勾配情報を考慮できる粒子群最適化による制約付き数理最適化問題の解の探索

TOYAMA Prefectural University

2120019 柴原壮大　情報基盤工学講座　指導教員　奥原浩之

要約

群知能は，鳥や魚，アリのコロニーなどのグループの行動に基づく最適化手法である．この技術の一つである粒子群最適化が開発され，様々な研究に応用されている．そこで，粒子群最適化の更新式に勾配情報を加えた非線形変数変換モデルを活用し，それを拡張することで，多目的日程計画問題への組み込みを行うことを目指す．多目的日程計画問題とは，複数の目的（効率性、コスト、納期など）を同時に考慮しながらリソースを最適に配分する難解な問題である．

キーワード：：粒子群最適化，勾配情報，局所探索，多目的日程計画問題，パレート解

1 はじめに

粒子群最適化 (**Particle Swarm Optimization:PSO**) は，群の中の粒子が持つ最良の情報とそのグループの最適値から過去の探索から考慮した確率的最適化手法であり，ケネディが社会的行動に基づいて開発した並列進化計算技術である．[1] 社会的行動と計算方法の両方を扱う**PSO**に関する標準的な研究がある．[2]

近年，コンピュータサイエンスの発展は，ハードウェアとソフトウェアの有効性が顕著に表れている．その中で大規模問題の最適化の重要性はますます高めっている．ソーシャルネットワークサービスの登場により，ログやパスの問題も大規模になっている．最新のコンピュータでこれらの問題を解決するには時間がかかってしまう．

本研究では数ステップでもっとも最適な解が見つかる新しいハイブリッド動的システムを実際の数理最適化問題に適応する．つまり提案されている上下限制約条件付き最適化問題に対し直接適用可能な勾配情報を追加した粒子群最適化アルゴリズムを活用し,それを拡張することで,多目的日程計画問題へ組み込みを行うことが本研究の目的になっている．

2 多目的最適化における粒子群最適化

2.1 粒子群最適化アルゴリズム

PSOは群を成して移動する生物の行動を模範したアルゴリズムである。群をなす生物を粒子としてモデル化し、粒子は最適化問題における候補解を示している．**PSO**は群の中の粒子がもつ最良の情報とその集団の最適値から過去の探索を考慮し、さらにその集団の各粒子の位置および速度を更新することによって計算される．以下に**PSO**の解説を示す（図1: 参照）．

ここで、**PSO**の探索模式図及び速度と位置の更新式より、各粒子が持つ最良の情報に向かう力、集団の最適値に向かう 力、これまでの進行方向へ向かう 力の**3**つのベクトルを合成して速度ベクトル を決定し、それを元に次に移動する位置を決定する．[3]

PSOの更新式

$$
\begin{aligned}
x_d^{k+1} &= x_d^k + v_d^{k+1} \\
v_d^{k+1} &= w v_d^k + c_1 r_1 (x_d^k b - x_d^k) + c_2 r_2 (x_g^k b - x_d^k)
\end{aligned}
$$

x_d^k:位置
v_d^k:速度
w_d^k:運動量

x_{db}^k:p-best(各個体の過去の最良個体)
x_{gb}^k:g-best(集団の中の最良個体)
r_1, r_2 :0から1のパラメータ
c_1 , c_2:調整パラメータ

