

進化型多目的最適化の現状と課題

佐藤 寛之, 石渕 久生

進化計算による多目的最適化には、パレートフロントを近似する解集合をアルゴリズムの1回の実行で獲得できる利点がある。進化型多目的最適化に関する研究は、この20年ほどの間に活発化し、産業応用も盛んだが、現在、一つの壁に直面している。最適化する目的の数が増加すると、途端に最適化が困難になるのである。これを打破するため、四つ以上の目的の同時最適化を多数目的最適化と呼び、目的の数が増加した場合に対応するための研究が活発に行われ、大きな注目を集めている。本稿では、進化計算による多数目的最適化の難しさ、それに対する現在の取り組みと、残された課題について述べる。

キーワード：多目的最適化, 多数目的最適化, 進化計算

1. はじめに

実世界の最適化問題の多くは、複数の目的が内在する多目的最適化問題である。自動車の設計でいえば、「加速性能と燃費性能の両方の最大化」を追求することに例えられる。加速性能を追求すれば、燃費性能は落とさざるを得ない。燃費性能を追求すれば、加速性能は落とさざるを得ない。このように、実世界の最適化問題で考慮する複数の目的は、相反の関係になることが多い。そのため、多目的最適化問題では、すべての目的に最適唯一の最適解は存在しない。その代わり、目的間の最適なトレードオフであるパレートフロントを形成するパレート最適解集合が存在する。

多目的最適化問題におけるパレート最適解集合を獲得しようとする手段として、進化計算が注目されている [1, 2]。進化計算は、遺伝的アルゴリズムや進化戦略に始まり、差分進化、粒子群最適化、蟻コロニー最適化、人工蜂コロニーアルゴリズム、カッコウ探索など、解集団に基づく確率的な多点探索法の総称である。進化計算は、古くから単一目的最適化の手段として研究されてきた。進化計算では、多点探索により、パレートフロントを近似する解集合がアルゴリズムの1回の実行で獲得されるため、特に多目的最適化に適した手法である。また、進化計算が取り扱える最適化問題の幅広さや、実問題と多目的最適化問題のモデルの近さ

から、進化計算による多目的最適化は、産業応用との親和性も高い [3]。このような、学術的背景と社会的期待が相まって、進化型多目的最適化は、進化計算の研究の中で、最も注目されるテーマの一つである。

進化計算による多目的最適化は、この20年ほどの間に盛んに研究されてきた。1985年のSchafferによるVEGA (Vector Evaluated Genetic Algorithm) [4]の提案に始まり、Deb et al.によるNSGA-II (Fast Elitist Non-dominated Sorting Genetic Algorithm) [5]は、最も有名なアルゴリズムとして応用分野で頻繁に利用されている。このように、進化型多目的最適化は、多目的最適化問題の一部に対しては成熟しつつある。しかし、その適用可能範囲を拡大させるためには、解決すべき課題がいくつか残されている。その一つが多数目的最適化である。最も代表的なNSGA-IIは、二つか三つの目的を有する多目的最適化問題に対しては良好な最適化性能を示すものの、さらに最適化すべき目的が増えると、途端に最適化性能が悪化する。実世界の最適化問題に潜在する多数の目的のことを考えれば、先に例を挙げた自動車の設計なら、加速性能と燃費性能さえ高めればよいということにはなりえず、登坂性能、最高速度性能、制動性能、旋回性能、操舵性能、乗り心地性能、騒音性能、衝突安全性能など [6]、多数の目的を同時に最適化しなければならないのは当然である。これに対して、代表的なNSGA-IIでいえば、加速性能と燃費性能、登坂性能までは同時に最適化できるものの、さらに最高速度性能を考慮した途端に最適化が機能しなくなる状態が起きると考えればよい。この問題を打破し、これまで以上に多数の目的を同時に最適化できるようになれば、進化計算の適用可能範囲がさらに拡大し、社会的な波及効果が高まることは間違いない。このような背景から、多目的最適化問

さとう ひろゆき

電気通信大学大学院情報理工学研究科
〒182-8585 東京都調布市調布ヶ丘 1-5-1

h.sato@uec.ac.jp

いしぶち ひさお

大阪府立大学大学院工学研究科
〒599-8531 大阪府堺市中央区学園町 1-1
hisaoi@cs.osakafu-u.ac.jp

題 (Multi-objective optimization problem) の中で、四つ以上の目的が内在するものを多数目的最適化問題 (Many-objective optimization problem) と呼び [7], 多数目的最適化における課題に取り組む研究を明示的にわけて議論する慣習が存在する。

本稿では、進化計算による多数目的最適化の難しさ、それに対する現状と課題について述べる。

2. 進化型多目的最適化

2.1 多目的最適化問題

多目的最適化問題は、次式で定義される。

$$\begin{cases} \text{Minimize/Maximize } f_m(\mathbf{x}), & (m = 1, 2, \dots, M), \\ \text{Subject to} & g_j(\mathbf{x}) \geq 0, (j = 1, 2, \dots, J), \\ & h_k(\mathbf{x}) = 0, (k = 1, 2, \dots, K). \end{cases} \quad (1)$$

