目的最適化手法の一つである．以下，STOMの流れを示す．

(STEP1)各目的関数の理想点f_i^I（$i=1,2,\cdots,k$）を決める．

(STEP2)各目的関数の希求水準f_i^A（$i=1,2,\cdots,k$）を決め，次式で重みを計算する．

$$w_i = 1/(f_i^A - f_i^I) \quad i=1,2,\cdots,k \tag{11}$$

(STEP3)重み付きTchebyshevノルム問題(min-max問題)を設定．

$$\min \max_{i=1,2,\cdots,k} \{w_i(f_i(\boldsymbol{x}) - f_i^I)\} \tag{12}$$

これを次の等価な補助最適化問題へ変換し，最適解を求める．

$$\min \quad z \tag{13}$$

$$w_i(f_i(\boldsymbol{x}) - f_i^I) \le z \quad i=1,2,\cdots,k \tag{14}$$

$$\boldsymbol{x} \in X \tag{15}$$

(STEP4)STEP3で得られた解における目的関数値(パレート最適値)に満足であれば，終了．そうでなければ，STEP2へ戻る．

2.4　対話型多目的逐次近似最適化　本論文で考える対話型多目的逐次近似最適化の流れを図1に示す．精度の高い近似パレート最適解を得るために重要となる点は，サンプル点の追加方法(図1中のSampling strategy)である．第3章では，この部分の詳細について記述する．

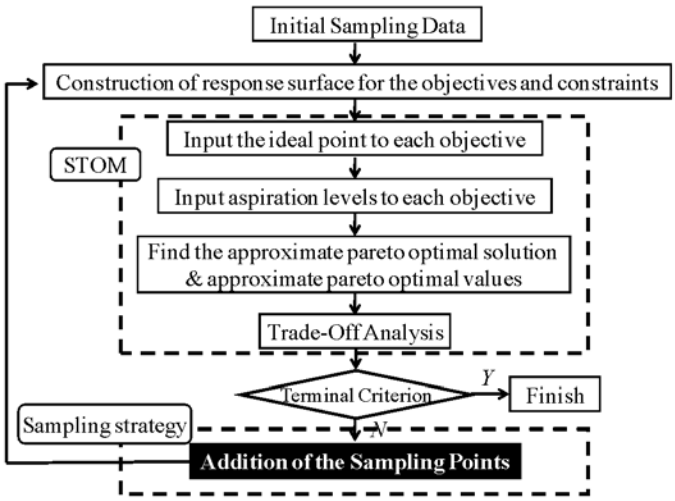

Fig.1 The procedure of SAMOO by interactive method

3.　サンプル配置戦略

本章では，はじめにRBFネットワークを用いた密度関数およびパレート適合関数の構築方法とその性質について記述し，サンプル点追加のアルゴリズムを示す．本論文で考えるサンプル点の配置方法の基本的な考え方を以下に記述する．

(1)密度関数を利用して，設計変数空間におけるサンプル点の疎な領域を見つけ，追加サンプル点とする．これはサンプル点の疎密を可能な限り解消し，目的関数や制約条件の大域的な近似のために行う．

(2)近似パレート最適解（集合）の精度を向上させるため，パレート適合関数を利用して近似パレート最適解集合を見つけ，そこにサンプル点を配置する．

なお，密度関数およびパレート適合関数も応答曲面の一つであるため，探索領域は内挿領域とする．

3.1　密度関数　設計変数空間内のサンプル点の疎な領域を確定的に見つけることが密度関数の目的で

ある．そこで，サンプル点の疎な領域に極小値を生成し，その最小値を取る点を，設計空間内におけるサンプル点の疎な点とする．サンプル点がm個ある場合の密度関数の作成手順およびその概略を以下に示す．

(D-STEP1) 式(9)のすべての成分を+1とした$m\times 1$ベクトル

$$\boldsymbol{y}^D=(1,1,\cdots,1)^T \tag{16}$$

を用意する．

(D-STEP2) 密度関数の重み$\boldsymbol{w}^D$を以下の式から求める．

$$\boldsymbol{w}^D=(\boldsymbol{H}^T\boldsymbol{H}+\boldsymbol{\Lambda})\boldsymbol{H}^T\boldsymbol{y}^D \tag{17}$$

(D-STEP3) 密度関数$D(\boldsymbol{x})$を最小化する．

$$D(\boldsymbol{x})=\sum_{j=1}^{m}w_j^D h_j(\boldsymbol{x})\rightarrow \min \tag{18}$$