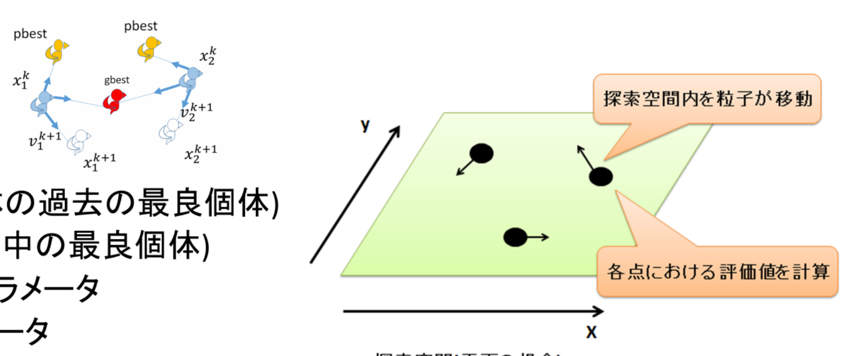


図1 **PSO**の更新式

2.2 制約を考慮した粒子群最適化

上下制約付最適化問題を解くための**PSO**モデルを扱う．[4] 内部状態表現モデルを導出するために，まず上下限制約付き問題を定義し，変数変換式を活用して変数**x**を消去して，変数**y**に対する無制約問題を得る．(図**2**: 参照) また，**PSO**の更新式F_pやCの定義式も含ませ，さらに出力関数f_iを連立させて具体的に記述すると，非線形変数変換モデルの内部情報が得られる．

非線形変数変換モデルとその内部状態表現モデル

上下限制約付問題

$$
\min_{\boldsymbol{x}} \quad E(\boldsymbol{x})
$$
$$
\text{subj.to} \quad p_i \le x_i \le q_i,\ i = 1, \cdots, n \ \cdots\cdots
$$

を直接解くために，この上下限制約領域内に系の軌道を閉じ込めたPSOモデルを導入する．それは目的関数の変数を変換して無制約化した新たな変数空間に無制約PSOモデルを適用した「変 数変換モデル」である．以下では問題の大域的最適解 は上下限制約の内部にあるものとする．また，内部状態表現モデルを導出する．

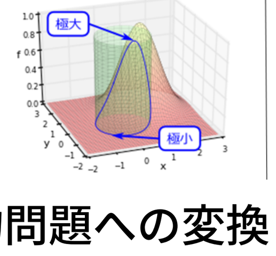
$$
x_i = f_i(y_i) = \frac{q_i + p_i \exp(-y_i)}{1 + \exp(-y_i)} \longrightarrow \min_{\boldsymbol{y}} \quad E(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}))
$$

上下制約付最適化問題をとくための変数変換モデル　　変数yに対する無制約問題

と置く

ただし,

$$
\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) = (f_1(y_1), \cdots, f_n(y_n))^T
$$



$$
\begin{aligned}
\frac{d\boldsymbol{u}^p(t)}{dt} &= -a\boldsymbol{u}^p(t) + \boldsymbol{v}^p(t) \\
\frac{d\boldsymbol{v}^p(t)}{dt} &= c[\boldsymbol{F}^p(\boldsymbol{u}^p(t), t) + \boldsymbol{C}(\boldsymbol{u}^p(t), t)] \\
\boldsymbol{F}^p(\boldsymbol{u}^p, t) &= c_1\{\boldsymbol{u}^p(T^p(t)) - \boldsymbol{u}^p\} \\
\boldsymbol{C}(\boldsymbol{u}^p, t) &= c_2\{\boldsymbol{u}^{Q(t)}(T^o(t)) - \boldsymbol{u}^p\} \\
T^p(t) &= \operatorname*{argmin}_{\tau}\{E(\boldsymbol{x}^p(\tau)) \mid 0 \le \tau \le t\} \\
(Q(t), T^o(t)) &= \operatorname*{argmin}_{(q,\tau)}\{E(\boldsymbol{x}^q(\tau)) \mid \\
& q = 1, \cdots, P,\ 0 \le \tau \le t\} \\
x_i^p(t) &= f_i(u_i^p(t)) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i^p(t))}{1 + \exp(-u_i^p(t))} \\
& i = 1, \cdots, n
\end{aligned}
$$

図2 無制約問題への変換と内部状態表現モデル

内部情報をサンプリングパラメータΔT のオイラー法で離散化し，対応する式も加えると形の上では制約を考慮しない**PSO**モデルが得られる．なお，F_pやCの$lp(k)$、$(Q(k), lo(k))$は、変換式fを通した式によって決まる．また,∇Eは勾配情報を表す．このモデルにおいてΔTの調節で有界領域内に閉じ込められた形で不安定化させることにより、その領域内を走査するカオス的な現象を生み出すことができると期待される。