解空間 \mathcal{S} の要素である解 $\mathbf{x} (\in \mathcal{S})$ に対して、 g_j に基づく不等号制約と h_k に基づく等号制約、 M 種類の目的関数 f_m が存在する。多目的最適化問題は、制約条件を満たす実行可能解集合 $\mathcal{F} (\subseteq \mathcal{S})$ の中で、 M 種類の目的関数を最小化もしくは最大化する \mathbf{x} を見いだす問題である。目的関数の間にトレードオフの関係があると、すべての目的関数を同時に最小化または最大化できる単一の最適解は存在しない。多目的最適化問題では、目的関数の間の最適なトレードオフを表す最適解集合を獲得することがゴールになる。

解の優劣を決定するパレート支配 (優越) について述べる。最小化問題において、二つの解 \mathbf{x} と \mathbf{y} が次式を満たすとき、 \mathbf{x} は \mathbf{y} を支配 (優越) するという。

$$\forall m : f_m(\mathbf{x}) \leq f_m(\mathbf{y}) \wedge \exists m : f_m(\mathbf{x}) < f_m(\mathbf{y}) \quad (m = 1, 2, \dots, M) \quad (2)$$

最大化問題の場合、式 (2) の不等号を逆にする。ある解 \mathbf{x} を支配する解が実行可能解集合 \mathcal{F} に存在しない場合、 \mathbf{x} をパレート最適解といい、目的関数間の最適なトレードオフの一点に対応する。パレート最適解集合は、目的関数空間ではパレートフロントと呼ばれ、最適なトレードオフを示す曲線や曲面となる。

単一のパレート最適解を獲得しようとすることも多目的最適化と呼ばれるが、進化計算による多目的最適化の研究のほとんどは、パレートフロント全体を近似する解集合を一括獲得しようとする試みである。進化計算は近似解法であるため、パレート最適解集合を獲得できる保証はない。そのため、解探索の過程で得られた解集合の中から、パレート支配されない非劣解集合を最適化の結果として出力することが多い。

2.2 NSGA-II

多目的最適化のための進化計算として代表的な NSGA-II [5] を紹介する。NSGA-II は、サイズ $2N$ の全解集団 \mathcal{R} を利用する。各世代において、全解集団 \mathcal{R} をフロントと呼ばれる解集合 $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2, \dots$ に分類することで、解の優劣を決定する。まず、全解集団 \mathcal{R} から、支配されない解集合 \mathcal{F}_1 を取り出す。残った解集団 $\mathcal{R} \setminus \mathcal{F}_1$ から、支配されない解集合 \mathcal{F}_2 を取り出す。このように、支配されない解集合 \mathcal{F}_n を解集団 $\mathcal{R} \setminus \{\mathcal{F}_1 \cup \mathcal{F}_2 \cup \dots \cup \mathcal{F}_{n-1}\}$ から取り出す操作を、すべての解がいずれかのフロントに分類されるまで繰り返す。フロント番号 n が小さいほど、パレートフロントに近いほど、優れた解集合と判断する。次に、フロント番号 n が小さい順に、 N 番目までの解を親集団 \mathcal{P} として選択する。同一フロント内の解の優劣は、目的関数空間における解の分布の粗密度を計測する混雑距離を考慮する。次に、親集団 \mathcal{P} から取り出した親に対して、交叉と突然変異を施して子集団 \mathcal{Q} を生成する。最後に、親集団 \mathcal{P} と子集団 \mathcal{Q} を合わせて次世代の全解集団 \mathcal{R} を作る。世代ごとに上記の手順を繰り返すことによって進化させた解集団から支配されない非劣解集合を取り出し、パレートフロントを近似する。

アルゴリズムの詳細は、文献 [5] と著者らによる実装 [8] を参照されたい。

2.3 多数目的最適化と進化計算

代表的な NSGA-II による多目的最適化は、一般的に、目的数 M が 2 か 3 の問題に対して良好に機能するが、さらに目的数 M が増加すると、最適化が困難になる [7]。以降、 $M \geq 4$ の目的が内在する多数目的最適化において、進化計算が直面するいくつかの難しさ、現状の取り組みと残された課題について述べる。

3. パレートフロントへの収束性

3.1 難しさ

1990 年代後半から 2000 年前後に提案された NSGA-II を含むアルゴリズムは、パレート支配によって解の優劣を決定するものが多い。パレート支配には、各目的関数値の取りうる範囲の差異を考慮しなくてよいところ、解集団内の相対比較によって解の優劣が決まるところや、目的関数値の重み付き和 (Weighted Sum) を利用する方法 [9] などが不得手とする非凸型のパレートフロントをも近似可能な非劣解集合を獲得できるところに利点がある。そのため、パレート支配への依存度が高いアルゴリズムが数多く提案されてきた。しかし、これが多数目的最適化を困難にする原因になる。

