目的関数の幾何構造に適応する複数分布を用いた群知能最適化

大谷 紀子 研究室
2272102　若月 玲之

1. 背景と目的

最適化問題は，目的関数を最大化または最小化する変数の値を求める問題である．関数の構造情報が利用できないブラックボックス最適化において，粒子群最適化（PSO）は更新則が直感的で，実装や拡張が容易であることから，広く用いられているが，変数間に依存関係を有する非分離問題や，目的関数の形状が極端に歪んだ悪条件問題に対して，性能が低下することが指摘されている．PCMPSO では，良好解間の差分を利用した速度更新則を導入し，上記の弱点を克服した[1]．一方，非分離・悪条件問題に対して有効な手法として CMA-ES が挙げられるが，共分散行列の更新に伴う計算コストが高く，アルゴリズムが比較的複雑である．本研究では，非分離・悪条件問題に対して，PSO 系の既存手法よりも少ない評価回数で収束し，アルゴリズムの解釈が容易で実装しやすい探索手法として，Distribution Swarm Optimization（DSO）および DSO の変種である Shared Implicit Covariance DSO（SIC-DSO）を提案する．

2. 提案手法

DSO では，集団に含まれる個体I_i (i=1,...,N) が，探索過程において得られた最良位置$\boldsymbol{p}_i$をそれぞれ保持する．個体I_iに対する候補解$\boldsymbol{x}_i$は，集団内からランダムに選択した複数の個体の最良位置を用いて，式(1)により生成する．

$$\boldsymbol{x}_i \ = \ \boldsymbol{p}_i + \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \alpha_{ij} \boldsymbol{d}_{ij} \qquad (1)$$

ここで，$\mathcal{J}_i$は選択された個体のインデックスの集合$\mathcal{J}_i \subset \{1, \dots, N\} \setminus \{i\}$，$\alpha_{ij}$は独立な確率変数，$\boldsymbol{d}_{ij}$は$\boldsymbol{d}_{ij} = \boldsymbol{p}_j \ - \ \boldsymbol{p}_i$により定義される差分ベクトルを表す．$\boldsymbol{x}_i$と$\boldsymbol{p}_i$のうち，評価値が良好な点を次の$\boldsymbol{p}_i$とする．DSO のアルゴリズムを図 1 に示す．

SIC-DSO では，候補解を式(2)により生成し，DSO 同様に最良位置を更新する．

$$\boldsymbol{x}_i \ = \ \boldsymbol{p}_i + \sum_{j=1}^{N} \alpha_{ij} \left(\boldsymbol{p}_j - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \boldsymbol{p}_k\right) \qquad (2)$$

α_{ij}をガウス分布から独立にサンプリングする場合，各世代において個体I_iが生成する候補点$\boldsymbol{x}_i$の分布は，対応する共分散行列を用いた多変量正規分布からのサンプリングと等価であり，滑らかで有効な探索方向が一貫している問題において，必要となる個体数を少なく抑えることが可能である．

3. 実験

提案手法の性能を評価するため，実験 A と実験 B を行った．実験 A では，COCO（BBOB）ベンチマークの問題を対象とした．24 個の関数に対して，シフトおよび回転を施した 15 個のインスタンスが用意されており，評価回数の上限を次元数の 10^5倍とする独立試行を設定した．比較手法とし

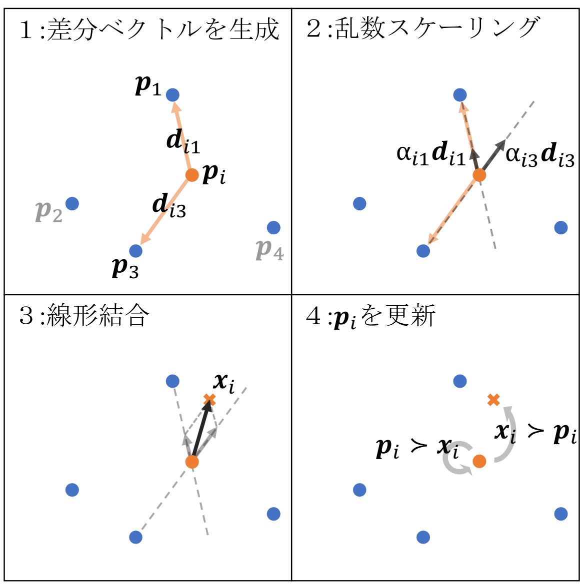

図 1：DSO の候補解生成手順

て，PSO，回転不変性を備えた SPSO2011，非分離・悪条件問題に適応した PCMPSO，性能比較の上限的参照である CMA-ES を採用した．10^{2}~10^{-8}の区間において数スケールで等間隔な 51 点の目標精度を設定し，仮想リスタートにより目標達成までに要した評価回数を得た．評価回数を確率変数とみなし，経験累積分布（ECDF）を横軸を評価回数 x、縦軸を x 以内に目標精度を達成した（関数×目標精度）ペアの割合として可視化した．20 次元における (a)Moderate conditioning 関数群，(b)High conditioning 関数群，(c)Step Ellipsoid，(d)Ellipsoid，(e)Sharp Ridge，および(f)Schaffer F7 condition 1000 に対する ECDF を図 2 に示す．