非線形変数変換離散化PSOモデル

$$
\begin{aligned}
u^p(k+1) &= (1 - a\triangle T)u^p(k) + \triangle T v^p(k) \\
v^p(k+1) &= v^p(k) + c\triangle T[F^p(u^p(k), k) + C(u^p(k), k) - \nabla E(u^p(k), k)] \\
F^p(k, k) &= c_1(u^p(l^p(k)) - u^p(k)) \\
C^p(k, k) &= c_2(u^{Q(k)}(l^o(k)) - u^p(k)) \\
\nabla E(k, k) &= c_3 \frac{\partial E(k, t)}{\partial k} \\
l^p(k) &= argmin(E(x^p(l)) | l = 0, ..., k) \\
(Q(k), l^o(k)) &= argmin(E(x^q(l)) | q = 1, 2, ..., P, l = 0, 1, .., k) \\
x^p{}_i(k) &= f_i(u^p{}_i(k)) = \frac{q_i + p_i exp(-u^p{}_i(k))}{1 + exp(-u^p{}_i(k))}, i = i, ..., n
\end{aligned}
$$

図3 上下限制約離散化**PSO** モデル

2.3 多目的最適化におけるパレート解

最適化問題とは，ある決められた制約条件を満たす範囲内で，何らかの目的を最良にするような問題のことである．一般に最適化とは，単一目的最適化を意味する．最適化問題を解く手法として**PSO**が知られている．しかし，実問題においては，トレードオフ関係にある複数の目的を同時に考慮し，最適化を行う問題が存在する．それを多目的最適化問題という．複数の評価基準を同時に考慮しながら最適化を行う問題を多目的最適化問題という．一般に多目的最適化問題は.「複数個のトレードオフの関係にある目的関数を与えられた制約条件の元で，何らかの意味で最小化（最大化）する問題」と定義されている．

多目的最適化問題では，一般に複数の目的関数どうしが互いにトレードオフの関係にある場合が多いため，最適解を一つに絞ることが出来ない．そのため，多目的最適化問題では，パレート最適解 を求める．パレート最適個体を求めるために，解の優越関係を用いて探索を行う．

3 多目的日程計画問題

3.1 多目的日程計画問題の具体例

生産や建設などの **1** つの大きなプロジェクトの工程において，作業を効率よく進めるため，適切に仕事の順序を決定する問題を一般的にスケジューリング問題(日程計画問題)という．しかしスケジューリング問題においても現実には様々な評価基準があり，それら複数の目的関数を同時に考慮し，バランスあるスケジュールを求めることがより現実的であることも多い。

このように複数の目的関数を同時に考慮する問題を多目的日程計画問題と呼ぶ。また近年リソースを消費するシステムにおけるスケジューリングが多く研究されている。ここでいうリソースとは資金、人数、工具、資源、空間などであり、それらの消費とそれらの制約のもとに様々な目的関数を最適化するような研究が行われている。例えば，多目的日程計画問題として，以下のような例がある．[図**4**:参照]

多目的日程計画問題

1. タスクスケジューリング
•**概要**: 複数のタスクを時間枠内にスケジュールし，完了時間、遅延、リソースの使用効率を最適化する問題.
•**目的**: タスクの完了時間の最小化，リソースの稼働率の最大化，作業者の疲労度の低減など.
2. プロジェクトスケジューリング
•**概要**: プロジェクトの各活動を計画し、依存関係やリソース制約を考慮しながらスケジュールを立てる問題.
•**目的**: プロジェクトの全体的な期間の最小化，コストの最小化，リスクの低減など.
3. 生産スケジューリング
•**概要**: 生産ラインや工場での製品の生産を計画し，リードタイムや在庫コストを最適化する問題.
•**目的**: 生産コストの最小化，納期の遵守，在庫レベルの最適化など,
4. 教育機関の時間割スケジューリング
•**概要**: 学校や大学における授業の時間割を作成する問題で、教員や教室の利用効率を最大化する.
•**目的**: 学生の通学時間の最小化，教員の負担の軽減，授業の重複の回避など
5. 配送スケジューリング
•**概要**: 配送センターから顧客への配送を計画し，ルートや配送時間を最適化する問題.
•**目的**: 配送コストの最小化，配送時間の短縮，顧客満足度の向上など,
6. シフトスケジューリング
•**概要**:複数のジョブを作業員に割り当てる.
•**目的**: 参加者の重複の回避，リソースの最適利用，緊急事態への対応.