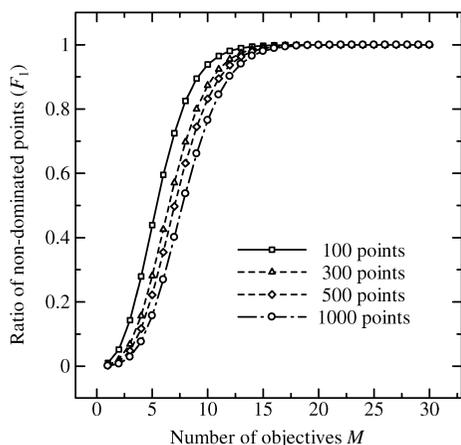


図1 支配されない点の集合が占める割合の増加

二つの解 \boldsymbol{x} と \boldsymbol{y} について、式 (2) に示すパレート支配は、 \boldsymbol{x} が \boldsymbol{y} を支配するか、しないかだけを決める。支配の程度などの精緻で定量的な優劣はつかない。また、式 (2) を見ると、目的数 M の増加に伴って、 \boldsymbol{x} が \boldsymbol{y} を支配する条件が厳しくなることがわかる。そのため、多数目的最適化では、解集団中の多くの解が支配されない関係になり、解の優劣がつきにくくなる。

$[0, 1]^M$ の空間上のランダムな点の集合のうち、支配されない点集合の割合を図1に示す。目的数 M の増加に対して、支配されない割合が著しく増加し、 $M = 20$ 目的では、ほぼすべての解が支配されない関係になる。点集合サイズの増加は、支配されない割合をわずかに低下させるものの、目的数 M の増加による影響が大きいため、解の優劣決定を促す解決策にならないことがわかる。このように、目的数 M の増加によって解の優劣がつきにくくなる。その結果、進化計算の根幹である解の取捨選択が機能しなくなり、パレートフロントへ解集団の収束性が著しく低下する。

3.2 現在の取り組み

パレートフロントへ解集団の収束性を高めるためには、目的数が多い場合であっても、解の優劣を精緻に決定する仕組みが必要である。これまでに検討されてきたいくつかのアプローチを紹介する。

3.2.1 最適化する目的数の削減

多目的最適化問題に内在するすべての目的関数が相反の関係にならない場合において、目的関数値の関係性を考慮して、相関の高い目的を最適化の対象から外したうえで、従来の NSGA-II などの目的数が少ない場合に機能するアルゴリズムを適用するアプローチがある [10, 11]。たとえば、PCA-NSGA-II [10] は、主成分分析を用いて相反関係が強い一部の目的を見いだ

したうえで、NSGA-II を適用する。

3.2.2 パレート支配の拡張

パレート支配の概念を拡張して、解集団を精緻に優劣づけするアプローチがある [12–15]。解の支配領域制御法は、目的関数空間を変形させた空間で、解のパレート支配関係を算出することで、より細やかな解のランキングを構築し、多数目的最適化であってもパレートフロントに対する解集団の収束性を高めることができる [12]。この方法は、パレート支配に基づくアルゴリズムへ比較的容易に組み込むことができるため、これまでのアルゴリズムを多数目的最適化のために活用できる利点があるが、目的関数空間を変形させた空間で最適化するため、元の目的関数空間におけるパレートフロントの全域を近似できない恐れがある。

3.2.3 パレートフロント近似に対する貢献度の活用

パレートフロントの近似に対する解の貢献度を算出し、細やかに解を優劣づけするアプローチがある [16–19]。解集合によるパレートフロントの近似性能を計測する評価尺度として、Hypervolume (HV) がある [20]。HV は、獲得した解集合が目的関数空間に作る超体積であり、値が大きい解集合ほどパレートフロントの近似性能が良好と判断する。SMS-EMOA [17] は、それぞれの解が解集合中に存在するときとしないときの HV の差分を解の評価とするアルゴリズムで、良好な最適化性能を示すことが知られている。ただ、目的数の増加に伴って、HV を算出する計算コストが指数関数的に増加するところに難点があり、モンテカルロ法によって推定した HV を活用する HypE [18] も提案されている。また、解集合を評価するほかの指標も利用可能で、R2 を利用する MOMB I [19]、IGD や IGD⁺ [21] を利用するアルゴリズムも提案されている [22, 23]。

3.2.4 パレートフロントの分解

パレートフロントを重みベクトル群によって分解し、各重みベクトルが指定するパレートフロントの部位の近似を試みるアプローチがある [24–27]。このアプローチのポイントは、パレートフロントの近似すべき領域が重みベクトル群によって絞り込まれるところにある。重みベクトル群が指定する位置から遠く離れた解を低く評価することで、解の優劣を決定しやすくする。さきかげとなったアルゴリズムは、C-MOGA [24] である。その後、多数目的最適化を標的として、MSOPS [25] が提案された。NSGA-II と並んで代表的な MOEA/D [26] は、近年、多数目的最適化での有用性が頻繁に報告されている [28, 29]。これらは、解の目的関数値ベクトルを重みベクトルによってスカラー値化して解の優劣を決

定する。重み付きチェビシェフ関数 [30, 31] などの導入により、1990 年代前半に用いられた重み付き和 [9] では困難な非凸型のパレートフロントの近似も可能になった。NSGA-III [27] は、パレート支配とパレートフロントの分解を組み合わせた方法である。NSGA-II との主な違いは、混雑距離の代わりに、重みベクトルと同等の役割を担うリファレンスラインと解の直交距離を用いることで、パレートフロント全体を一様に近似するところにある。