そして，求めた最適解を追加サンプル点とする．

なお，密度関数$D(\boldsymbol{x})$の作成に関し，基底関数の半径には以下の式を用いる．

$$r_j=\frac{d_{j,\max}}{\sqrt{n}\sqrt[n]{m-1}} \tag{19}$$

ここでnは設計変数の数，mはサンプル点数，$d_{j,\max}$はj番目のサンプル点からの最大距離を表している．

密度関数がサンプル点の疎な領域で極小値を生成する理由は，ネットワークの出力値が一定値に抑えることで，実質的に重み$\boldsymbol{w}^D$に影響を与えるのはサンプル点間の距離となり[注2]，そのため，サンプル点間の距離が大きければ大きいほど，密度関数は，サンプル点間の距離が大きな領域で，より小さな極小値を生成するようになる．密度関数の一例を図2に示す．図2中の●はサンプル点を表している．

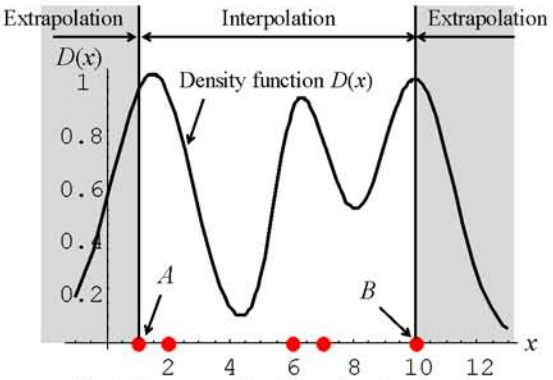

Fig.2 An example of the density function

3.2 パレート適合関数　多目的最適化の目的の一つがパレート最適解を求めることであったことを考えれば，近似パレート最適解集合付近に新たなサンプル点を配置し，近似パレート最適解の精度を高める必要がある．その目的のため，本論文では文献[16,17]で用いられているパレート適合度を用いる．i番目のサンプル点に対し，パレート適合度は次式で与えられる．

$$G_i=1-\max_{j\neq i}[\min(f_{s1}^i-f_{s1}^j,\cdots,f_{sk}^i-f_{sk}^j)] \tag{20}$$

ここでf_{sk}^iは，i番目のサンプル点の[0,1]にスケーリングされたk番目の目的関数値を表し，

$$f_{sk}^i=\frac{f_{k,i}-f_{k,\min}}{f_{k,\max}-f_{k,\min}} \tag{21}$$

である．また，式(21)中の記号は次の通りである．

$f_{k,i}$：i番目のサンプル点のk番目の目的関数値．

$f_{k,\max}$：k番目の目的関数の最大値．

$f_{k,\min}$：k番目の目的関数の最小値．

式(20)のパレート適合度は次の性質を持つ．

(PF1) 非劣解となるサンプル点は，パレート適合度の値が[1,2]となる．

(PF2) 非劣解でないサンプル点は，パレート適合度の値が[0,1)となる．また，パレート適合度の値が1に近いサンプル点は，非劣解が生成するパレートフロントに近いことを意味する．

(PF3) サンプル点がパレートフロント上に均一にばらついているとき，サンプル点のパレート適合度は1に近い値をとる．

本来，パレート適合度は進化的多目的最適化手法に用いることでその効力を発揮するもので，サンプル点を探索点として置き換えれば，非劣解であればパレート適合度は1以上となり，そうでない探索点は劣解であるということを意味している．このパレート適合度は，文献[16,17]においても各目的関数の応答曲面を作成した後の近似パレート最適解の探索に用いられているが，パレート適合度の性質を考慮すれば，多目的逐次近似最適化における追加サンプル点の指針が得られると考えた．具体的には，すべてのサンプル点に対しパレート適合度を計算し，設計変数空間における近似パレート最適解集合内に極小値を生成させるパレート適合関数と称する関数をRBFネットワークで作成し，パレート適合関数の最適解を追加サンプル点とする．サンプル点数がm個のとき，パレート適合度関数の作成方法は次のようになる．

(P-STEP1) すべてのサンプル点に対し，式(20)によりパレート適合度を計算する．

(P-STEP2) i番目のサンプル点に対し，次のようにしてパレート適合度を以下の式により修正する（修正パレート適合度）．

$$MG_i=\begin{cases}(1-G_i)+2\times G_{\max} & G_i<1\\ G_i & G_i\geq 1\end{cases} \tag{22}$$

