

最適化問題における群知能による補間探索

山本 聖也

富山県立大学工学部電子・情報工学科情報基盤工学講座

要約

Swarm Intelligence (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。しかし、粒子群最適化の収束は根拠がない。本論文では、より良い最適解を求めるための群知能とニューラルネットワークダイナミクスの新しいハイブリッド動的システムを提案した。本論文の主な結果として、粒子群最適化とニューラルネットワークのメカニズムを理論的にどのように組み合わせるかを示し、提案システムが客観的な環境のグローバルな情報に基づいて補間探索を実現できることを確認した。

キーワード：粒子群最適化、勾配法

1 はじめに

粒子群最適化(Particle Swarm Optimization: PSO)は、群の中の固体(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[1]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。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は、[2]である。

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。特に、進化法は盛んに行われ、シミュレーションベースを用いてアプリケーションの容易さから開発、適用されている[3]。例として、PSOとSimplexのハイブリッド法が提案されている[4]。また、PSOと遺伝的アルゴリズムの方法が提案されている[3]。大規模問題の最適化工学の重要性はますます高まっている。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る。

したがって、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提供する。そこで連続PSOアルゴリズムから、ニューラルネットワークに同等の力学を定式化することができる。そこで、グローバル最適の補間探索を実現するための補強学習機構の適用を検討する。

本研究は以下のように編成されている。2章では、PSOの概要について簡単に解説する。3章では、ハイブリッドPSOについての解説を行い、最急降下法を用いてそれを導出する。4章では、ハイブリッドPSOの有効性を示し、数値実験ならびに考察を行う。最後に、5章で結論を述べる。

2 PSOの概要

2.1 PSOアルゴリズム

PSOは群と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(pbest)とその集団の最適値(gbest)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(図1: 参照)より、pbestに向かう $c_1 r_1 (x_{db}^k - x_d^k)$ 、gbestに向かう $c_2 r_2 (x_{db}^k - x_d^k)$ 、これまでの進行方向へ向かう wv_d^k の3つのベクトルを合成して速度ベクトル v_i^{k+1} を決定し、それを元に次に移動する位置 x_d^{k+1} を決定する。