3.3 残された課題

多数目的最適化におけるパレート支配に基づくアルゴリズムの問題が認識され始めてから、上述のよういくつかのアプローチが検討されてきたが、現在、最後に紹介したパレートフロントの分解アプローチを採用する研究が増加傾向にあり、本命になる可能性がある。代表的な MOEA/D や NSGA-II の著者らが多数目的最適化向けに提案した NSGA-III に追従して、それらを基礎とする MOEA/DD [32]、UMOEAD [33]、 θ -NSGA-III [34] などが続々と提案されている。しかし、分解アプローチには課題がある。これらのアルゴリズムでは、重みベクトル群を用いてパレートフロント全体の一様な探索が行われるが、パレートフロントの凹凸性や連続性などにより、適切な重みベクトル群の配置は異なる。重みベクトル群を適応的に変更する検討 [27, 35–37] が始まっているが、その成熟化が分解アプローチの発展に必要不可欠である。

4. 広大な変数空間の探索

4.1 難しさ

単一目的最適化で求めるべきは変数空間における一点のみだが、多目的最適化で求めるべきは変数空間における複数点である。もちろん問題の特徴には依存するものの、一般的に多目的最適化では、単一目的最適化より変数空間の広域を探る必要があるため、探索の難しさが増す。また、解集団サイズより多くのパレート最適解集合が存在する場合がほとんどであるため、どのパレート最適解でも見つければよいというわけではなく、パレートフロント全体を可能な限り均一に近似可能な部分集合を見いださなければならない難しさもある。さらに、単一目的最適化の場合、解集団中の一つの解が見いだした最適値を維持する役目を担い、残りの解は新たな解を生成する情報源としての役目さえ担えばよいが、多目的最適化の場合は、解集団中のすべての解がパレートフロントの各部位を近似する役目を担い、さらに新たな解を生成する情報源としての役

目も同時に担わなければならない。目的数の増加に伴い、変数空間におけるパレート最適解集合の分布範囲は一般的に拡大するため、多数目的最適化では、これらの難しさに拍車がかかる。

4.2 現在の取り組み

上述のような一般的な難しさはあるものの、問題ごとの特徴に依存することもあり、多数目的最適化のための解の生成法に関する研究は少ないのが現状である。

離散問題においては、ナップザック問題 [20] を取り上げ、極めて小さい 10–20 ビットの変数空間を全探索して獲得したパレート最適解集合の変数多様性が、目的数の増加に伴って著しく高まることが報告されている [38]。これにより、目的数の増加に伴って、変数空間の広範囲を探索する必要性が示された。また、目的数が少ない場合、目的関数空間に着目し、目的関数値が近い解を親とする方法 [26, 39] が最適化性能を高めることが知られてきたが、目的数が多い場合には、変数空間に着目し、親から子への変異量を直接抑制しながら解探索する方法が、目的関数空間に着目する方法より高い最適化性能を示すことが明らかにされた [38, 40]。

連続問題においては、DTLZ [41]、WFG [42] といった頻繁に用いられるテスト問題を取り上げ、Simulated Binary Crossover (SBX)、Polynomial Mutation [43]、差分進化 [44, 45] をランダムに切り替えて併用する方法の有用性が報告されている [46]。ただ、注目すべきは、ここで採用されたパラメータである。SBX には、変数空間における親の位置に対する子の分布確率を決定するパラメータ η_c が必要である。 η_c が大きいほど、親の近くに子が生成される。これまで多目的最適化に採用されてきたのは $\eta_c = 15$ 程度だったが、多数目的最適化のための文献 [34] では $\eta_c = 30$ 、NSGA-III の文献 [27] では $\eta_c = 20$ が採用されている。すなわち、親の近くに子を生成しやすくしている。また、差分進化における交叉率 C_r に関する実験結果から、目的数の増加に伴い、小さな C_r によって親から子への変異を抑制した場合に良好な最適化性能を示すことも報告されている [46]。

4.3 残された課題

上述の研究結果を単純にみれば、多数目的最適化では、離散・連続問題ともに、親から子への変異量を小さくすればよいという知見として捉えることができる。しかし、別の観点から見れば、ほかの親の変数情報を取り込んでもよい子を生成できないため、少なくとも親になれる悪くない変数値を少しだけ変更して子にしたほうがマシな状況、すなわち、交叉が効いていない

状況とも捉えることができる。このように、現在の多数目的最適化では、進化計算の特徴である解集団の変数情報を活用した子生成が機能していない恐れがある。

考えられる原因は、解集団内の変数情報の著しい多様化にある。解集団中のそれぞれの解は、多数次元のパレートフロントの一部を近似するために、進化とともに特殊化していく。それぞれの解は、パレートフロントの一部を近似する役目を果たそうとするがゆえ、パレートフロントのほかの部位の最適性を高める変数の情報源としての役目を果たすことが次第に困難になっていく。その結果として、それぞれの解は、ほかの解の変数情報を手がかりに子生成するより、自身の変数値を少しずつ変更したものを子にするほうが、せっかく獲得した変数値を破壊することなく堅調に最適性が高まってよいという具合になる。

