

令和 5 年 5 月 12 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K11970

研究課題名(和文) 数理的求解と進化的多点探索の融合に関する研究

研究課題名(英文) Study on combination of mathematical programming and evolutionary multi-point methods

研究代表者

巽 啓司 (Tatsumi, Keiji)

大阪大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号：30304017

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：局所解を多数もつ連続的大域的最適化問題に対し、(i) 数理的な手法の単点探索用の準ニュートン法を拡張し、従来の単点探索点の過去位置での微分情報のみから目的関数の形状を推定・探索する方法を改良、一定の距離内にある複数探索点で部分情報を共有し形状推定・探索する方法を提案、求解効率向上を確認した。さらに、(ii) 座標変換に関して依存した探索を行う、従来の摂動型カオスのParticle swarm optimization や近年注目されている Grey wolf optimizer の求解能力を維持しつつ、変換への不変性を保つ方法を提案、これらを組合せ、より求解能力の高い進化的手法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果である、(1) 多点探索法での準ニュートン法の拡張・2次導関数情報共有による逆ヘッセ行列更新法の提案と、それによる多点探索での効率的な求解が可能であることを示した点や、(2) 多点探索法を問題表現座標に依存せず、不変で効率的な探索により、汎用性を向上する方法やGWO、PSOを組み合わせることでより効率的な求解方法を示した点は、ビッグデータなど大量のデータのもとでデータ処理が不可欠となり、そこでの最適化が必須となっている「大域的最適化」「機械学習」や「分散最適化」といった分野での汎用性・求解効率向上に大きく貢献できたと考えている。

研究成果の概要(英文)：For continuous global optimization problems with many local solutions, (i) we have extended the existing quasi-Newton method for single-point search, which searches for solutions by estimating the shape of the objective function based on only the differential information at the past position of the search point, and have proposed a method of sharing differential information among multiple search points within a certain distance to estimate the shape, and have verified the advantages of the proposed methods.

(ii) Furthermore, we have proposed a method for maintaining the invariance to transformations while maintaining the solvability of the existing perturbation-based chaotic particle swarm optimization and the grey wolf optimizer, and performing dependent search with respect to coordinate transformations. In addition, we have combined these methods to develop an evolutionary method with higher solvability, which has been evaluated through numerical experiments.

研究分野：ソフトコンピューティング

キーワード：大域的最適化 準ニュートン法 カオス メタヒューリスティック解法 座標変換に対する不変性

### 1. 研究開始当初の背景

近年、ビッグデータなどの大規模で多彩なデータ獲得が容易になり、そのデータ処理上必要不可欠な「大規模な最適化問題」の重要性もさらに高まっている。その求解には、多点探索を行う進化的手法や、単点での探索を主とする数的手法がそれぞれ研究されているが、多点探索手法では、膨大なデータサイズゆえ、時間および空間的計算量を考慮し関数値や 1 階微分情報のみを用いることが多く、数的手法の知見が生かされないことが多い。また、求解においては、最適化問題の解空間や目的関数の数学的表現がごく単純な変換により変化した場合にも、その求解過程がなるべく不変になることが重要であるが、進化的多点探索手法の多くは、不変性を保持しておらず汎用性に欠ける面がある。

### 2. 研究の目的

本研究では、局所解を多数持つ連続的大域的最適化問題を対象とし、

- (1) 準ニュートン法の多点探索拡張：従来の研究で検討されてきた、空間・時間計算量を効率的に扱う単点型準ニュートン法に対して、多点探索での使用を想定し積極的に複数探索点の情報を利用、2 階微分情報（セカント条件）を近似逆ヘッセ行列として探索に利用する方法を開発。
- (2) 進化的な手法の汎用性の改善：従来の多くの進化系手法における、問題の表現座標系に依存した探索範囲・領域や探索方法を、計算量を抑えつつ、座標変換に不変な方法を開発することで、汎用性の向上と求解性能の向上のトレードオフの解消を目指す。