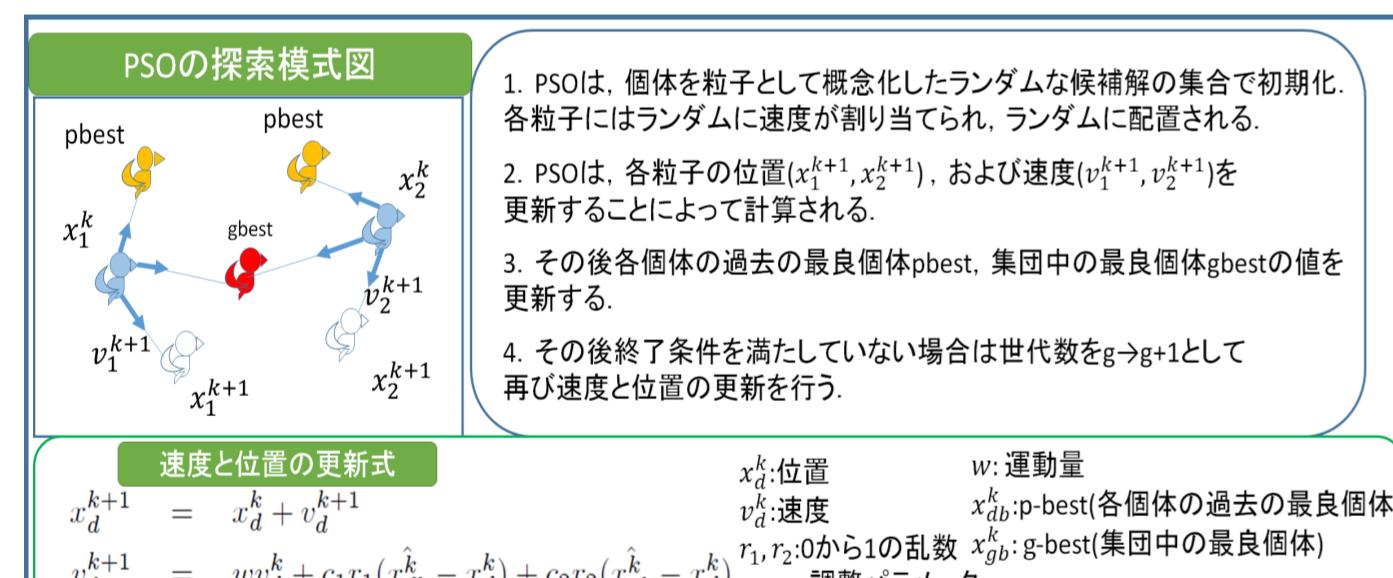


図1 PSOの解説

2.2 PSOの安定解析

PSOの探索式はランダム要素を含み、同時に最良解情報であるpbestとgbestが探索に伴い変化するという時変性を有している[1]。このままの形では理論解析が困難であるので、一つのParticleに着目し、一次元の位置 x と速度 v について考え、さらにpbestとgbestを一つの点に縮約した簡略モデルが提案されている[3]。この簡略モデルは、確定的な線形時不変システムとして表現され、よく知られた固有値解析により、Particleが構成するシステムの安定・不安定が解析的に評価でき、その安定性を示す(図2: 参照)。

