

孤立戦略に基づく量子風進化アルゴリズムを用いた 多目的最適化に関する基礎検討

白瀬 翔琉*¹ 森山 賀文*¹ 飯村 伊智郎*¹ 中山 茂*²

多目的最適化問題を進化アルゴリズムで解く場合、交叉や突然変異を用いて新たな解を生成するが、目的数が増加すると解集団の多様性が著しく高まり、交叉が有効に機能しにくくなる。これに対し、MQEA/I は孤立戦略に基づき、他の解情報にほとんど依存せずに進化を行う。一方、MQEA/I は NSGA-II と同様、同一の非優越ランクを持つ解の評価に混雑距離を用いるため、目的数が増加すると非優越解が多くなり、解の評価が困難となる。本研究では、MQEA/I にパレートフロント全体を一様にカバーする解の探索を目的とした、新たな量子風進化アルゴリズムを提案し、計算機実験によりその特徴を明らかにする。

キーワード：進化的計算 発見的アルゴリズム

Fundamental Study on Many Objective Optimization Using Quantum Evolutionary Algorithm Based on Isolated Strategy

Kakeru Shirase*¹ Yoshifumi Moriyama*¹ Ichiro Iimura*¹
Shigeru Nakayama*²

Abstract: In multi-objective optimization problems, the evolutionary algorithms generate new solutions using crossover and mutation, but as the number of objectives increases, the diversity of the solutions in the population increases significantly and crossover becomes less effective. In contrast, MQEA/I is based on an isolation strategy and evolves without requiring other solution information, but as the number of objectives increases, the number of non-dominant solutions increases and solution convergence becomes difficult. In this study, we propose a new quantum wind evolution algorithm that introduces a mechanism to search the Pareto front uniformly to MQEA/I, and clarify its characteristics and effectiveness through computer experiments.

Keywords: evolutionary computation, heuristic algorithm

1. はじめに

実世界において移動経路の選定や商品の選択、意思伝達のための情報デザインなど、人々は日常的に選択や意思決定を行っている。企業においても製品生産の高効率化、立地計画の適正化、経費の削減、資産運用など、様々な制約条件の下でいくつもの選択肢の中から、いくつかの目的において最適と考えられるものを、限られた時間の中で選択している。最適化は諸分野におけるデータ利活用あるいは問題解決に欠かせない技術である。しかし、世の中の最適化問題の多くは目的が唯一とは限らず、複数の目的を考慮する場合がほとんどである。複数の目的関数を考慮する問題を、目的関数が一つだけの単目的最適化問題に対して、多目的最適化問題と呼ぶ。多目的最適化問題では、目的関数同士における最適解が全て一致する完全最適解が存在する特別な場合もあるが、一般には各目的関数間のトレードオフ関係を考慮してパレートフロントを探索することを目

的とする。また、4、5 目的以上の多目的最適化問題を多目的化問題と呼ぶ。

進化アルゴリズム (evolutionary algorithm : EA) は、最適化問題を解決するための手法として広く認識されている。代表的な進化アルゴリズムである遺伝的アルゴリズム (genetic algorithm: GA) は、自然界の進化過程を模倣し、解の集団を反復的に改善しながら最適解を探索する。生物などの個体を解候補、個体が生息する環境を対象問題と見立てて、解候補が持つ情報 (遺伝子) の交叉と突然変異により対象問題に適応した準最適解を得る。

従来の多目的最適化を目的とした進化アルゴリズムである NSGA-II^[1], NSGA-III^[2], MOEA/D^[3]では、交叉および突然変異により新たな解を生成する。一般的にパレート最適解数は解集団サイズより大きく、目的数が増加するとパレート最適解の変数多様性が著しく高まり、幾つかの解情報を掛け合わせて新たな解を生成する交叉は、解集団が広域に分布する状況においては有効に機能しない^[4]。

一方、quantum-inspired evolutionary algorithm (QEA) ^[5]を起源とする、multi-objective quantum-inspired evolutionary algorithm (MQEA) ^[6]は、個体の遺伝子として 0 と 1 の重