特に多数目的最適化では、変数空間の広範に解集団が分布するため、これまでとは異なる子の生成方法が今後必要になると考えられる。

5. 高次元パレートフロントの近似

5.1 難しさ

目的数の増加に伴って、パレートフロントを精緻に近似することの難しさが増す。2 目的問題の場合、1 次元の線状のパレートフロントを点の集合で近似する。3 目的問題の場合、2 次元の面状のパレートフロントを点の集合で近似する。M 目的問題の場合、M-1 次元のパレートフロントを点の集合で近似することになる。このように、目的数の増加に伴って、パレートフロントの次元数も増加するが、それを近似しようとするのは、いずれの目的数でも点の集合であり、それは解集団でしかない。一般的な進化計算で使用される解集団サイズが 10 から 1,000 の規模であることを考えると、3 目的問題における 2 次元の面状のパレートフロントの近似は可能でも、それ以上の次元数のパレートフロントを精緻に近似することは困難になる。

5.2 現在の取り組み

まず、パレートフロント全体を探索しないアプローチがある。このアプローチでは、意思決定者の選好情報を利用し、パレートフロントの選好領域を一般的に用いられる規模の解集団によって探索する [47-49]。次に、パレートフロント全体を探索するアプローチだが、これまでの多数目的最適化のための取り組みは、一般的に用いられる小さな規模の解集団を採用し、多数次元のパレートフロント全体を粗く近似するものがほとんどだった。近年は、解集団をパレートフロントに収束

させるための手段が成熟しつつあることから、パレートフロント全体を精緻に近似するため、これまでの進化計算では使用されてこなかったような大規模な解集団を取り扱う研究が増えている [50-52]。特に立川らの研究 [51] では、8 目的までの最適化に 10^6 の解集団サイズを用いる試みがあり、これは従来の進化計算で使用されてきた解集団サイズをはるかに超えている。

5.3 残された課題

解集団サイズが大規模になった場合、これまでの進化計算の選択、交叉、突然変異などのオペレータが変わらず有効かどうかは未知である。今後、大規模な解集団を取り扱う場合に適したオペレータの検討が必要である。また、並列性の高いアルゴリズムや、解集団サイズの増加に対して計算コストを抑制できるアルゴリズムに対する評価が高まる可能性がある。NSGA-III のようにパレート支配を用いて解の優劣を決定する方法は、解の相対比較が必要なため、解集団サイズの二乗のオーダーの計算コストを要する。解集団サイズの増加に伴って、計算コストが指数関数的に増大するため、膨大な解集団サイズの取り扱いには不向きである。また、パレートフロントの形状だけでなく目的数によって適切な解集団サイズは異なるため、解集団サイズを動的に変更する仕組みの検討も加速化すると考えられる。

6. 高次元パレートフロントの可視化

6.1 難しさ

2 目的問題や 3 目的問題では、獲得した非劣解集合の分布を、目的関数空間内に視覚的に示すことは容易である。その分布を観察すれば、HV などの定量的な評価尺度による数値のみからは得ることができないさまざまな情報、たとえばパレートフロントの形状、非劣解集合の分布の一樣さなどを知ることができるだけでなく、最終的に一つの解を選択する意思決定にも利用できる。しかし、4 目的以上になると、4 次元以上の空間を表現する難しさが生じるため、獲得した非劣解集合の分布の観察が困難になるだけでなく、最終的な一つの解の選択にも難しさが生じる。

6.2 現在の取り組み

代表的な可視化手法が説明図とともに示されている文献 [53-55] を参照されたい。簡単に紹介すると、まず、バブルチャート [56] は、3 次元空間の点に色と大きさを加えて 5 次元まで表現できる。平行座標系を利用する方法としては、平行座標プロット [57]、ヒートマップ [58] がある。また、多数次元の目的関数空間における解の距離関係を 2 次元空間に写像する方法とし

て、自己組織化マップ [59], Sammon Mapping [60], Neuroscale [61], Isomap [62], RadViz [63], 多次元尺度構成法 [64], 主成分分析 [65], ADVICE [66], p メトリック [55] がある。これらの中には、必ずしも多次元空間に分布する非劣解集合の目的関数値ベクトルを表示するためだけでなく、非劣解集合の変数ベクトルや、それらを複合したものを描画するためにも利用されるものが含まれることに注意されたい。

6.3 残された課題

2 目的問題や 3 目的問題では、非劣解集合の散布図を示すことができる。しかし、非劣解集合を評価する観点には、パレートフロントへの収束度合い、パレートフロントの被覆度、分布のよさなど多岐にわたるため、散布図から複数のアルゴリズムによる非劣解集合の良し悪しを容易に判断することはできない。そのため、非劣解集合の評価尺度がこれまでに多数提案されており、代表的なものには HV [67] や IGD [68, 69] がある。これらは、解集合をスカラー値で点数付けするため、アルゴリズムの良し悪しの主張には便利だが、多様な観点で評価できる非劣解集合をスカラー値に落とし込んでしまうため、HV や IGD の値だけからは見えない各アルゴリズムの特徴を見落とす恐れがあり、散布図などのほかの情報と併用することが望ましい。

現在、多数目的最適化のためのアルゴリズム研究は、多数次元の非劣解集合の表現が難しいことから、アルゴリズムの良し悪しの議論を HV や IGD の結果に依存し過ぎているところに問題がある。その結果、たとえば二つのアルゴリズムについて、HV や IGD が同等だった場合、それらによる非劣解集合の特徴が異なっても、それを明らかにすることができない。今後は、定量的な評価尺度の結果と、上記で紹介した多数次元の非劣解集合の可視化による結果を併せて議論していくことが、各アルゴリズムの特徴を明らかにするために重要になると考えられる。一例として、He et al. による最新の論文 [70] では、HV と IGD による定量評価の後で、 p メトリック [55] によって非劣解集合が可視化され、その分布特徴についても議論している。このように、今後は、定量的評価尺度の結果だけではなく、可視化技術と組み合わせられた結果の議論が、アルゴリズムを特徴づけることを促進し、さらなるアルゴリズム研究の発展につながると考えられる。