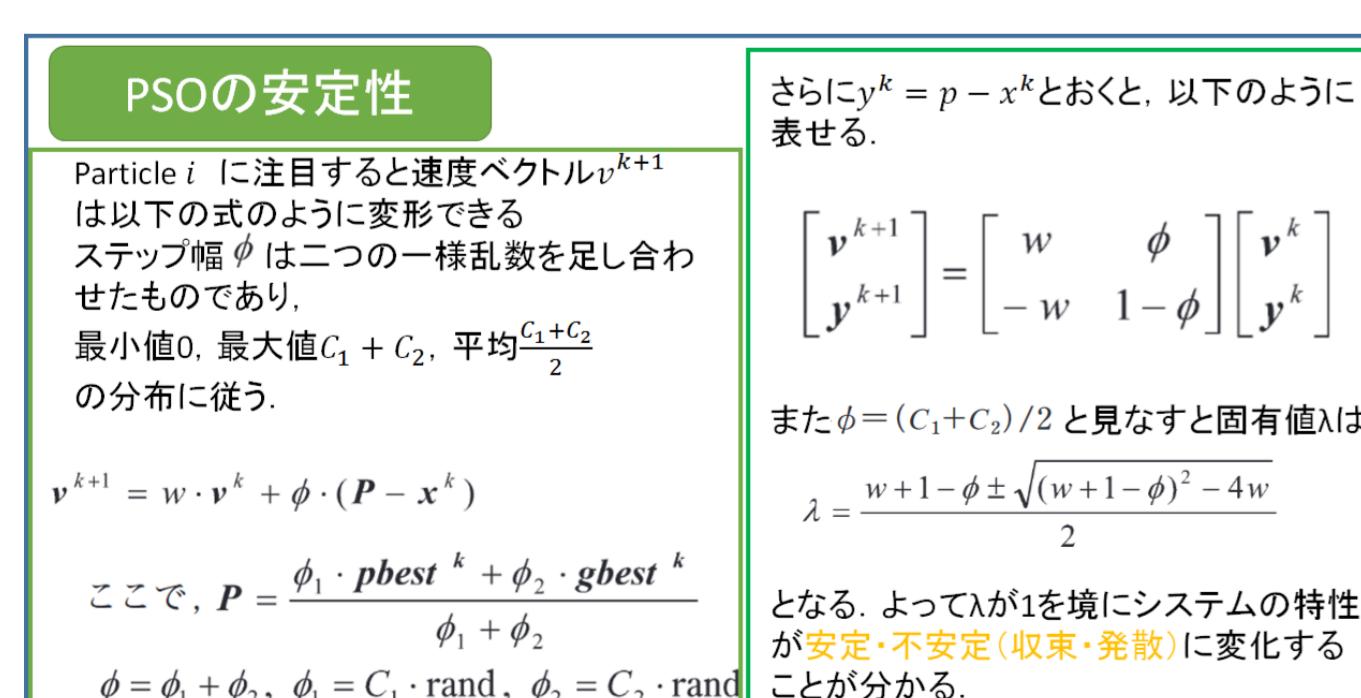


図2 PSOの安定性

2.3 連続型PSOアルゴリズム

連続型PSOアルゴリズム(Continuous Particle Swarm Optimization; CPSO)について述べる。

以下のベクトルおよび行列を以下のように定義する(図3: 参照)。

- $X \triangleq [x_1 \dots x_n] \in \mathbb{R}^{dn}$: 位置行列
- $V \triangleq [v_1 \dots v_n] \in \mathbb{R}^{dn}$: 速度行列
- $X_{db} \triangleq [x_{db_1} \dots x_{db_n}] \in \mathbb{R}^{dn}$: 局所最適位置行列
- $X_{gb} \in \mathbb{R}^d$: グローバル位置行列
- $F \triangleq [f(x_1) \dots f(x_n)] \in \mathbb{R}^{dn}$: 蓄積された目的関数ベクトル
- $T: 1$ からなる行ベクトル
- $Q_i \in \mathbb{R}^n: i$ に等しい i^{th} を除いて、すべての要素が 0 に等しい列ベクトル
- $I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 大きさ n の単位行列

図3 定義する各ベクトルおよび行列

ベクトル y と $\text{sgn}(y)$ の要素によって与えられる対角要素を持つ対角行列を $\text{diag}[y]$ とする。 y の σ 関数を表す。として $\text{sgn}(y) = 1$ if $y > 0$ の場合は $\text{sgn}(y) = -1$ if $y < 0$ 。

したがって、正の定数であると仮定すると、最小化のために X の進化を近似することが提案される。また CPSO の安定性解析も議論されている[5]。

状態変数 X 、 V 、 X_{db} はベクトルではなく、以前に定義された適切な次元の行列であるため、上記の表記法は標準状態空間表記法ではない。この説明は、明瞭さを失うことなく提供する単純さとコンパクトさに動機付けられている。また以下に CPSO の位置と速度の更新式と、アルゴリズムについて示す(図4: 参照)。