ただし，

注2：　式(19)は，与えられたデータから半径値を簡易的に決めるものであるため，密度関数に影響を与える要素は式(4)の分子（すなわちサンプル点間の距離）となる．

$$G_{\max} = \max_{1 \le i \le m} G_i \tag{23}$$

である．修正パレート適合度をすべてのサンプル点に対し，計算する．

(P-STEP3) 修正パレート適合度をRBFネットワークの出力とする．すなわち，

$$\boldsymbol{y}^P = (MG_1, MG_2, \cdots, MG_m)^T \tag{24}$$

とする．

(P-STEP4) パレート適合度関数の重み $\boldsymbol{w}^P$ を

$$\boldsymbol{w}^P = (\boldsymbol{H}^T \boldsymbol{H} + \Lambda)\boldsymbol{H}^T \boldsymbol{y}^P \tag{25}$$

により求める．

(P-STEP5) パレート適合度関数 $PF(\boldsymbol{x})$ を最小化する．

$$PF(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{m} w_j^P h_j(\boldsymbol{x}) \to \min \tag{26}$$

そして，求めた最適解を追加サンプル点とする．

パレート適合度関数 $PF(\boldsymbol{x})$ の作成に関し，基底関数の半径には式(19)を用いる．パレート適合関数の例題を以下に示す．

【　例題　】

$$f_1(\boldsymbol{x}) = x_1^2 \to \min \tag{28}$$

$$f_2(\boldsymbol{x}) = (x_1 - 2)^2 \to \min \tag{29}$$

$$-3 \le \boldsymbol{x} \le 4 \tag{30}$$

この問題のパレート最適解集合 x_1^p は

$$0 \le x_1^p \le 2 \tag{31}$$

である．サンプル点が表1のよう与えられているとする．このときのパレート適合度と修正パレート適合度の値を併せて表1に示す．

Table 1 Sampling points and modified pareto fittness

No.	$\boldsymbol{x}$	$f_1(\boldsymbol{x})$	$f_2(\boldsymbol{x})$	G_i	MG_i
1	-2	4	16	0.555	3.257
2	0	0	4	1.028	1.028
3	0.5	0.25	2.25	1.109	1.109
4	2	4	0	1.406	1.406
5	3	9	1	0.938	2.874

このときのパレート適合関数の様相を図3に示す．なお図3中の●はサンプル点を表している．

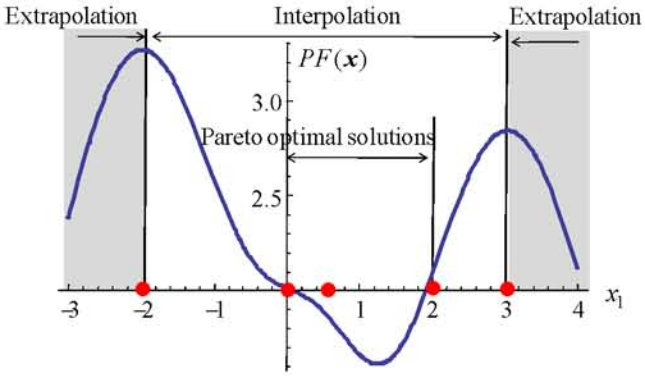

Fig.3 An illustrative example of pareto fittness function

図3からわかるように，内挿領域において，パレート適合関数はパレート最適解集合内に最小値を生成しており，また，サンプル点がパレート最適解集合から離れれば離れるほど，より大きな極大値を生成していることがわかる．よって，パレート適合関数の最適解を追加サンプル点とすれば，近似パレート最適解集合の精度は向上し，また多くのパレート最適解を得ることが期待できる．

3．3　サンプル点追加アルゴリズム　本論文で考える多目的逐次近似最適化のための基本的なサンプル点追加アルゴリズムを図4に示す（図1中のSampling strategyの詳細）．図4は，設計変数の数に応じて，密度関数によるサンプル点の追加数を変更させている点に注意が必要である，また int は四捨五入の関数を表す．サンプル点追加の流れは次のようになる．