*1 熊本県立大学 総合管理学部 総合管理学科

〒862-0920 熊本県熊本市東区月出3丁目1-1 0 0

*2 鹿児島大学名誉教授

ね 合わせ状態で表現された量子風ビットを用い、ユニタリ変換による進化を繰り返す。しかしながら、MQEA は島モデル型遺伝的アルゴリズムのようなグループの概念を有するため、各グループがそれぞれ任意の解に収束して解探索空間が制限される場合がある。

本研究で着目する孤立戦略に基づく多目的化量子風進化アルゴリズム (multi-objective quantum-inspired evolutionary algorithm based on isolation strategy: MQEA/I) は孤立戦略を用いた進化アルゴリズムであり、次の特徴を有する。①多くの進化アルゴリズムで用いられる母集団サイズと終了条件のパラメータを除き、調整すべきパラメータは1つのみである。②解探索の序盤では頻りに個体間で解情報を交換するが、解探索中盤から終盤にかけては各個体が孤立して解探索を行うため、基本的に他個体の解情報を必要としない。これは解の集団を外部の解と相互作用させることなく進化を進めることができるという利点がある。これにより、解集団の多様性を維持しやすく、比較的目的数の少ない最適化問題に対して有効とされている。しかし、目的数が増加すると解集団の多くが他の解に支配されない非優越解となるため混雑距離による評価では同一の比優越ランクを持つ解の評価が困難となり、最適化の精度が低下することが指摘されている。

本研究は、MQEA/I にパレートフロント全体を一様にカバーする評価機構を導入することによって、目的数が増加した多数目的最適化の場合でも解の収束性と多様性をバランスよく保つことができる新たな進化アルゴリズムを提案する。提案するアルゴリズムは、パレートフロントの均等な探索を実現することで、解集団が解空間の広範囲にわたって一様に分布することを促進し、孤立戦略により解の収束を改善する。これにより、目的数が増加した場合にも効率的に最適解を探索することが期待できる。本研究では、まず多目的ナップサック問題を用いた計算機実験を通じて提案したアルゴリズムの有効性を検証し、実験結果に基づき、提案手法の特徴を明らかにすることを旨とする。

2. 孤立戦略に基づく量子風進化アルゴリズム

2.1. 従来手法である MQEA の概要

MQEA は、QEA に対して NSGA-II の枠組みを導入した進化アルゴリズムである。MQEA の処理手順をフローチャートに示す (図 1)。

MQEA では、遺伝子表現として量子ビットにおける重ね合わせ状態を模倣した量子風ビットを採用している。ここでは、 t 世代目の解集団を $P(t)$ とし、解集団サイズを N とする。NSGA-II の基本的な選択戦略と同様に、これまでの探索で得られた優れた解を後の世代へと適切に継承する仕組みが組み込まれている。

具体的には、現在の世代の集団 $P(t)$ と直前の世代の集団

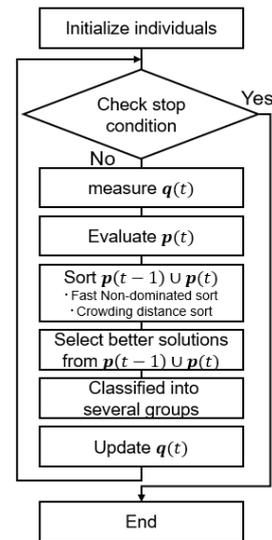


図 1 : MQEA のフローチャート

$P(t-1)$ の和集合として構成される、合計 $2N$ 個の解の集合に対して、非優越ソート (Non-dominated Sorting) および混雑距離ソート (Crowding Distance Sorting) を適用することで、次の世代へと継承すべき最適な N 個の解を選択する。このプロセスにより、探索の多様性を確保しつつ、優れた解が適切に保持される仕組みが整えられている。