### 3. 研究の方法

以下の 2 つの研究を並行して行った。以下、研究成果においても (1)、(2) それぞれについて報告する。(1) 準ニュートン法の多点探索への改善として、以下の 2 点から検討。(a) 多点探索点間での各近傍での情報共有方法と(b) 探索点間の複数のセカント条件を各々の探索点の近似逆ヘッセ行列に反映する方法について以下のように提案・検証した。

**1 年目**：(a)の枠組みの提案と、(b)として各近傍内の単点近似逆ヘッセ行列間の平均行列を用いる方法を提案。**2 年目**：(b)として、各近傍内の複数のセカント条件の違反度を最小化する近似逆ヘッセ行列更新法(VU法)を提案、平均行列を用いる方法より効率的なことを確認した。**3 年目**：(b)として、複数のセカント条件からランダムな順で 1 つ取り出し、逐次近似逆ヘッセ行列更新する方法(SU法)を追加提案、1 つの逆ヘッセ行列法としては、従来の単点近似逆ヘッセ行列更新法 BFGS、SSR1 法を用いた上で、数値実験によりその効率を比較した。

(2) 進化的な手法 PSO、GWO の汎用性の改善：

**1 年目**：「同心超球面上に沿った座標系」および「選択した方向を基底の 1 つとして回転変換した座標系」を用いた摂動型カオスの提案、そのカオス性と不変性の検証。従来のカオスの PSO(IPS0-SDPC)と組み合わせた求解性能に関して数値実験で検証。**2、3 年目**：1 年目に提案した 2 つの座標変換を用いたカオスのうち、有効であった後者の方法をさらに拡張。選択方向をランダムに選択もしくは最良解に基づいて選択する 2 方法を考案し、IPS0-SDPC と組み合わせた CPS0-R、CPS0-P を比較検討した。同時に、集中化能力の高いメタヒューリスティック解法 Grey Wolf Optimizer (GWO)の座標変換に対する不変性を保証する改良案(IGWO)を提案、IGWO と上記 2 つの座標変換に不変な 2 つの PSO と組ませた方法

も提案、探索方法の異なる 2 つの解法を組み合わせることで求解能力の向上を確認した。

### 4. 研究成果

#### (1) 準ニュートン法の多点探索への拡張

従来の準ニュートン法は、単点探索点を更新する方法であり、探索点の位置  $x(t)$  と勾配ベクトル  $\nabla f(x(t))$  の、時刻  $t, t-1$  での差分ベクトル  $s(t) = x(t) - x(t-1)$ 、 $y(t) = \nabla f(x(t)) - \nabla f(x(t-1))$  を用いて、逆ヘッセ行列  $\nabla^2 f(x(t))$  の逆行列が近似的に満たすセカント条件  $H(t) y(t) = s(t)$  を満たす近似逆ヘッセ行列  $H(t)$  を更新し、準ニュートン方向  $-H(t) \nabla f(x(t))$  へ探索点を更新する手法である。この近似逆ヘッセ行列  $H(t)$  の更新方法(単点近似逆ヘッセ行列更新)として、BFGS 法もしくは SSR1 法がある。

#### 探索点間での情報共有法

距離が十分に近い複数の探索点がある場合、ほぼ同じ場所で探索を行うことは非効率とみなし、互いに基準以下に近づくと、その点での目的関数値に応じて削除する。このとき、探索点  $i$  の位置更新に有効な探索点  $j$  との情報共有を考える。時刻  $t, t-1$  での探索点  $i$  の保持する差分情報  $s^i(t)$ 、 $y^i(t)$  と表し、探索点  $j$  との間での位置や微分値の差ベクトルを

$$s^{ij}(t) = x^i(t) - x^j(t), \quad y^{ij}(t) = \nabla f(x^i(t)) - \nabla f(x^j(t))$$