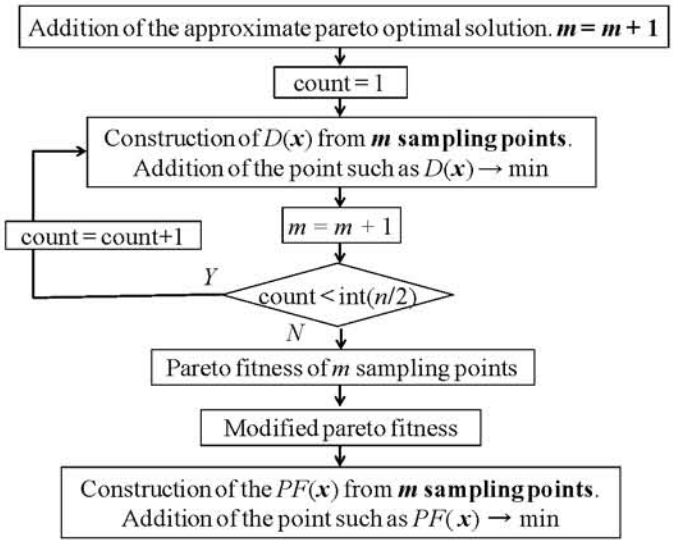

Fig.4 Proposed sampling algorithm for SAMOO

はじめに m 個のサンプル点から目的関数および制約条件を応答曲面近似し，理想点および希求水準を与え，近似パレート最適解を求める．得られた近似パレート最適解を追加サンプル点とし，サンプル点数を更新する．

次に密度関数を構築し，その最適解を追加サンプル点とし，設計変数空間におけるサンプル点の疎密をできる限り無くす．

最後に，パレート適合度および修正パレート適合度を計算し，パレート適合関数を構築する．パレート適合関数の最適解を追加サンプル点として，サンプル点追加アルゴリズムは終了する．なお，パレート適合関数の計算に際し，パレート適合度が1以上となるサンプル点が二つ以上となったときに，パレート適合関数を構築・最適化するものとする．これは，パレート適合度が1以上となるサンプル点が一つだけの場合，その点とパレート適合関数の最適解が一致し，新たなパレート最適解の発見を妨げるためである．

3．4　大域的最適化　満足化トレードオフ法にお

けるmin-max問題は多峰性問題であり，密度関数とパレート適合関数もサンプル点数が増加すると，多峰性関数になりやすい．そのため，これらの最適解探索には大域的最適化法が必要となる．本論文では，多点同時探索法の一つであるDifferential Evolution(DE)を用いる．DEの詳細については，例えば文献[22, 23]を参照されたい．

3.5 提案するシステムの特徴　本論文で提案する多目的逐次近似最適化システムの特徴をまとめると次のようになる．

（1）密度関数を構築・最適化して追加サンプル点を決める．密度関数により，サンプル点の疎な領域を確定的に見つけることができ，サンプル点の疎密が解消され，関数空間の大域的近似が期待できる．

（2）パレート適合関数を構築・最適化して追加サンプル点を決める．これにより近似パレート最適解集合内にサンプル点が配置され，近似パレート最適解集合の精度向上が期待できる．特にパレート適合度に関しては，従来の研究[16, 17]とは全く異なる使い方をしており，パレート適合度の特徴を踏まえ，パレート適合関数を構築している．

（3）希求水準法を用いているため，システム全体として眺めたときに，意思決定が自然と含まれている．ただし，サンプル点の追加を行いつつ目的関数の希求水準を変更すると，サンプル点配置が希求水準に大きく影響されるため，パレート最適解集合の精度を効率的に高めることは困難である．よって，サンプル点の追加が終了した後，新たな希求水準を代入して目的関数間のトレードオフ分析を行うことが重要である．

4. 数値計算例

本論文で提示するサンプル点配置戦略の有効性を数値計算例を通じて検討する．実際の設計では，目的関数や制約条件を設計変数の陽な形で表すことが困難である場合が多いが，本論文で提示する方法の基礎的検討を行うため，数値計算例では，関数形が設計変数の陽な形で与えられているものを扱う．また，設計者自身が満足した段階でシステムを終了させることも可能であるが，数値計算例ではサンプル点数があらかじめ指定した最大サンプル点数$m_{\max}$を超えたときに終了するものとした．最適解を求めるために用いたDEでは，探索点数を30，最大探索回数を500とした．

4.1 パレート最適解集合が連続の場合　式(28), (29)で与えられる問題を考える．ただし，側面制約条件は次のようにする．

$$-5 \le x_1 \le 5 \tag{32}$$

ここでは，密度関数やパレート適合関数によって，どのようにサンプル点が追加されるかを可視化する．初期サンプル点を次のように与える．

$$x_1 = -5 \quad x_2 = -3 \quad x_3 = 5 \tag{33}$$

また各目的関数の理想点f_1^I，f_2^Iと希求水準f_1^A，f_2^Aを次のように与えたとする．

$$f_1^I = f_2^I = 0 \tag{34}$$

$$f_1^A = f_2^A = 1 \tag{35}$$

このときのパレート最適解は$x_1^p = 1$である．最大サンプル点数を$m_{\max} = 20$とした．

この問題設定は，パレート最適解集合内にサンプル点が存在しない状態から，パレート最適解集合を見つけるという状態を想定している．以下では，サンプル点の追加の詳細について記述する．