選択された N 個の個体群は、その後、いくつかのグループに分割される。この分割の目的は、探索の効率性を向上させると同時に、解の多様性を適切に維持することである。分割後の各グループ内では、最良の解に近づくように、各個体が持つ量子風ビットの確率振幅をユニタリ変換により更新し、進化を促進する。この更新操作において、収束速度は量子風ビットの回転角度によって決定される。回転角度の値が大きい場合には、探索範囲が広がり、より大域的な探索が行われる。一方で、回転角度の値が小さい場合には、探索範囲が狭まり、局所的な解探索が重点的に行われるようになる。さらに、MQEA では、個体群を複数のグループに分割することで、グループ数に応じた多様性の維持と、各グループ内の個体数に応じた集中化した探索が可能となる。この設計により、探索の幅と局所的な収束のバランスを調整することができる。ただし、この分割の方法やグループの数は、最適化の対象とする問題の特性に応じて適切に設定する必要がある。適切なグループ数が設定されない場合、探索の多様性が失われ、局所的な最適解に陥る可能性があるため、問題に応じた調整が不可欠である。

また、MQEA では、世代ごとに非優越ソートおよび混雑距離ソートの順位を基準にして、グループの再編成を行う仕組みが採用されている。この再編成のプロセスにより、探索の適応性が向上し、従来の進化的アルゴリズムよりも高品質な解の探索が可能となることが期待される。しかし、グループの編成は必ずしも個体間の情報の類似性を保証す

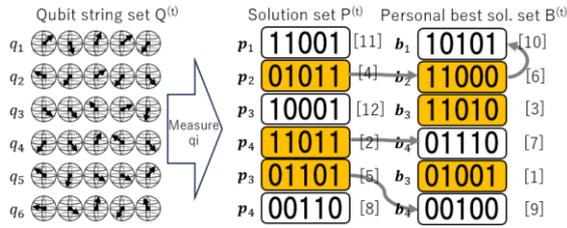


図 2：解の生成と自己最適解の更新の流れ

るものではないため、形成されたグループ内の個体情報が多様である可能性があり、それにより探索の効率が必ずしも向上しない場合もある。

2.2. 提案する MQEA/I の特徴

MQEA/I は、MQEA に対してグループの概念を持たないペアスワップ戦略に基づく量子進化アルゴリズム QEA with Pair-Swap strategy(QEAPS)を基盤としつつ NSGA-II の枠組みを導入した手法である^[7]。各個体は自身が過去に獲得した最良解を保持する仕組みを維持している。

MQEA/I における個人最良解は、非優越解によって形成されるフロントを維持する役割を果たし、進化の情報源となる目的解 (objective solutions) として機能する^{[7]-[8]}。各個体は、基本的に自身の最良解のみを参照して孤立的に進化する。しかし、一部の個体のみが情報を交換し、各世代で得られた非優越解によって形成されるフロントを維持しつつ、探索が停滞した個体を活性化する仕組みが組み込まれている。個体間の優劣は、非優越ソートおよび混雑距離ソートによって決定される。

さらに、確率振幅を更新するための新たな回転角ルックアップテーブルを提案し、探索の最終段階における探索領域の過剰な収束を回避する。このルックアップテーブルでは、得られた解が自身の最良解と同一である場合に、改悪を許す。MQEA/I は、集団サイズおよび終了条件を除けば、回転角という 1 つのパラメータのみを持つ。進化的アルゴリズムは、問題の特性に応じて適切なパラメータを設計する必要があり、パラメータの値は探索性能に大きな影響を与える。しかし、パラメータの設計には煩雑なプロセスが必要であり、多くの時間を要する。そのため、調整が必要なパラメータの数を減らすことは、進化的アルゴリズムを利用する上で大きな利点となる。

MQEA/I の特徴を次に挙げる。

- ・最良解(personal best)を導入することで、NSGA-II、MQEA 同様、これまでの探索で得られた優良な解を適切に保持できる。
- ・最良解を導入することで 1 個体のみでも解探索が可能となり、それぞれの個体が各近傍を探索することで、幅広い解空間での探索が期待できる。
- ・単一の母集団を用いて解探索を行うため、MQEA で必要となるグループ数の調整が不要となる。また、最