7. まとめ

本稿では、進化計算による多数目的最適化の難しさ、現在の取り組みと残された課題について述べた。解集

団からパレートフロントを近似する解集合を一括獲得できる利点から、多目的最適化の手段として注目された進化計算だが、より多数の目的を最適化するためには、扱ってこなかったような大規模な解集団を扱えるようにしたり、その中から手がかりとなる情報を抽出して効果的に新しい解を作るようにしたりと、これまでの進化計算の枠組みを超える必要があると考えられ、研究すべき課題は山積みである。しかし、これらの課題が解決され、進化計算による多数目的最適化の手段が成熟化すれば、進化計算に関する学術的意義が高まるだけでなく、特に産業界に対して大きな社会的波及効果をもたらすことは間違いない。また、現実的な多数目的テスト問題の整備も重要な課題 [71] であり、産業界との連携が望まれる。

参考文献

- [1] K. Deb, *Multi-objective Optimization Using Evolutionary Algorithms*, John Wiley & Sons, 2001.
- [2] C. A. C. Coello, G. B. Lamont and D. A. V. Veldhuizen, *Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems*, 2nd edition, Springer, 2007.
- [3] C. A. C. Coello and G. B. Lamont, *Applications of Multi-Objective Evolutionary Algorithms*, World Scientific, 2004.
- [4] J. D. Schaffer, "Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms," In *Proceedings of the First International Conference on Genetic Algorithms*, pp. 93–100, 1985.
- [5] K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal and T. Meyarivan, "A fast elitist multi-objective genetic algorithm: NSGA-II," *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **6**, pp. 182–197, 2002.
- [6] 茄子川捷久, 汐川満則, 宮下義孝, 『自動車の走行性能と試験法』, 東京電機大学出版局, 2008.
- [7] H. Ishibuchi, N. Tsukamoto and Y. Nojima, "Evolutionary many-objective optimization: A short review," In *Proceedings of 2008 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2008)*, pp. 2424–2431, 2008.
- [8] <http://www.iitk.ac.in/kangal/codes.shtml> (2017 年 1 月 31 日閲覧)
- [9] P. Hajela, E. Lee and C. Y. Lin, "Genetic algorithms in structural topology optimization," *NATO ASI Series: Topology Design of Structures*, **227**, pp. 117–133, 1993.
- [10] K. Deb and K. Saxena, "Searching for Pareto-optimal solutions through dimensionality reduction for certain large-dimensional multi-objective optimization problems," In *Proceedings of 2006 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2006)*, pp. 3353–3360, 2006.
- [11] D. Brockhoff and E. Zitzler, "Are all objectives necessary?: On dimensionality reduction in evolutionary multiobjective optimization," In *Proceedings of the 9th Parallel Problem Solving from Nature (PPSN IX)*, **4193**, pp. 533–542, 2006.
- [12] H. Sato, H. Aguirre and K. Tanaka, "Controlling dominance area of solutions and its impact on the performance of MOEAs," In *Proceedings of 2007 Evo-*