図4 多目的日程計画問題の具体例

3.2 計画問題の定式化

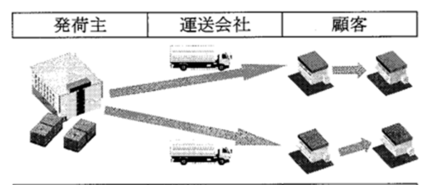
多目的日程計画問題は、さまざまな分野で重要な課題となっており、限られたリソースを最大限に活用しつつ、複数の目標を同時に達成することを目指している．例えば製造業における生産スケジューリングでは，納期遵守やコスト削減，労働者の労働負担を最小化することが求められる．

これらの問題は，単一の目的を最適化する従来の手法では解決できないことが多く，異なる目的が相互に競合する場合もある．たとえば，コストを削減することが，納期の遅延やリソースの不足を引き起こす可能性があるため，これらのバランスを取ることが非常に重要である．したがって，複数の目的を同時に考慮した定式化が求められる．

定式化は，最適化問題を数学的に表現するプロセスであり，問題の核心を捉え，解法を導出するための基盤を提供する．ここでは各種の多目的日程計画問題について，一般的な枠組みを用いてその定式化を行う．目的関数，制約条件，変数の定義を行うことで，具体的な問題設定に応じたアプローチが可能となる．以下に例を示す[5]

多目的日程計画問題の定式化例

配送スケジューリング
配送業務は，初荷主･運送会社･顧客に3者間に及ぶその中で，それぞれの最適化条件は異なる輸送費の最小化を目的に運送会社が主体となって配送計画を構築することが多いが，発荷主,顧客の最適化要件も考慮する必要がある.



	発荷主	運送会社	顧客
最適化要件	支払物流費最小化	輸送費最小化	荷受ｺｽﾄ最小化
制約条件	発時間指定 ﾊﾞｰｽ入構上限台数	稼動時間 重量・容積上限	荷受着時間指定 入構車種制限

目標配送料遵守の目的関数を制約条件化

$$
\text{minimize } w_1 \cdot |R^+| + w_2 \cdot \sum_r d(\lambda_r) + \sum_{i=4}^{k} w_i \cdot f_i
$$

subject to

$$
\bigcup_r \lambda_r = V
$$
$$
\lambda_r \cap \lambda_{r'} = \phi \text{ for all } r,\ r' \in R,\ r \ne r'
$$
$$
\sum_{r \in R_p} q(\lambda_r) - y_p^+ + y_p^- = W_p
$$
$$
y_p^+,\ y_p^- \le \varepsilon_p
$$

目標配送量の定式化

$$
\text{minimize } w_1 \cdot |R^+| + w_2 \cdot \sum_r d(\lambda_r) + w_3 \cdot (y_p^+ + y_p^-) + \sum_{i=4}^{k} w_i \cdot f_i
$$

subject to

$$
\bigcup_r \lambda_r = V
$$
$$
\lambda_r \cap \lambda_{r'} = \phi \text{ for all } r,\ r' \in R,\ r \ne r'
$$
$$
\sum_{r \in R_p} q(\lambda_r) - y_p^+ + y_p^- = W_p
$$
$$
y_p^+,\ y_p^- > 0
$$

(容量制約，時間指定等の条件式は省略)
各記号の意味は以下の通りである．
V：オーダの集合
R：車両の集合
R_p：出荷拠点 p に属する車両の集合
λ_r：車両 $r \in R$ が配送するオーダの順序付き集合
R^+：少なくとも 1 つのオーダが割当っている車両の集合．つまり $R^+ = \{r | \lambda_r \ne \phi\}$
W_p：出荷拠点 p の車両の目標配送量
$d(\lambda)$：オーダ集合 λ を並び順に従って配送したときの距離
$q(\lambda)$：オーダ集合 λ の総重量
f_i：目的関数 i
w_i：目的関数 i の重み係数
k：目的関数の個数