表 1：ルックアップテーブルの提案

p_{ij}	b_{ij}	Relation between b_i and p_i	θ_{ij} (for unitary transform)			
			$\alpha_{ij}\beta_{ij} > 0$	$\alpha_{ij}\beta_{ij} < 0$	$\alpha_{ij} = 0$	$\beta_{ij} = 0$
0	1	b_i dominate p_i	$\theta_{C_{ij}}$	$-\theta_{C_{ij}}$	—	$\pm\theta_{C_{ij}}$
1	0	b_i dominate p_i	$-\theta_{C_{ij}}$	$\theta_{C_{ij}}$	$\pm\theta_{C_{ij}}$	—
0	0	b_i equals to p_i	$\pm\theta_{C_{ij}}$	$\pm\theta_{C_{ij}}$	—	$\pm\theta_{C_{ij}}$
1	1	b_i equals to p_i	$\pm\theta_{C_{ij}}$	$\pm\theta_{C_{ij}}$	$\pm\theta_{C_{ij}}$	—
—	—	Otherwise	0	0	0	0

良解に近づくように各量子風ビットの確率振幅を進化させることで、近傍交叉や突然変異などの遺伝的操作が不要となり、交叉率や突然変異率などのパラメータ調整も不要となる。

2.3. パレートフロント探索機構の導入

提案するアルゴリズムでは、解集団の進化においてパレートフロントの均等探索機構を導入する。パレートフロントとは、解の中で他の解に支配されない非優越解の集合を指す。目的数が増加するにつれて、解集団が広範囲に分布し、収束性が低下するという問題に対して、パレートフロントを均等に探索することによって解の多様性を保持しながら、収束を促進することが可能と考える。

提案するアルゴリズムの進化プロセスは、ランダムに生成された量子ビット表現の初期解集団を基点とし、パレートフロント上での均等化を通じて多様性を維持しながら、交叉や突然変異といった進化操作を適用し、目的関数評価による非優越解の選択と世代交代を繰り返すことで、目的空間内での均等な分布と最適解への収束を実現し、目的数が増加しても収束性と多様性を効果的に管理できるよう構成されている。

2.4. MQEA/I の手順

MQEA/I の手順と各プロセスの詳細は以下の通りである。図 2 に解の生成から個人最良解の更新までのフローを示す。図 3 は MQEA/I の処理手順をフローチャートで示したものである。

[STEP 1] 個体 $Q^{(t)}$ と個人最良解 $B^{(0)}$ の初期化

集団は N 個の個体で構成される。個体 i ($i=1, 2, \dots, N$) は、量子ビット列 q_i と、過去の進化過程で得られた自身の最良解 $b_i=[b_{i1}, b_{i2}, \dots, b_{iM}]$ を持つ。世代 t における集団の量子ビット列の集合を $Q^{(t)}$ と表す。量子ビット列 q_i は M 個の量子ビットから構成される。各量子ビット q_{ij} ($j=1, 2, \dots, M$) は、確率振幅 α_{ij} および β_{ij} を持ち、 $|\alpha_{ij}|^2$ および $|\beta_{ij}|^2$ が、それぞれ状態 $|0\rangle$ および状態 $|1\rangle$ が観測される確率を示す。

[STEP 2] 量子ビット列 $Q^{(t)}$ の観測と解集合 $P^{(t)}$ の生成

量子ビット列 $Q^{(t)}$ を観測し、バイナリ情報 $p_i=[p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iM}]$ を取得する。各 p_i は対応する量子ビット列 p_i の確率振幅に基づいて観測される。これにより、各個体の量子ビット列からバイナリ型の候補解を得る。この p_i は

