勾配情報にもとづく局所探索を組み込んだハイブリッド粒子群最適化

TOYAMA Prefectural University

1515050 山本聖也　　情報基盤工学講座 指導教員　奥原浩之

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ッ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，勾配情報，局所探索

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．社会的方法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．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(**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 $c_1r_1(x_{db}^k - x_d{}^k)$，**gbest**に向かう $c_2r_2(x_{db}^k - x_d{}^k)$，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 決定する．

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[3]. 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[2]. 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**1**参照).

PSOの安定性

Particle i に注目すると速度ベクトル v^{k+1} は以下の式のように変形できる
ステップ幅 ϕ は二つの一様乱数を足し合わせたものであり，
最小値0，最大値 C_1+C_2，平均 $\frac{C_1+C_2}{2}$ の分布に従う．

$$\boldsymbol{v}^{k+1} = w\cdot\boldsymbol{v}^k + \phi\cdot(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{x}^k)$$

$$\text{ここで，}\boldsymbol{P} = \frac{\phi_1\cdot \boldsymbol{pbest}^k + \phi_2\cdot \boldsymbol{gbest}^k}{\phi_1+\phi_2}$$

$$\phi=\phi_1+\phi_2,\ \phi_1 = C_1\cdot\mathrm{rand},\ \phi_2 = C_2\cdot\mathrm{rand}$$

さらに $y^k = p - x^k$ とおくと，以下のように表せる．

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}^{k+1} \\ \boldsymbol{y}^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w & \phi \\ -w & 1-\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}^{k} \\ \boldsymbol{y}^{k} \end{bmatrix}$$

また $\phi=(C_1+C_2)/2$ と見なすと固有値λは

$$\lambda = \frac{w+1-\phi\pm\sqrt{(w+1-\phi)^2-4w}}{2}$$

となる．よってλが1を境にシステムの特性が安定・不安定（収束・発散）に変化することが分かる．

図1 **PSO**の安定性

2.2 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**2**参照).

- $X \triangleq [x_1 \cdots x_n] \in \Re^{d\times n}$:位置行列
- $V \triangleq [v_1 \cdots v_n] \in \Re^{d\times n}$:速度行列
- $X_{db} \triangleq [x_{db_1} \cdots x_{db_n}] \in \Re^{d\times n}$:局所最適位置行列
- $X_{gb} \in \Re^{d}$:グローバル位置行列
- $F \triangleq [f(x_1) \cdots f(x_n)] : \Re^{d\times n} \to \Re^n$:蓄積された目的関数生ベクトル
- T :1からなる行ベクトル
- $Q_i \in \Re^n$:1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
- $I_n \in \Re^{n\times n}$ 大きさ n の単位行列

図2 定義する各ベクトルおよび行列

ベクトル y と $\mathrm{sgn}(y)$ の要素によって与えられる対角要素を持つ対角行列を $\mathrm{diag}[y]$ とする．y の σ 関数を表す．として $\mathrm{sgn}(y)=1$ **if** $y>0$ の場合は,$\mathrm{sgn}(y)=-1$ **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[4].

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**3**参照).

CPSOの更新式

問題解決の実行可能領域を考え，
行列による連続時間PSO動力学を示す

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

$$\dot{X_{db}} = a(X-X_{db})[I_n + \mathrm{diag}[\mathrm{sgn}(F(X_{gb}-F(X))]]$$
$$\dot{X_{gb}} = X_{db}Q_j \quad \text{where } j = \arg\inf_{0<i\le n}(f(x_{db_i}))$$

CPSOアルゴリズム

1: X,V,X_μ とパラメータα,β,γ,δ_1,δ_2 と a の初期値を設定する
2: X_{db},X_{gb} の初期値を導出する
3: $\dot{V}$ を計算して，V を更新する
4: X を更新して X_{db},X_{gb} を評価する
5: 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3 **CPSO**の解説

2.3 PSOの探索能力の向上

[5]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している．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**k**, η**k**) とし，その座標における目的関数の値を**Qk**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ような目的関数の離散的な勾配αが得られる(図**4**参照).

勾配法の利点

以下の式は素子が感じている目的関数の変化率，

$$\alpha^k = \frac{Q^k - Q^{k-1}}{\sqrt{(\xi^k-\xi^{k-1})^2+(\eta^k-\eta^{k-1})^2}} \quad \alpha^{k-1} = \frac{Q^{k-1}-Q^{k-2}}{\sqrt{(\xi^{k-1}-\xi^{k-2})^2+(\eta^{k-1}-\eta^{k-2})^2}}$$

この2個の勾配値を以下の式のように用いる，ことでランドスケープに合わせた調整が可能となる

$$\boldsymbol{v}_i^{k+1} = \beta^k\boldsymbol{v}_i^k, \quad \beta^k = \alpha^{k-1}/\alpha^k$$