DSO は多峰を除く 14 関数中 12 関数で PSO 系既存手法よりも少ない評価回数で目標精度に到達した．一方，多峰性関数では差分ベクトルによる探索方向推定が機能せず，高精度な収束は得られなかった．SIC-DSO は滑らかで有効な探索方向が一貫している問題で DSO よりも速く収束するが，非線形な変換が施された関数や滑らかでない関数では，収束速度および精度の低下が確認された．

実験 B では，GPU を用いた並列計算環境において，粒子数を変化させながら，SIC-DSO および CMA-ES により，それぞれ 3 回ずつ 80 次元 Ellipsoid 関数の解探索を行った．評価値の精度が 10^{-8}以下に到達する，あるいは評価回数が次元数の10^{5}倍に達するまでの実行時間の平均を図 3 に示す．SIC-DSO は粒子数が 160~220 の範囲において CMA-ES より短い実行時間を示した．

4. 考察

SIC-DSO では集団全体で共有される暗黙的な共分散構造に基づいて探索分布が更新されるため，滑らかで有効な探索方向が一貫している問題に対しては，探索分布の主軸が迅速に定まり，少ない世代数で収束する．一方，DSO では各個体が参照する差分集合が異なり，探索方向の相関構造が粒子ごとに分散して形成されるため，探索方向の多

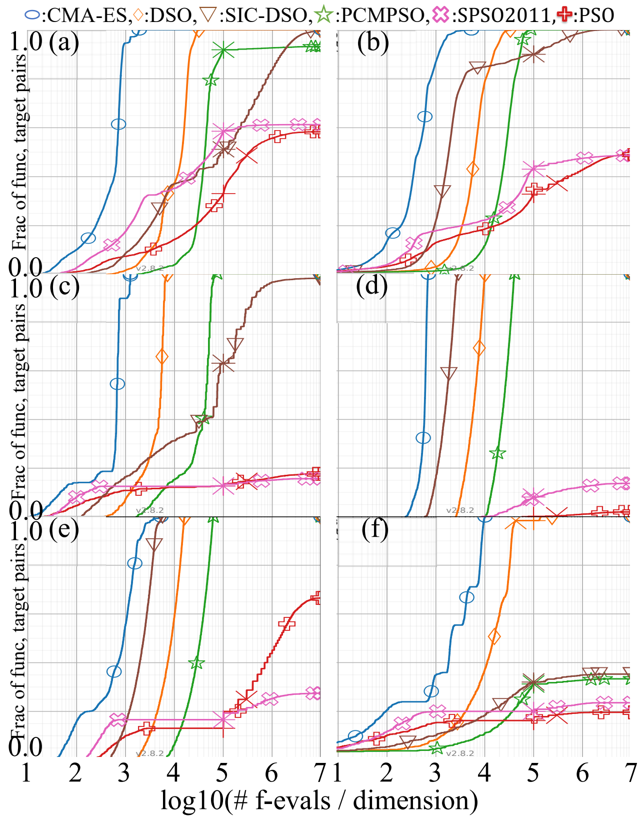

図 2：COCO(BBOB)における ECDF

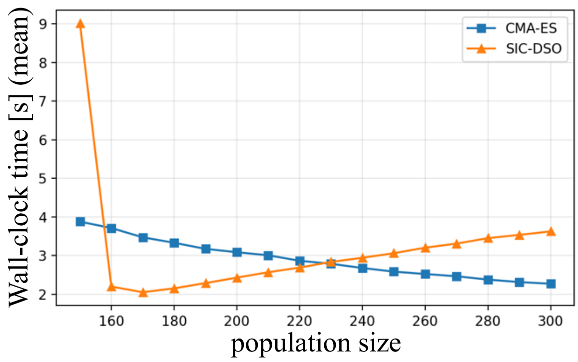

図 3：80D Ellipsoid の並列実行時間比較

様性が集団内に保持されやすく，非線形な変換が施された関数や滑らかでない関数においても，特定の方向への過度な集中が生じにくく，探索が安定すると考えられる．また，並列化時の性能については SIC-DSO は CMA-ES と比較して世代数が著しく多く，評価関数計算が軽量な条件で相対的に有利に働く可能性がある．また，各個体が同時に評価する候補解の数を増やすことでさらなる高速化が図れることが予想される．

参考文献

[1] K. Jin’no, Y. Hariya, T. Shindo,“A Study of PCMPSO,” *Proc. NOLTA 2017*, pp. 506–509, 2017.