サンプル点数3のとき：　近似パレート最適解$\tilde{x}_1^p$は$\tilde{x}_1^p = -1.453$となる．これを追加サンプル点とする．よって，サンプル点総数は4となる．

サンプル点数4のとき：　密度関数を作成し，最適化すると，密度関数の最適解$x_1^D = 1.304$を得る（図5参照）．これを追加サンプル点とする．よって，サンプル点総数は5となる．

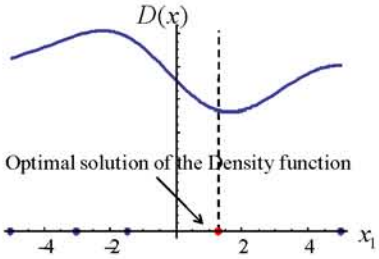

Fig.5 Density function at $m = 4$

サンプル点数5のとき：　パレート適合度が1以上となる点が1つであるため，パレート適合度関数は作成せずに，希求水準に対応する近似パレート最適解$\tilde{x}_1^p$を求める．近似パレート最適解は$\tilde{x}_1^p = 0.635$となり，これを追加サンプル点とする．これでサンプル点総数は6となる．

サンプル点数6のとき：　密度関数を構築し，最適化すると，密度関数の最適解$x_1^D = 2.810$を得る（図6参照）．これを追加サンプル点とする．よって，サンプル点総数は7となる．

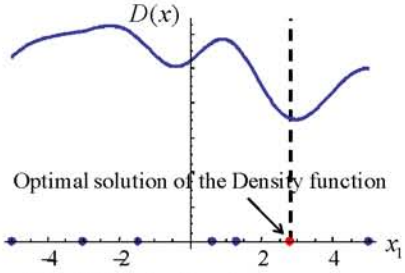

Fig.6 Density functio at $m = 6$

サンプル点数7のとき：　パレート適合度が1以上となるサンプル点が2つ以上あるため，パレート適合関数を作成・最適化する(図7参照)．パレート適合関数の最適解 x_1^{PF} は $x_1^{PF}=0.995$ となり，これを追加サンプル点とする．よって，サンプル点総数は8となる．

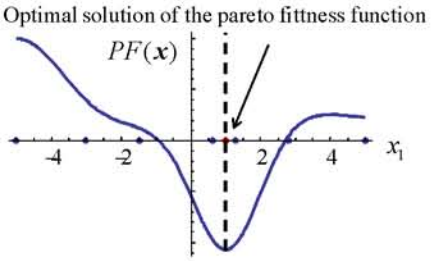

Fig.7 Pareto Fitness function at $m=7$

これらの操作を繰り返すことにより得られたパレート最適解およびパレート最適値を表2に示す．またサンプル点数が20となったときのサンプル点配置状況を図8に示す．図8中の•はサンプル点を表している．

Table 2 Pareto optimal solution and pareto optimal value

x_1^p	$f_1(x_1^p)$	$f_2(x_1^p)$
0.038	0.001	3.850
0.140	0.020	3.460
0.176	0.031	3.328
0.218	0.048	3.175
0.328	0.108	2.795
0.537	0.288	2.141
0.628	0.395	1.881
0.635	0.403	1.864
0.639	0.409	1.852
0.995	0.991	1.009
1.157	1.339	0.710
1.304	1.701	0.484
1.979	3.917	0.000

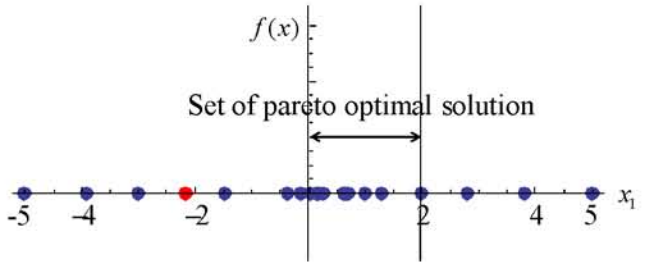

Fig.8 Distribution of the sampling points at $m=20$

表2および図8より，多くのパレート最適解を得ていることがわかる．

4.2　パレート最適解集合が不連続の場合　次の問題を考える．

$$f_1(\boldsymbol{x})=x_1 \rightarrow \min \tag{36}$$

$$f_2(\boldsymbol{x})=1+x_2^2-x_1-0.1\sin(5\pi x_1) \rightarrow \min \tag{37}$$

$$0 \le x_1 \le 1,\quad -2 \le x_2 \le 2 \tag{38}$$

この問題のパレートフロントを図9に示す．図9の横軸から，この問題のパレート最適解集合は分離していることがわかる．この問題に対して，各目的関数の理想点および希求水準をそれぞれ次のように与えた．