図5 多目的日程計画問題の定式化例

3.3 種々のパレート解の導出法

パレート解の導出法の中から，いくつかの手法を取り上げ，その概要を紹介する．具体的には，**NSGA(Non-dominatedSortingGeneticAlgorithms)**，**SPEA-(StrengthParetoEvolutionaryAlgorithm-)**，**MOEA/D（AMultiobjectiveEvolutionalAlgorithmbase-donDecomposition）**，**MOPSO（Multi-Objective Particle Swarm Optimization）**といった代表的な手法について論じる．これらのアルゴリズムは，複雑な最適化問題を解決するための基盤を提供しており，実世界のさまざまなシナリオに適応可能である．

多目的日程計画問題

1. NSGA-II (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II)
•**特徴**:
- 解を層別化し，各層の解を評価して進化させる.
- クラウディング距離を用いて同一層内の解の多様性を保持.

•**利点**:
- 計算コストが比較的低い.
- パレート前面に収束しやすい.

•**欠点**:
- 解の集中が起こる場合がある.
- 高次元問題では性能が劣ることがある.

2. MOPSO (Multi-Objective Particle Swarm Optimization)
•**特徴**:
- 粒子がパレート前面を探索し、互いに情報を共有。
- パラメータ調整が必要で、解の更新を行う。

•**利点**:
- 収束速度が速く、適応性が高い。
- 幅広い問題に適用可能。

•**欠点**:
- 粒子の情報に依存するため局所最適に陥りやすい。
- パラメータの調整が難しい場合がある。

3. MOEA/D (Multi-Objective Evolutionary Algorithm based on Decomposition)
•**特徴**:
- 各問題を並行して最適化し、解の更新を行う。
- 重み付けにより、目的のバランスを調整。

•**利点**:
- 高次元問題に対しても効果的。
- 解の多様性を維持しやすい。

•**欠点**:
- 重みの設定が難しい場合がある。
- 各単目的問題の設計が複雑になることがある

4. SPEA2 (Strength Pareto Evolutionary Algorithm 2)
•**特徴**:
- 各解の強さを評価し、パレート解の集合を構築。
- 選択過程で多様性を考慮し、非支配解を強調。

•**利点**:
- 複雑なトレードオフを扱うのに強い。
- 解の強さに基づくため、効率的な選択が可能。

•**欠点**:
- 計算コストが高くなる可能性がある。
- 特定の問題に特化しやすい。

図6 種々のパレート解の導出法

4 提案手法

本研究では，上下限制約条件付き最適化問題に対し直接適用可能な勾配情報を追加した粒子群最適化アルゴリズムを拡張し，多目的日程計画問題に適応する具体的には，まず**PSO**の更新式を力学系モデルとし連続化を試みる．これを上下限制約内に閉じ込める非線形変数変換モデルを用いてモデル化する．このモデルを離散化することで，上下限制約を直接考慮した離散時間系モデルを構築する．それを拡張し，多目的日程計画問題に適応させることにより，複数の目的関数を同時に最適化する柔軟性を実現する．

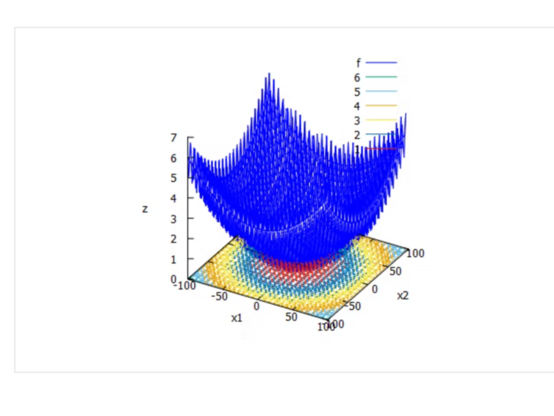
これにより，**PSO**の探索能力を活かしつつ，制約条件を厳密に満たす解の探索を可能にし，多目的最適化の課題に対してより効率的かつ効果的な解決策を提供する．特に，多目的日程計画問題においては，各目的の相互関係を考慮した最適解を導くための工夫が求められる点があり，本手法はその要求に応じたアプローチを実現し，従来の手法と比較して優れた性能を目指す．