- lutionary Multi-Criterion Optimization (EMO2007), **4403**, pp. 5–20, 2007.
- [13] M. Garza-Fabre, G. T. Pulido and C. A. C. Coello, “Ranking methods for many-objective problems,” *MICAI 2009: Advances in Artificial Intelligence: 8th Mexican International Conference on Artificial Intelligence*, pp. 633–645, 2009.
- [14] M. Farina and P. Amato, “On the optimal solution definition for many-criteria optimization problems,” In *Proceedings of the NAFIPS-FLINT International Conference’2002*, pp. 233–238, 2002.
- [15] P. J. Bentley and J. P. Wakefield, “Finding acceptable solutions in the Pareto-optimal range using multiobjective genetic algorithms,” *Soft Computing in Engineering Design and Manufacturing*, pp. 231–240, Springer, 1997.
- [16] E. Zitzler and S. Kunzili, “Indicator-based selection in multiobjective search,” In *Proceedings of the 8th International Conference on Parallel Problem Solving from Nature (PPSN VIII)*, **3242**, pp. 832–842, 2004.
- [17] N. Beume, B. Naujoks and M. Emmerich, “SMS-EMOA: Multiobjective selection based on dominated hypervolume,” *European Journal of Operational Research*, **181**, pp. 1653–1669, 2007.
- [18] J. Bader and E. Zitzler, “HypE: An algorithm for fast hypervolume-based many-objective optimization,” *Evolutionary Computation*, **19**, pp. 45–76, 2011.
- [19] R. H. Gomez and C. A. C. Coello, “Improved meta-heuristic based on the R2 indicator for many-objective optimization,” In *Proceedings of the 2015 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 2015)*, pp. 679–686, 2015.
- [20] E. Zitzler and L. Thiele, “Multiobjective evolutionary algorithms: A comparative case study and the strength Pareto approach,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **3**, pp. 257–271, 1999.
- [21] H. Ishibuchi, H. Masuda, Y. Tanigaki and Y. Nojima, “Modified distance calculation in generational distance and inverted generational distance,” *Evolutionary Multi-Criterion Optimization: 8th International Conference, EMO 2015*, pp. 110–125, 2015.
- [22] E. M. Lopez and C. A. C. Coello, “IGD⁺-EMOA: A multi-objective evolutionary algorithm based on IGD⁺,” In *Proceedings of 2016 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2016)*, pp. 999–1006, 2016.
- [23] C. A. R. Villalobos and C. A. C. Coello, “A new multi-objective evolutionary algorithm based on a performance assessment indicator,” In *Proceedings of the 2012 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 2012)*, pp. 505–512, 2012.
- [24] T. Murata, H. Ishibuchi and M. Gen, “Specification of genetic search directions in cellular multi-objective genetic algorithm,” *Evolutionary Multi-Criterion Optimization: 1st International Conference, EMO 2001*, pp. 82–95, 2001.
- [25] E. J. Hughes, “Evolutionary many-objective optimisation: Many once or one many?” In *Proceedings of 2005 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2005)*, pp. 222–227, 2005.
- [26] Q. Zhang and H. Li, “MOEA/D: A multi-objective evolutionary algorithm based on decomposition,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **11**, pp. 712–731, 2007.
- [27] K. Deb and H. Jain, “An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point based non-dominated sorting approach, Part I: Solving problems with box constraints,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **18**, pp. 577–601, 2014.
- [28] H. Ishibuchi, N. Akedo and Y. Nojima, “Behavior of multiobjective evolutionary algorithms on many-objective knapsack problems,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **19**, pp. 264–283, 2015.
- [29] H. Sato, “Inverted PBI in MOEA/D and its impact on the search performance on multi and many-objective optimization,” In *Proceedings of 2014 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 2014)*, pp. 645–652, 2014.
- [30] V. J. Bowman Jr., “On the relationship of the Tchebycheff norm and the efficient frontier of multiple-criteria objectives,” *Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems*, **130**, pp. 76–86, 1976.
- [31] K. Miettinen, *Nonlinear Multiobjective Optimization*, Kluwer, 1999.
- [32] K. Li, K. Deb, Q. Zhang and S. Kwong, “An evolutionary many-objective optimization algorithm based on dominance and decomposition,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **19**, pp. 694–716, 2015.
- [33] Y. Y. Tan, Y. C. Jiao, H. Li and X. K. Wang, “MOEA/D plus uniform design: A new version of MOEA/D for optimization problems with many objectives,” *Computers & Operations Research*, **40**, pp. 1648–1660, 2013.
- [34] Y. Yuan, H. Xu and B. Wang, “An improved NSGA-III procedure for evolutionary many-objective optimization,” In *Proceedings of the 2014 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 2014)*, pp. 661–668, 2014.
- [35] S. Jiang, Z. Cai, J. Zhang and Y. S. Ong, “Multi-objective optimization by decomposition with Pareto-adaptive weight vectors,” In *Proceedings of 2011 Natural Computation (ICNC)*, pp. 1260–1264, 2011.
- [36] 濱田直希, 永田裕一, 小林重信, 小野功, “多目的連続関数最適化の解法 Adaptive Weighted Aggregation の終了条件に関する一考察,” *進化計算学会論文誌*, **4**, pp. 13–27, 2013.
- [37] 濱田直希, 永田裕一, 小林重信, 小野功, “BS-AWA: Adaptive Weighted Aggregation の目的数に対するスケラビリティの向上,” *進化計算学会論文誌*, **5**, pp. 1–15, 2014.
- [38] H. Sato, H. Aguirre and K. Tanaka, “Variable space diversity, crossover and mutation in MOEA solving many-objective knapsack problems,” *Annals of Mathematics and Artificial Intelligence*, **68**, pp. 197–224, 2013.
- [39] S. Watanabe, T. Hiroyasu and M. Miki, “Neighborhood cultivation genetic algorithm for multi-objective optimization problems,” In *Proceedings of Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 2002)*, pp. 458–465, 2002.
- [40] H. Ishibuchi, Y. Tanigaki, H. Masuda and Y. Nojima, “Distance-based analysis of crossover operators for many-objective knapsack problems,” In *Proceedings of the International Conference on Parallel Problem Solving from Nature XIII*, pp. 600–610, 2014.
- [41] K. Deb, L. Thiele, M. Laumanns and E. Zitzler, “Scalable multi-objective optimization test problems,” In *Proceedings of 2002 IEEE Congress on Evolutionary*