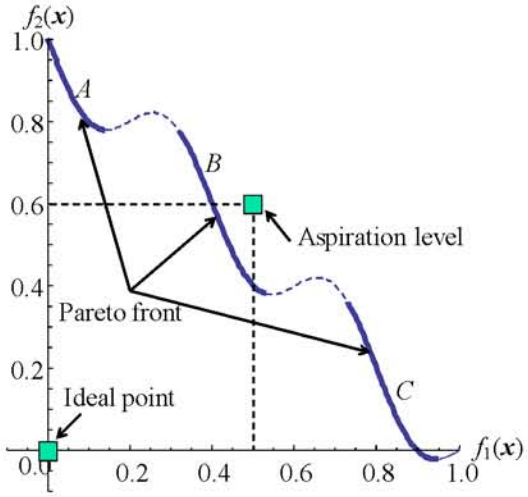

Fig.9 Separete pareto front of example 4.2

$$f_1^I=f_2^I=0 \tag{39}$$

$$f_1^A=0.5,\quad f_2^A=0.6 \tag{40}$$

初期サンプル点数を10として，ラテン超方格実験(Latin Hypercube Design:LHD)により決め，最大サンプル点数を $m_{\max}=50$ とした．設計変数空間における初期サンプル点を図10中の•で示す．

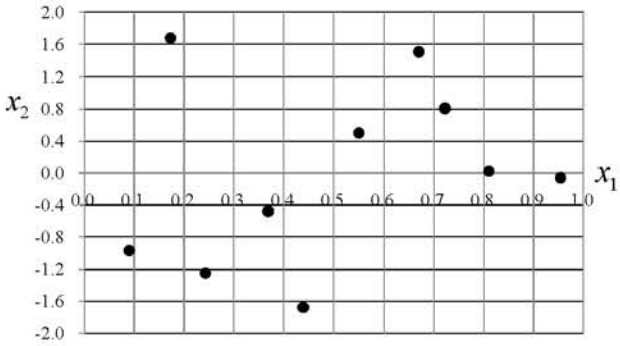

Fig.10 Initial sampling points by the LHD

はじめに述べた通り，多目的逐次近似最適化で期待したいこととして，希求水準に対応する精度の高い近似パレート最適解を得るのと同時に，近似パレート最適解集合をも得ることであった．そのため，この問題設定では，図9中B部の一部のパレート最適解およびパレート最適値が見つかればよいのだが，可能であればA部やC部も見つかることが望ましい．本論文で提示したシステムによって，パレート適合度が1以上となった得られたサンプル点を図11中の•で示す．

図11より，希求水準に対応するパレート最適値がいくつか得られているのと同時に，図9中のA部やC部のパレート最適値もいくつか得られていることがわかる．これは本論文で提示したシステムによって，ただ一つのパレート最適解を得るだけでなく，複数のパレート最適解が得られていることを意味している．

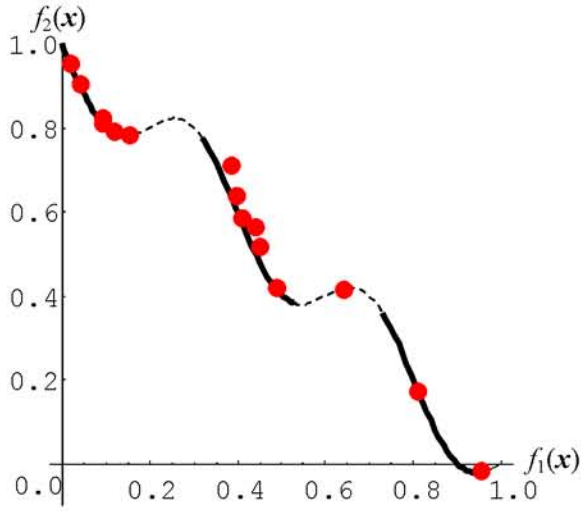

Fig.11 Pareto optimal value by the proposed SAMOO system

5. 考察

本章では，密度関数およびパレート適合関数を用いたサンプル点配置戦略について考察する．

密度関数は，設計変数空間にサンプル点の疎な領域に極小値を生成するため，密度関数の最適解を追加することにより，設計変数空間におけるサンプル点の疎密を解消することが可能となる．