最適点が遠いと思うなら早く，近いと感じるなら遅く移動することで座標のオリジナルPSOより精密な探索が実施できる

図4 勾配法の利点

3 ハイブリッドPSOの提案

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**5**参照）．**PSO**の応用である**CPSO**の応用法であり，X,Y の二つの行列に加えて Z を加えかつ，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す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**6**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 は初期位置行列である．

$$X = X_0 + \int_0^t V(s)ds$$

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

α,β,γ,δは0ではない正の実数
β+γ+δ=1を満たす

ここで，X,V,X_{db},X_{gb},T の次元は上記のとおり．
簡略化のために時間表記が省略する．

$$\dot{X_{db}} = a(X-X_{db})[I_n + \mathrm{diag}[\mathrm{sgn}(F(X_{gb}-F(X))]]$$
$$\dot{X_{gb}} = X_{db}Q_j \quad where\ j = \arg\inf_{0<i\le n}(f(x_{db_i}))$$

ハイブリッドPSOアルゴリズム

1: X,V,X_μ とパラメータα,β,γ,δ とa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: $\dot{Z}$ を計算して，Z を更新する
4: $\dot{V}$ 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"を返す

図5 ハイブリッド**PSO**の解説

離散数式

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

a, C: パラメータ
φ: シグモイド関数

したがって，z_i^k はZのベクトル，
x_i^k はk番目の反復個体iに関するXのベクトル

Xのダイナミクス

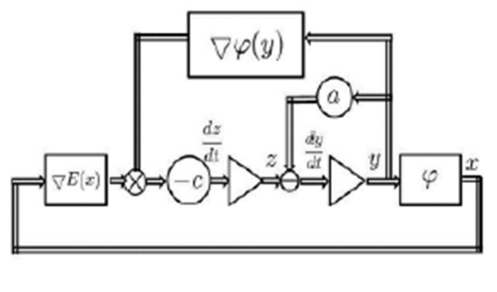

図6 離散数式とハイブリッド理論

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．$\beta(\dot{X}_{db}-\dot{X})+\gamma(\dot{X}_{gb}T-\dot{X})$ 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

今回は一般的な**PSO**の数値実験を，評価関数として**Griewank**を用いて行う（図**7**参照）．ループ回数**0**と**100**の場合で比較すると，**100**の方は中心である**(0,0,0)**に向けて収束に向かってるように見える．しかしループ回数を重ねても収束しない．また別の点に収束してしまう場合もあり，**PSO**はランダム性を含んだプログラムではあるが，安定性に欠ける結果が出た．このことから**PSO**には評価関数によっては最適化には適していないことが分かる．またパラメータの値は任意で与えるものなので最適のパラメータを決定することは実際のアプリケーションでは難しい．

PSOの実行

評価関数：$f_{Griewank} = \frac{1}{4000}\sum_{i=1}^{n}x_i^2 - \prod_{i=1}^{n}\cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right)+1$

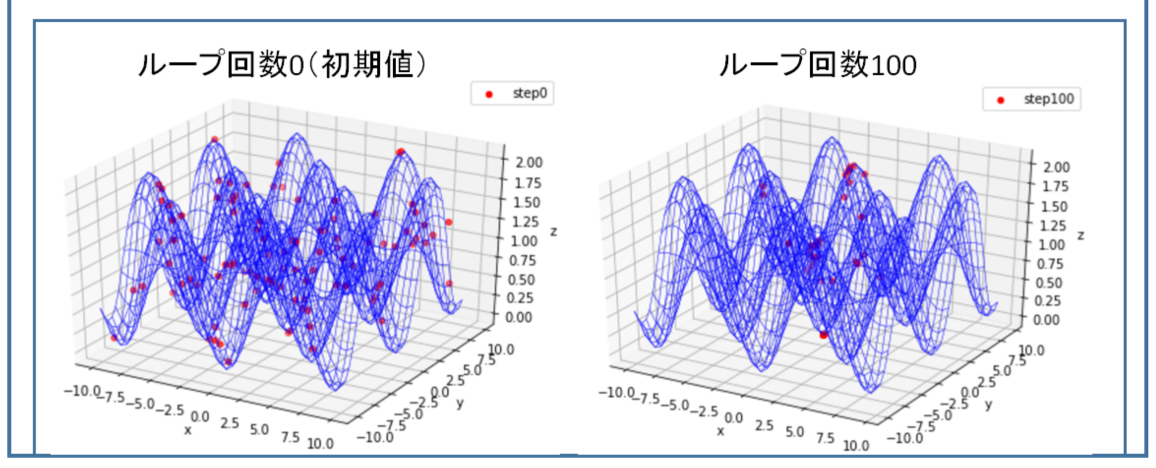

図7 **PSO**の実行結果

5 おわりに

本研究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．また，**PSO**の簡単な数値実験を行った．しかし，提案手法はまだ実装には至ってはいない．よって今後は，まず提案手法を実装する．そして**PSO**やその他の従来法と提案手法との比較を行い，提案手法の有効性を示すことが今後の課題となっている．

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 Kaumann 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] 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).

[5] Ryuzaburo SUGINO, Anan National College of Technology: "Numirical Performance of PSO Algorithm Using by Gradient Method, "

[6] M. Jiang, Y. P. Luo and S. Y. Yang: "Stochastic convergenceanalysis and parameter selection of the standard particle swarm optimization algorithm, "*Information Processing Letters* vol. 102, No. 1, pp.8-16 (2007).