- ary Computation (CEC 2002), pp. 825–830, 2002.
- [42] S. Huband, P. Hingston, L. Barone and L. While, “A review of multi-objective test problems and a scalable test problem toolkit,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **10**, pp. 477–506, 2006.
- [43] K. Deb and M. Goyal, “A combined genetic adaptive search (GeneAS) for engineering design,” *Computer Science and Informatics*, **26**(4), pp. 30–45, 1996.
- [44] R. Storn and K. Price, “Differential evolution: A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces,” Technical Report TR-95-012, ICSI, 1995.
- [45] K. V. Price, R. Storn and J. Lampinen, *Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization*, Springer-Verlag, 2005.
- [46] Y. Yuan, H. Xu and B. Wang, “An experimental investigation of variation operators in reference-point based many-objective optimization,” In *Proceedings of the 2015 Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation, GECCO 2015*, pp. 775–782, 2015.
- [47] K. Deb and J. Sundar, “Preference point based multi-objective optimization using evolutionary algorithms,” In *Proceedings of 2006 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 2006)*, pp. 635–642, 2006.
- [48] A. Auger, J. Bader, D. Brockhoff and E. Zitzler, “Articulating user preferences in many-objective problems by sampling the weighted hypervolume,” In *Proceedings of 2009 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO 2009)*, pp. 555–562, 2009.
- [49] M. Gong, F. Liu, W. Zhang, L. Jiao and Q. Zhang, “Interactive MOEA/D for multi-objective decision making,” In *Proceedings of the 13th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation (GECCO 2011)*, pp. 721–728, 2011.
- [50] A. L. Jaimes, A. Oyama and K. Fujii, “A ranking method based on two preference criteria: Chebyshev function and ϵ -indicator,” In *Proceedings of 2015 Congress on Evolutionary Computation (CEC 2015)*, pp. 2827–2834, 2015.
- [51] 立川智章, 渡辺毅, 大山聖, “スーパーコンピュータ京を用いた大規模集団サイズでの多数目的進化計算,” *進化計算学会論文誌*, **6**, pp. 126–136, 2015.
- [52] H. Ishibuchi, Y. Setoguchi, H. Masuda and Y. Nojima, “How to compare many-objective algorithms under different settings of population and archive sizes,” In *Proceedings of the 2016 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2016)*, pp. 1149–1156, 2016.
- [53] D. J. Walker, R. M. Everson and J. E. Fieldsend, “Visualizing mutually nondominating solution sets in many-objective optimization,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **17**, pp. 165–184, 2013.
- [54] T. Tusar and B. Filipic, “Visualization of Pareto front approximations in evolutionary multiobjective optimization: A critical review and the projection method,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **19**, pp. 225–245, 2015.
- [55] Z. He and G. G. Yen, “Visualization and performance metric in many-objective optimization,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, **20**, pp. 386–402, 2016.
- [56] M. F. Ashby, “Multi-objective optimization in material design and selection,” *Acta Materialia*, **48**, pp. 359–369, 2000.
- [57] A. Inselberg, *Parallel Coordinates: Visual Multi-dimensional Geometry and its Applications*, Springer, 2009.
- [58] A. Pryke, S. Mostaghim and A. Nazemi, “Heatmap visualisation of population based multi objective algorithms,” *Evolutionary Multi-Criterion Optimization: 4th International Conference, EMO 2007*, pp. 361–375, 2007.
- [59] S. Obayashi and D. Sasaki, “Visualization and data mining of Pareto solutions using self-organizing map,” In *Proceedings of 2003 Evolutionary Multi-Criterion Optimization*, **2632**, pp. 796–809, 2003.
- [60] J. J. Valdes and A. J. Barton, “Visualizing high dimensional objective spaces for multi-objective optimization: A virtual reality approach,” In *Proceedings of the 2007 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2007)*, pp. 4199–4206, 2007.
- [61] D. Lowe and M. E. Tipping, “Feed-forward neural networks and topographic mappings for exploratory data analysis,” *Neural Computing & Applications*, **4**, pp. 83–95, 1996.
- [62] J. B. Tenenbaum, V. Silva and J. C. Langford, “A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction,” *Science*, **290**(5500), pp. 2319–2323, 2000.
- [63] P. E. Hoffman, G. G. Grinstein, K. Marx, I. Grosse and E. Stanley, “DNA visual and analytic data mining,” In *Proceedings of the 8th Conference on Visualization '97*, pp. 437–441, 1997.
- [64] 齋藤堯幸, 『多次元尺度構成法』, 朝倉書店, 1980.
- [65] M. Yamamoto, T. Yoshikawa and T. Furuhashi, “Study on effect of MOGA with interactive island model using visualization,” In *Proceedings of IEEE Congress on Evolutionary Computation*, pp. 1–6, 2010.
- [66] F. Kudo and T. Yoshikawa, “Knowledge extraction in multi-objective optimization problem based on visualization of Pareto solutions,” In *Proceedings of 2012 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2012)*, pp. 860–865, 2012.
- [67] E. Zitzler, “Evolutionary algorithms for multiobjective optimization: Methods and applications,” PhD thesis, Swiss Federal Institute of Technology, 1999.
- [68] P. Czyzak and A. Jaszkievicz, “Pareto simulated annealing: A metaheuristic technique for multiple-objective combinatorial optimization,” *Journal of Multi-Criteria Decision Analysis*, **7**, pp. 34–47, 1998.
- [69] H. Sato, H. Aguirre and K. Tanaka, “Local dominance using polar coordinates to enhance multi-objective evolutionary algorithms,” In *Proceedings of 2004 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2004)*, pp. 188–195, 2004.
- [70] Z. He and G. Yen, “Many-objective evolutionary algorithms based on coordinated selection strategy,” to appear in *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*.
- [71] H. Ishibuchi, Y. Setoguchi, H. Masuda and Y. Nojima, “Performance of decomposition-based many-objective algorithms strongly depends on Pareto front shapes,” to appear in *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*.