一方パレート適合関数は，パレート適合度を用いて，パレート最適解集内に極小値を生成する．パレート適合度を用いているため，必ずしも厳密な意味（数理的な側面）でのパレート最適解集合内に極小値を生成することはできない．しかしながら，数値計算例からわかる通り，厳密ではないものの，与えられたサンプル点から近似パレート最適解集合を見つけることは可能である．

これら両関数を用いることにより，4.2節で示したパレート最適解集合が分離しているような問題においても，ある程度は近似パレート最適解集合が得られることがわかる．特に，パレート最適解集合が分離しているような場合は，パレート適合関数の影響よりもむしろ密度関数の影響が大きく，結果的に分離したパレート最適解集合を見つけることができている．しかし，これは偶然見つかったわけではなく，設計変数空間の疎な領域を確定的に見つけている結果である．

実務レベルの多目的最適化問題では，はじめからパレート最適解集合が判明していることはなく，いくつかのシミュレーション結果や実験結果から一度応答曲面を作成し，様々な方法によりサンプル点を追加して徐々に近似パレート最適解集合を見つけることが多いが，本論文で提示した密度関数とパレート適合関数の両関数を併用することにより，効率的に近似パレート最適解集合を見つけることが可能であると思われる．

6. 結言

本論文では，RBFネットワークと満足化トレードオフ法を用いた多目的逐次近似最適化に関する基礎的な検討を行った．逐次近似最適化では，サンプル点の配置戦略が極めて重要であり，本研究で提示したサンプル点配置の戦略は，設計変数空間におけるサンプル点の疎な領域を確定的に見つける密度関数と，パレート適合度を用いて近似パレート最適解集合付近に新たなサンプル点を追加するパレート適合関数を用いた方法である．パレート適合度を修正した修正パレート適合度をRBFネットワークの出力とすることにより，パレート適合度が1以上となるサンプル点周辺に新たなサンプル点を追加することが可能である．本論文で提示したシステムでは，希求水準という意思決定を定量化した要素が取り入れられているため，実務レベルの多目的最適設計問題に対して，有効であると考えている．また，密度関数とパレート適合関数を併用することにより，パレート最適解集合が分離しているような問題に対しても，効率的にパレート最適解集合を見つけることができることを簡単な数値計算例を通じて示した．

本研究を遂行するにあたり，適切なご助言を頂いた山川宏先生（早稲田大学），杉本博之先生（北海学園大学），中山弘隆先生（甲南大学）に感謝申し上げる．

付　録

本論文では，目的関数，密度関数およびパレート適合関数はすべてRBFネットワークで作成しているが，密度関数やパレート適合関数の極小値を所望の領域に生成させるためには，式(4)中の基底関数の半径r_jを適切に決めなければいけない．半径r_jの決定はすべて式(19)を用いているが，その際は適応的スケーリングと称する方法により，一旦設計変数をスケーリングしておき，スケーリングされた設計変数空間において，半径を算出している．以下では，適応的スケーリングのアルゴリズムについて，簡単に記述する．適応的スケーリングの背景等については，文献(24)を参照されたい．

(STEP1)スケーリング係数$s(>0)$を設定．

(STEP2)式(A1)による設計変数のスケーリング．

$$X_I = \frac{x_I - x_I^L}{x_I^U - x_I^L} \times s \quad I = 1, 2, \cdots, n \tag{A1}$$

(STEP3)スケーリングされた設計変数空間において，式(19)による半径値を算出．

(STEP4)半径値の最小値 $r_{\min}$

$$r_{\min} = \min_{1 \le j \le m}\{r_j\} \qquad \text{(A2)}$$

を見つける．$r_{\min} \le 1$であれば，

$$s = \alpha \times s \quad (\alpha > 1) \qquad \text{(A3)}$$

として，STEP2へ戻る．そうでなけば，終了．

本論文では，初期スケーリング係数を $s = 1$，式(A3)中のαを$\alpha = 1.2$としている．

参考文献

(1) Nakayama, H., Arakawa, M., Sasaki, R., Simulation-Based Optimization Using Computational Intelligence, *Optimization and Engieering*, Vol. 3, (2002), pp.201-214.

(2) Simpson, W., Mauery, T.M., Korte, J.J., Mistree, F., Kriging Models for Global Approximation in Simulation-Based Multidisciplinary Design Optimization, *AIAA Journal*, Vol.39, No.12, (2001), pp.2233-2241.

(3) Rodriguez, J.F., Perez, V.M., Padmanabhan, D., Renaud, J.E., Sequential approximate optimization using variable fidelity response surface approximations, *Structural & Multidisciplinary Optimization*, Vol.22, (2001), pp.24-34.