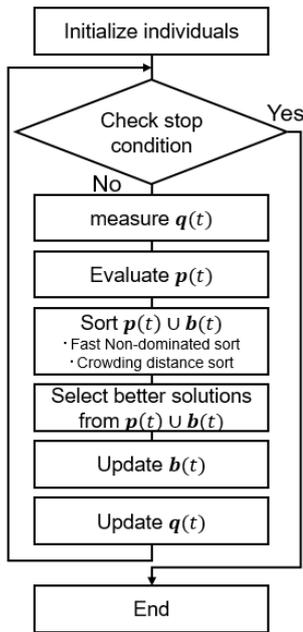


図3: MQEA/I のフローチャート

バイナリ最適化問題の候補解となる。世代 t における解集合を $P^{(t)}$ と表す。

[STEP 3] 解集合 $P^{(t)}$ の評価

各候補解 p_i に対して、目的関数 $fd(p_i)$ を計算し、適応度 (fitness) を評価する。ただし、 d は目的関数の次元を示す。

[STEP 4] 解集合 $P(t)$ と最良解集合 $B(t)$ のソート

非優越ソートおよび混雑距離ソートを適用し、 $P(t)$ と $B(t-1)$ の和集合をソートする。多目的最適化問題では、多様な解を探索する必要があるため、同一の解が複数存在する場合はランクを下げる。NSGA-II や MQEA では、 $P(t)+P(t-1)$ に対してこの処理を適用するが、MQEA/I では、 $B(t-1)$ を NSGA-II および MQEA の $P(t-1)$ に対応させている。

[STEP 5] 非優越解集合のフロントの維持

非優越ソートおよび混雑距離アサインメントによって、解 s のランク $r(s)$ を決定する。ランク値が小さいほど優れた解であり、混雑距離が大きい解が優先される。

例えば、図1に示すように、 p_1 から p_6 のランクがそれぞれ 11, 4, 12, 2, 5, 8 であり、 b_1 から b_6 のランクが 10, 6, 3, 7, 1, 9 である場合、ランク値が小さい解が選択される。和集合 $P(t)+B(t-1)$ のサイズは $2N$ であり、ランク N 以下の解が優れた解となる。

[STEP 6] 量子ビットの確率振幅の更新

個体 q_i の解 p_i が自身の最良解 b_i に支配されている場合、ユニタリ変換に基づき、回転角リスト $u_i = [\theta_{i1}, \theta_{i2}, \dots, \theta_{id}]$ を用いて量子ビットを更新する。また、本研究では、探索の最終段階での停滞を防ぐため、表1のような回転角ルックアップテーブルを使用し、確率振幅の更新に利用する。

このルックアップテーブルでは、解 p_i が最良解 b_i と一致

する場合、確率振幅をランダムに θ_{ij} または $-\theta_{ij}$ に回転させる。この操作は、焼きなまし法 (Simulated Annealing) と同様に性能の悪化を許容し、探索の多様性を確保する効果を持つ。その他の場合は、従来のルックアップテーブルと同様に回転角を適用する。

[STEP 7] 最良解 $B^{(t)}$ の更新

t 世代目に得られた解 p_i が自身の最良解 b_i よりも優れている場合、 b_i を p_i で置き換える。図1の例では、 b_2 と b_4 が、それぞれ p_2 と p_4 に更新される。各世代の優れた解を $B^{(t)}$ に保存することで、非優越解を保持する。初期世代では $B^{(0)}$ は空であるため、すべての解 p_i が個人最良解として直接格納される。

[STEP 8] 終了条件の判定

MQEA/I は、[STEP 2] から [STEP 7] のプロセスを繰り返し実行し、事前に設定された終了条件を満たすまで進化を継続する。

3. 計算機実験

本研究では、提案した量子風進化アルゴリズムの有効性を評価するために、ETH テスト問題集^[9]から選択した多目的 0-1 ナップサック問題を用いて評価を行った。多目的 ナップサック問題 (multi-objective knapsack problem: MOKP) は、特定の重さを持つアイテムを制約内で最大化するアイテムの組み合わせを選ぶという、組合せ最適化問題である。この問題は多目的最適化問題にも応用可能で、各アイテムの選択を目的に応じた制約条件のもとで最適化することが求められる。MQEA/I と NSGA-III を用いて、以下の条件で実験を行った。

3.1. 2 目的 50 アイテムの MOKP の実験結果

本研究では、2 目的 50 アイテムの MOKP を用い、MQEA/I および NSGA-III の個体数は 91 個、世代数は 10^5 世代として実験を行った。また、Das ら^[10]の参照ベクトルを用い分割数は 3 とした。図4, 5 のグラフは NSGA-III と MQEA/I による実験結果を可視化したものである。今回は最小化指標でナップサック問題を解き、価値の指標に -1 をかけている。