と表し、 $C^i(t) = \{ s^i(t), y^i(t) \}$ 、 $C^{ij}(t) = \{ s^{ij}(t), y^{ij}(t) \}$  とおく。行列の正定値性を維持するために必要な条件  $s^{ij}(t)^T y^{ij}(t) > 0$  も満たす  $i$  の近傍の探索点集合を  $I_p^i(t)$  とし、 $i$  の情報共

有点と呼ぶ。これらの情報共有点との間で、セカント条件をなるべく満たすように近似逆ヘッセ行列を更新する。

#### 情報共有点間での近似逆ヘッセ行列更新

探索点  $i$  自身の  $C^i(t)$  と情報共有点集合との  $C^{ij}(t)$  でのセカント方程式を反映しながら  $i$  の更新に用いる近似逆ヘッセ行列  $H^i(t)$  を更新する方法を 2 種類提案した。この手法では、1 つのセカント方程式を満たす行列を得る、単点近似逆ヘッセ行列更新法を組み合わせ使用し、複数のセカント方程式の違反度を小さくする。

#### (i) 違反度最小化法：

時刻  $t$  において、 $C^i(t)$  を用いて各探索点  $i$  の近似逆ヘッセ行列  $H^i(t-1)$  を単点近似逆ヘッセ行列更新法により更新し  $H^i(t)$  を得る。また、情報共有点  $j \in I_p^i(t)$  との  $C^{ij}(t)$  を用いて、 $\frac{1}{2}(H^i(t-1) + H^j(t-1))$  を更新し、 $H^{ij}(t)$  を得る。得られた行列の重み  $H_a^i(t) = \sum_{j \in I_p^i(t)} \alpha_j H^{ij}(t) + \alpha_i H^i(t)$  を時刻  $t$  での  $H^i(t)$  とする。重み  $\alpha_i, \alpha_j, j \in I_p^i(t)$  は、各セカント方程式の違反度の和が最小になるように定める。この問題は、決定変数の数が  $|I_p^i(t)| + 1$  個の 2 次計画問題であり、情報共有点数が少ない場合はその計算量は十分小さい。

#### (ii) 逐次逆ヘッセ行列更新法：

複数のセカント方程式を逐次 1 つずつ取り出し、単点近似逆ヘッセ行列更新法を用いて、行列更新を順に行う。

$\hat{H}^i(t) = H^i(t-1)$  とする。 $C^{ij}(t), j \in I_p^i(t)$  を用いて、 $\hat{H}^i(t)$  を逐次更新する。その際、 $j$  を用いる順番はランダムとする。最後に  $C^i(t)$  を用いて  $\hat{H}^i(t)$  を更新し、 $H^i(t) = \hat{H}^i(t)$  とする。

方法(ii)では、 $H^i(t)$  は  $C^i(t)$  に関するセカント方程式を常に満たす。また、SSR1 法を用いた場合、目的関数が凸 2 次関数であり、適当な仮定の下では、行列更新に使用したすべてのセカント方程式を満たす近似逆ヘッセ行列が得られる。

ここで、SSR1 法を用いた(i)、(ii)をそれぞれ、BFGS 違反度最小化法(BV)、SSR1 違反度最小化法(SV)、BFGS 逐次更新法(BS)、SSR1 逐次更新法(SS)と呼ぶ。

#### 多点準ニュートン法の収束性

提案法の理論的な収束性について検証し、どちらの単点近似逆ヘッセ行列更新法を用いても、従来の単点準ニュートン法に対する一般的な収束性とほぼ同様の大域的・局所的収束性が保証できることを理論的に示した。さらに、SSR1 逐次更新法については、 $s^i(t)$  と  $s^{ij}(t)$  の一次独立性の仮定のもとで、単点探索よりも少ない反復での凸 2 次計画問題に対する収束性や、さらに一般的な状況下での収束性を理論的に示した。

近年、複数のセカント条件を満たすように逆ヘッセ行列を更新する研究は行われているが、 $O(n^3)$  のオーダで正定値性が保証されない問題点があり[1,2]、 $O(n^2)$  のオーダと正定値性の保証がされている本手法が優れている。