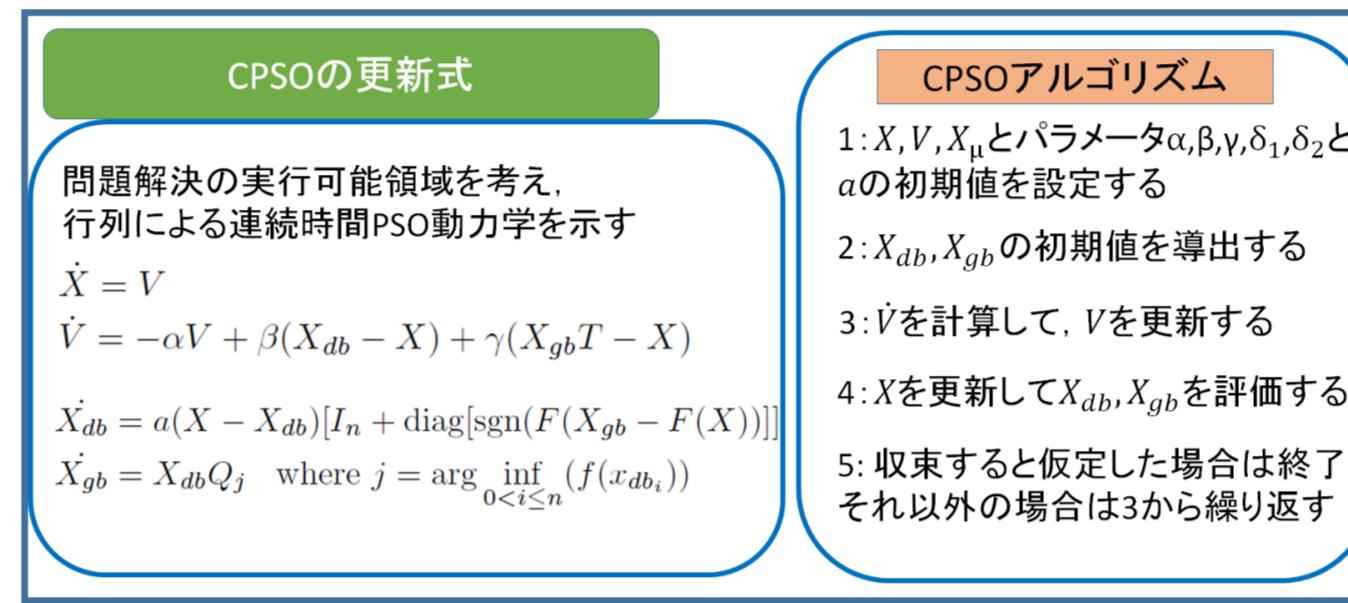


図4 CPSOの解説

3 ハイブリッドPSOの提案

3.1 勾配法

[1] ではオリジナルのPSOアルゴリズムに含まれる恣意性を少なくし、より効率的かつ高精度な探索を実現するために勾配法による速度評価を導入する。運動性素子が自分の置かれた近くの環境を知覚してより適合度の高い空間座標を獲得するために、以下のようなセンサリング・アルゴリズムを搭載する。

勾配によるスケーリングパラメータの導入を行う。素子が投入された探索空間(ξ, η)には問題に応じた目的関数 Q が定義されており、素子はその最大値か最小値を探索するものとする。現時間ステップ k における素子の位置座標を(ξ, η, k)とし、その座標における目的関数の値を Q_k として、素子の移動に伴う目的関数の変化に注目すると次の目的関数の離散的な勾配 α が得られる(図5: 参照)。

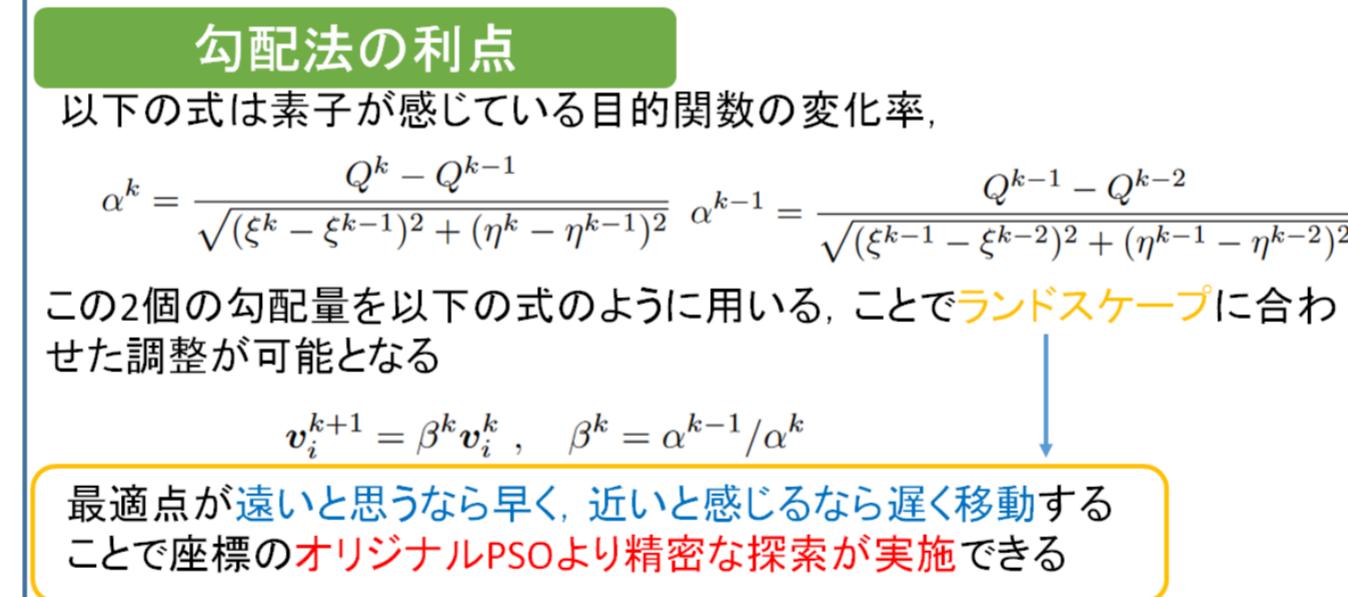


図5 勾配法の利点

3.2 ハイブリッド化

PSOの自然進化の形態として、速度を決定するパラメータである C_1, C_2 に GA の突然変異の概念を取り入れることでより大域的な探索を目指した Evo- lutionary PSO(EPSO)[23]、Particle に自然淘汰の概念を取り入れ、より良質な解への収束特性を高めた Hybrid PSO(HPSO)[24]などがある。