結果を比較すると、参照ベクトルの分割数を 3 としたため、NSGA-III は参照ベクトル付近に収束していると考えられる。得られた解は MQEA/I よりも良好であることが確認できる。これは、NSGA-III が多目的最適化に特化した収束性の高い戦略を持つため、探索が収束しやすく、より優れた解を重点的に得る傾向にあるためである。しかし、パレートフロント上に存在する解の分布が狭まることで、探索の多様性が制限される可能性も示唆される。

一方、MQEA/I では、精度は NSGA-III と比較してやや劣るものの、パレートフロント全体を一様にカバーする解が得られた。これは、MQEA/I が最良解を保持しながら、量子ビットの確率振幅の更新によって多様な探索を行う特性

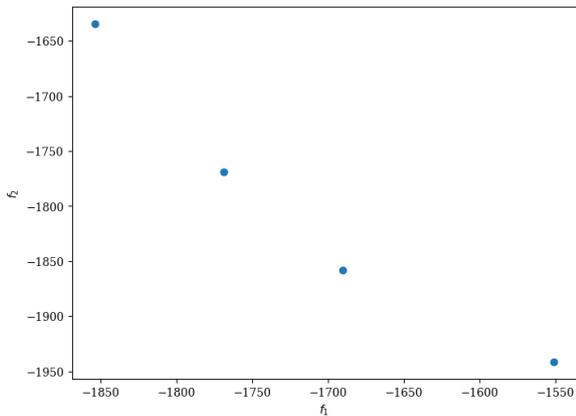


図 4 : NSGA-III による実験結果 (2 目的 50 アイテム MOKP)

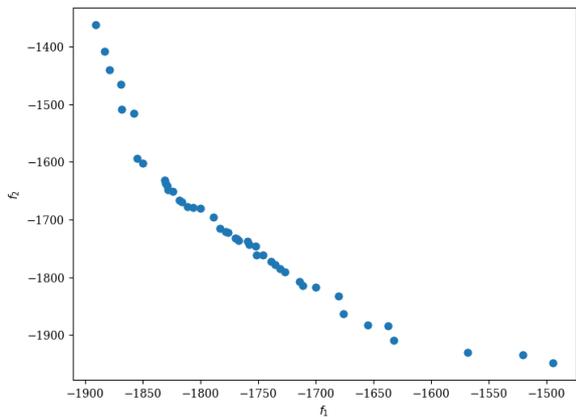


図 5 : MQEA/I による実験結果 (2 目的 50 アイテム MOKP)

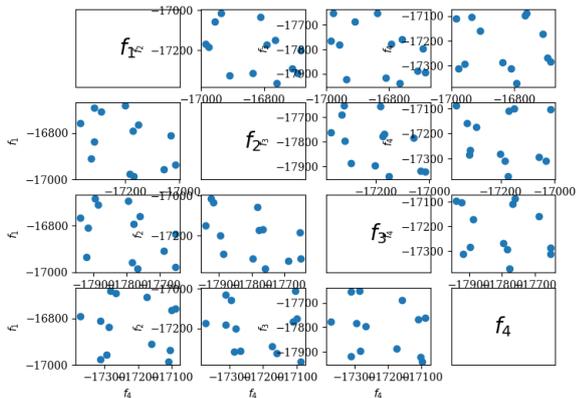


図 6 : NSGA-III による実験結果 (4 目的 500 アイテム MOKP)

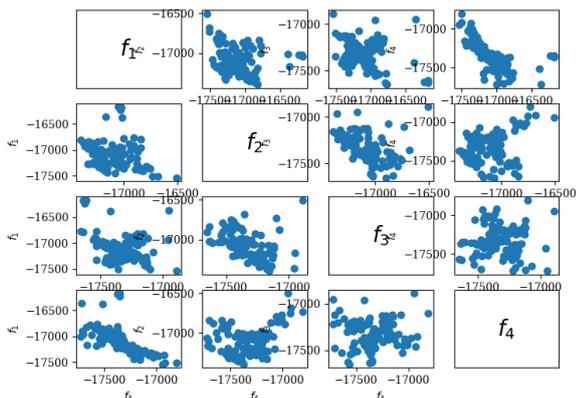


図 4 : NSGA-III による実験結果 (4 目的 500 アイテム MOKP)