(4) Martin, J.D., Simpson, W., Use of Kriging Models to Approximate Deterministic Computer Models, *AIAA Journal*, Vol.43, No.4, (2005), pp.853-863.

(5) Wang, G.G., Shan, S., Review of Metamodeling Techniques in Support of Egnieering Design Optimization, *Trans. of ASME, J. of Mechanical Design*, Vol. 129, (2007), pp.370-380.

(6) Sharif, B., et. al., Mode Pursuing Sampling Method for Discrete Variable Optimization on Expensive Black-Box Functions, *Trans. of ASME, J. of Mechanical Design*, Vol. 130, (2008), pp.021402-1-021402-11.

(7) Wang, G.G., Adaptive Response Surface Mehod Using Inherited Latin Hypercube Design Points, *Trans. of ASME, J. of Mechanical Design*, Vol. 125, (2005), pp.210-220.

(8) Shao, T., Krishnamurty, S., A Clustering-Based Surrogate Model Upadating Approach to Simulation-Based Engineering Design, *Tras. of ASME, J. of Mechanical Design*, Vol. 130, (2008), pp.041101-1-041101-13.

(9) Muller A. A., Messac, A., Extended Radial Basis Functions: More Flexible and Effective Metamodeling, *AIAA Journal,* Vol.43, No.6, (2005), pp.1306-1315.

(10) Colaco, M.J., Dulikravich, G.S., A Hybrid RBF Based Method for Highly Multidimensional Response Surfaces Using Scarce Data Sets, 12th *AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference*, (2008), AIAA 2008-5892

(11) Leps, M., Kucerova, A., Evolutionary Optimization of Multimodal Functions Using Radial Basis Function Networks, 12th *AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference*, (2008), AIAA 2008-5922

(12) Moral, R.J., Dulikravich, G.S., A Hybridized Self-Organizing Response Surface Methodology, *12th AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference*, (2008), AIAA 2008-5891.

(13) Stander, N., Goel, T., Metamodel Sensitivity to Sequential Adaptive Sampling in Crashworthiness Design, 12th *AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference*, (2008), AIAA 2008-5933.

(14) Kitayama, S., Arakawa, M., Yamazaki, K., Global Optimization by Generalized Random Tunneling Algorithm (5th report: Approximate Optimization Using RBF Network), *Trans.of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series C*, Vol.73, No.729, (2007), pp.1299-1306.

(15) Todoroki, A., Kawakami, Y., Optimal Design of Wind Turbine Blade of CF/GF Hybrid Composites, *Trans. of JSCES*, Paper No. 20080012.

(16) Shan, S., Wang, G.G., An Efficient Pareto Set Identification Approach for Multiobjective Optimization on Black-Box Functions, *Trans. of ASME, J. of Mechanical Design*, Vol. 127, (2005), pp.866-874.

(17) Wilson, B., Cappelleri, D., Simpson, W., Frecker, M., Efficient Pareto Frontier Exploration Using Surrogate Approximations, *Optimization and Engneering*, Vol.2, (2001), pp.31-50.

(18) Li, M., Li, G., Azarm, S., A Kriging Metamodel Assisted Multi-Objective Genetic Algorithm for Design Optimization, *Trans. of ASME, J. of Mechanical Design*, Vol. 130, (2008), pp.031401-1-031401-10.

(19) Yang, B.S., Yeun Y.S., Ruy, W.S., Managing Approximation Models in Multiobjective Optimization, *Structural & Multidisciplinary Optimization*, Vol.24, (2002), pp.141-156.

(20) Yun, Y., Nakayama, H., Yoon, M., Sequential Approximation Methd in Multi-Objective Optimization by Using Computational Intelligence, *SICE Journal of Control, Measurement, and System Integration*, Vol.43, No.8, (2007), pp.672-678.

(21) Shirakawa, M., Arakawa, M., Nakayama, H., Intelligent Start-Up Schedule Optimization System for a Thermal Power Plant, *Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing*, Vol. 1, No. 5, (2007), pp.690-705.

(22) Storn, R., Price, K.V., Differential Evolution -a simple

and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces- *J. of Global Optimization*, Vol.11, (1997), pp.341-359.

(23) Price, K.V., Storn, R., Lampinen, J.A., *Differential Evolution -A Practical Approach to Global Optimization-*, (2006), Springer.

(24) Kitayama, S., Arakawa, M., Yamazaki, K., Sequential Approximate Optimization Using RBF network, *Trans.of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series C*, Vol.76, No.768, (2010), pp.1978-1987.

.