また、gbest の複製を作成し突然変異を施すことにより探索性能の向上を目指した CMPSO(PSO with Controlled Mutation)の提案もある[25]。これは、速度情報を操作する EPSO とは異なり、群れ全体の探索に利用される最良の位置情報 gbest に作為的に突然変異を与えることにより群れに新たな振動を生み、大域的な探索を可能とするものである。突然変異ではなく gbest をもつ Particle の複製に目的関数の近似勾配を導入し、探索性能を向上させた QGPSO(PSO with Quasi-Gradient)の提案もある[26]。Rosenbrock ベンチマーク問題など、勾配情報がうまく作用する問題に対して威力を発揮することが確認されている。加えて結合型離散化勾配系カオスモデルに対して、PSO の探索戦略である PSO 型結合を導入したモデルである PSO 結合型離散化勾配系カオスモデル[1]という手法では、確定論的勾配系であること、確率的揺らぎではなくカオスによって揺らぎを与えるというところから PSO モデルと本質的に異なる構造を持つモデルである。

これらのハイブリッド手法の目的は、Particle がお互いに余り近くに移動するのを妨げることにより群れの多様性を高めることや、gbest 情報から解が存在すると期待される領域を集中的に探索する能力を高めることにある。

3.3 提案ハイブリッドPSOアルゴリズム

本節では提案手法であるハイブリッドPSOについて解説する(図6: 参照)。PSO の応用法である CPSO の応用法であり、 X, Y の二つの行列に加えて Z を加えつつ、いくつかのパラメータを与えて再急降下法を用いる。 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ などの実数は、PSO とニューラルネットワークを調整するために重み付けるパラメータである。 X_μ はニューラルネットワークのダイナミクスに由来する新しい行列である。 X_μ は以下のダイナミクス[6]と定義する。(図7: 参照)

ハイブリッドPSOの更新式

以下は Z を表す式。

$$Z = \beta(X_{db} - X) + \gamma(X_{gb} T - X)$$

右の条件を考慮する。

$$X_0 \text{ は初期位置行列である。 } X = X_0 + \int_0^t V(s) ds$$

$$\dot{X} = V$$

$$\alpha, \beta, \gamma, \delta \text{ は } 0 \text{ ではない正の実数 } \beta + \gamma + \delta = 1 \text{ を満たす}$$

$$\dot{Z} = \beta(\dot{X}_{db} - \dot{X}) + \gamma(X_{gb} T - \dot{X}) + \delta(\dot{X}_\mu)$$

$$\text{ここで, } X, V, X_{db}, X_{gb}, T \text{ の次元は上記のとおり。 } X_{db} = a(X - X_{db})I_n + \text{diag}[\text{sgn}(F(X_{gb} - F(X)))]$$

$$X_{gb} = X_{db}Q_j \text{ where } j = \arg \inf_{0 < i \leq n} (f(x_{db_i}))$$

ハイブリッドPSOアルゴリズム

1: X, V, X_μ とパラメータ $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ の初期値を設定する

2: X_{db}, X_{gb} と Z の初期値を導出する

3: Z を計算して、 Z を更新する

4: V を計算して、 V を更新する

5: X を更新して X_{db}, X_{gb} と Z を評価する

6: X_μ を更新する

7: 収束すると仮定した場合は終了し、それ以外の場合は3から繰り返す

図6 ハイブリッドPSOの解説

離散数式

$$\dot{x}_{\mu i} = -C \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(y_i(t))}{\partial y_i} \frac{\partial \varphi(x(t))}{\partial x_i} = z_i(t)$$