を持つためである。特に、回転角ルックアップテーブルが局所解への収束を抑制し、解の多様性を確保する効果を発揮したと考えられる。

3.2. 4 目的 500 アイテムの MOKP の実験結果

本研究では、4 目的 500 アイテムの MOKP を用い、MQEA/I および NSGA-III の個体数は 120 個とし、その他のパラメータは 2 目的の MOKP と同じ値を用いた。

NSGA-III は 2 目的 50 アイテムの MOKP と同様に参照ベクトル付近への収束が確認できる。一方、MQEA/I の分布は 2 目的の MOKP と同様に広範囲に分布している。また、MQEA/I の解の精度は改善されており、NSGA-III と同程度の解を発見できた。

5. おわりに

提案アルゴリズムである MQEA/I は、NSGA-III と比較するとパレートフロント上の解の精度は若干低いが、より多くの解を取得している。これは、量子ビットによる確率的な探索メカニズムが解の多様性を向上させる効果を持つためと考えられる。特に、回転角のルックアップテーブルによる確率振幅のランダムな変動により、局所解への過剰な収束を防ぐことで、多様な解を探索できる点が特徴的である。

今回は可視化して実験結果を確認したが、今後は hyper volume などの評価指標を使用し、多作性能を評価したい。また、提案する MQEA/I は解探索の収束速度が遅いため、より優れた解への収束速度を高める処理の導入を検討したい。その後、大規模な最適化問題や他の最適化問題へ適用し、比較実験を行うことで、提案手法の有用性を検証する。

6. 謝辞

本研究は JSPS 科研費 24K15112 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal and T. Meyarivan: A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II, IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol. 6, No. 2, pp. 182-197, 2002.

[2] K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal, and T. Meyarivan, “A fast elitist multi-objective genetic algorithm: NSGA-II”, IEEE Transactions on Evolutionary Computation, vol. 6, no. 2, pp. 182-197, 2002.

[3] E. Zitzler, M. Lanumanns, and L. Thiele, “SPEA2: Improving the strength pareto evolutionary algorithm for multiobjective optimization”, Evolutionary Methods for Design, Optimisation and Control with Application to Industrial Problems (EUROGEN 2001), pp. 95-100, 2002.

[4] H. Ishibuchi, and K. Narukawa, “Recombination of

similar parents in EMO algorithms”, Lecture Notes in Computer Science, Evolutionary Multi-Criterion Optimization, Springer, Vol. 3410, pp.265-279, 2005

[5] K.-H. Han and J.-H. Kim:

Quantum-inspired evolutionary algorithm for a class of combinatorial optimization, IEEE Trans. Evolutionary Computation, Vol. 6, No. 6, pp. 580-593, 2002.

[6] Y. Kim, J.-H. Kim and K.-H. Han:

Quantum-inspired Multi-objective Evolutionary Algorithm for Multi-objective 0/1 Knapsack Problems, in Proc. 2006 IEEE Congress on Evolutionary Computation, pp. 9151-9156, 2006.

[7] Li, Z., Rudolph, G., and Li, K.: Convergence performance comparison of quantum-inspired multi-objective evolutionary algorithms. Computers and Mathematics with Applications, vol. 57, no. 11-12, pp. 1843-1854 (2009).

[8] Lu, T.-C., and Yu, G.-R.: An adaptive population multi-objective quantum-inspired evolutionary algorithm for multi-objective 0/1 knapsack problems. Information Sciences, vol. 243, pp. 39-56 (2013).

[9] the test problem suite ETH

<https://sop.tik.ee.ethz.ch/download/supplementary/testProblemSuite/>

[10] Indraneel Das and J. E. Dennis. Normal-boundary intersection: a new method for generating the pareto surface in nonlinear multicriteria optimization problems. *SIAM J. on Optimization*, 8(3):631-657, March 1998.

URL: <http://dx.doi.org/10.1137/S1052623496307510>, doi:10.1137/S1052623496307510.