5 数値実験ならびに考察

各パラメータの値は、N（粒子の数）=**10**, c=**1.0**, $c_1 \cdot c_2$=**1.4**, c_3=**0.1**, a=**1.0**, $\Delta T = 0.8$ というように与えた。また試行回数は**100**とした。結果を考えると勾配情報を加えた**PSO**は従来手法より，最適な値に収束していることがわかる．よって勾配情報を加えた**PSO**は，多峰性をもつ関数に有効であることが示された．これは，**griewank**関数が非常に多くの局所解をもつという特徴があり,従来手法が局所解に収束してしまう場合が多いことに反して,勾配情報を加えた**PSO**が**griewank**関数という関数全体を見て,局所解から脱出しているのではないかと考察できる．

griewank関数を用いた数値実験

$$
f(x_1 \cdots x_n) = 1 + \frac{1}{4000}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \prod_{i=1}^{n} \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) \qquad -600 \leqq x_i \leqq 600 f_{min}(0, \cdots, 0) = 0
$$



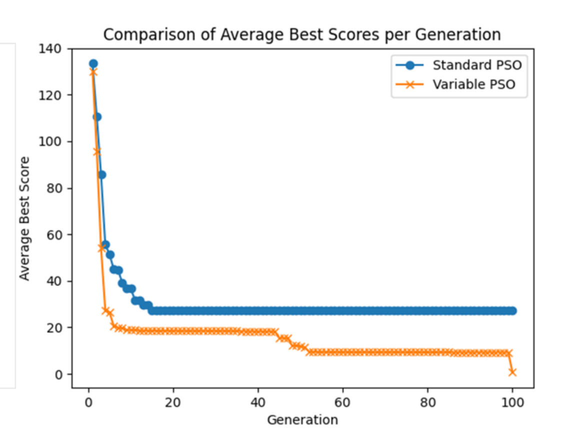


図7 Griewank 関数を活用した数値実験

6 おわりに

本研究では，勾配情報を追加した上下限制約条件付き最適化問題に対して直接適用可能なPSOを 拡張し，多目的日程計画問題の組み込むことを提案した．そこで，このようなPSOを多目的日程計画問題に適応するに当たって，まず連続系の力学系を想定し，それを上下限制約内に閉じ込めた力学系として「非線形変数変換モデル」のモデルを利用し，それを離散化することによって，上下限制約を直接考慮した離散時間系モデルを実装した．また，PSOの簡単な数値実験を行った．しかし，実際の問題に適応したわけではない．よって今後は，PSOを拡張し，提案手法の適応を行う．

参考文献

[1] J. Kennedy, R.C. Eberhart: Particle swarm optimization, IEEE Conf. on Neural Networks, IV, Piscataway, NJ, pp. 1942-1948 (1995).

[2] J. Kennedy, R.C. Eberhart, Y. Shi:“Swarm intelligence,”Morgan Kaufmann Publishers, San Francisco, CA, pp. 1942-1948, 2001.

[3] 石亀 敦司, 安田 恵一郎:“ 群れの知能： Particle Swarm Optimization,”知能と情報（日本知能情報ファジィ学会誌）, Vol. 20, No. 6, pp. 829-839 （2008）.

[4] 村田 秀樹, 相吉 英太郎:“上下限領域に閉じ込めたParticle swarm optimizationの力学系の分岐特性と収束特性 ” 電学論Ｃ，126 ７，pp.904-912(2006-7)

[5] 中尾　芳隆“現実配送計画問題への多目的最適化手法の応用”オペレーションズ・リサーチ = Communications of the Operations Research Society of Japan : 経営の科学 52 (5), 265-270, 2007-05