$$x_i = -ax_i(t) + z_i(t)$$

$$y_i(t) = \varphi(x_i(t))$$

$$a, C: \text{パラメータ}$$

$$\varphi: \text{シグモイド関数}$$

Xのダイナミクス

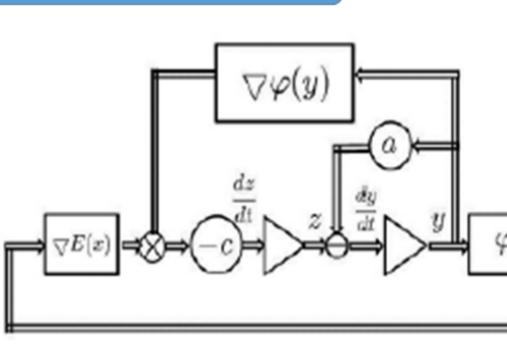


図7 離散数式とハイブリッド理論

次に、差分法を適用する。理論的な分析の観点から、PSO の \dot{V} と \dot{x}_i は同等のものとみなす。 $\beta(\dot{X}_{db} - \dot{X}) + \gamma(X_{gb} T - \dot{X})$ は PSO の速度を制御する。 $\delta(\dot{X}_\mu)$ はニューラルネットワークの速度を制御する。理論的に提案されたハイブリッドの、 $\dot{Z} = \beta(\dot{X}_{db} - \dot{X}) + \gamma(\dot{X}_\mu)$ PSO が有するグローバル探索、ニューラルネットワークが持つ局所最急降下法などがある。連続時間モデルでは、PSO とニューラルネットワークの組み合わせの理論的アルゴリズムが考慮されるが、分散モデルによって数値シミュレーションが行われる。サンプリング時間の設定は、係数(β, γ, δ)の値によって変化する。したがって、 X_μ を計算して取得する。

4 数値実験ならびに考察

5 おわりに

本論文では、ニューラルネットワークを用いたハイブリッドダイナミクスを提案し、連続時間PSOアルゴリズムからニューラルネットワークに等価力学を定式化した。提案されたハイブリッド法およびPSOアルゴリズムは、文献からいくつかの困難な連続関数をテストされた。どちらのアルゴリズムも、すべての実行に対してほとんどの手順で収束することに成功しました。

計算コストを考慮すると、提案されたアルゴリズムは、高次元のケースでは非常に競争力のあるパフォーマンスを示し、PSOアルゴリズムも同様に機能する一方、文献では数ステップしかなかった。

将来的には、より広範なベンチマーク問題やシブレックス法やDE(微分進化)との比較などを通じ、性能向上のための行動が求められている。また、提案アルゴリズムの挙動は最小化すべき関数に依存するため、提案された解析手法を用いて、実際のアプリケーションで一意に最良のパラメータセット(β, γ, δ)を決定することはできない。しかし、提案手法では、ニューラルネットワークの傾きの推定により、複雑な全体関数を推定することができる。このように関数の複雑さを推定することができれば、将来の研究方向の一つである提案分析法を利用してパラメータセットのチューニング方法を開発することができる。

References

- J. Kennedy, R.C. Eberhart: Particle swarm optimization, *IEEE Conf. On Neural Networks, IV, Piscataway, NJ*, pp. 1942-1948 (1995).
- J. Kennedy, R.C. Eberhart, Y. Shi: "Swarm intelligence", Morgan Kaumann Publishers, San Fran-cisco, CA, pp. 1942-1948, 2001.
- S. F. Shu-Kai, Z. Erwie: A hybrid simplex search and particle swarm optimization for unconstrained optimization, *European Journal of Operational Research*, pp. 527-548 (2007).
- Y. Shimizu: Proposal of Evolutionary Simplex Method for Global Optimization Problem, *Information Systems Society of Japan*, vol. 24, No5, pp. 119-126 (2011).
- H. M. Emara and H.A. Abdel Fattah: "Continuous swarm optimization technique with stability analysis," *Proceeding of the 2004 American Control Conference*, 2811-2817 (2004).
- M. Jiang, Y. P. Luo and S. Y. Yang: "Stochastic convergence analysis and parameter selection of the standard particle swarm optimization algorithm," *Information Processing Letters* vol