#### 数値実験結果

4 つの提案法(BV, BS, SV, SS 法)と従来法の BFGS 法もしくは SSR1 法を用いた「情報共有を行わない単点近似逆ヘッセ行列更新法を用いる多点探索型」(B0, S0 法)の比較を行った。数値実験では、手法ごとに、情報共有時での目的関数値の減少の速さ、最終目的関数値を比較し、いくつかのベンチマーク問題で情報共有が有効に活用され、その結果として求解効率が向上していることを確認した。

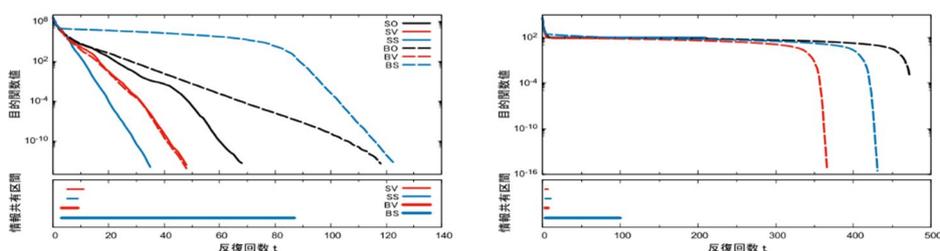


図 1. 凸 2 次関数 (左), Rosebrock 関数 (右) に 6 手法の適用時の目的関数値推移と情報共有区間

## (2). 進化的な手法 PSO, GWO の汎用性の改善

本研究では、勾配法に基づくカオス生成を用いる手法を Particle Swarm Optimization (PSO) に組み合わせた IPSO-SDPC に着目する。この手法は、最良解である pbest, gbest を局所解にもつ仮想的な 4 次関数に最急降下法を適用し、摂動項を付加することで得られる更新式によりパーティクルを更新する手法である。また、カオス的となるパラメータ値の条件が理論的に示されており、その値の設定が容易な上、望ましくない局所解にとらわれることなく最良解周辺を探索できることが示されている。しかし、IPSO-SDPC の探索は問題の座標軸に沿って行われるため、問題の座標表現の変化により、求解性能が大きく変動する可能性がある。

本研究では、上記の依存性の低減化のため、pbest に基づいて座標系を選択し、その座標系において IPSO-SDPC を適用する手法を提案した。さらに、座標系の導入による求解性能の低下を防ぐため、近年提案された手法である Grey Wolf Optimizer (GWO) の集中的な探索を導入し、汎化性と求解性能のバランスをとる手法を提案する。ただし、GWO については、そのシフト変換に対する依存性を低減するため、基準点を用いた改良手法 Improved GWO (IGWO) を提案し使用する。

### 選出ベクトルを用いた座標系選出

定期的に問題の表現座標系  $\Sigma$  とは別の座標系を選択する方法を提案。探索に使用するパーティクルごとにランダムな座標系を用いる手法と、pbest に基づく座標系を用いる手法を提案した。ここでは、後者について詳説する。

この方法では、時刻  $t$  でのパーティクル  $i$  の pbest  $p^i(t)$  をその重心  $p^G(t)$  が原点となるようにシフトしたベクトルの中で、他のベクトルからの射影の和が最大となるベクトルを、選出ベクトル  $d$  とする。

次に、その基底ベクトルの一つ  $\hat{e}^{k(d)}$  として  $d/\|d\|$  を選ぶ。ここで、 $k(d)$  は  $\Sigma$  の基底ベクトルと  $d$  との内積の絶対値が最大となる  $\Sigma$  の基底ベクトルの添字を  $k(d)$  とする。また、 $\Sigma_a$  の残りの基底ベクトル  $\hat{e}^l, l \neq k(d) \in N$  は、問題の座標系の基底ベクトルの 1 つ  $e^{k(d)}$  を  $d/\|d\|$  に一致させるような、最小の回転変換を用いて  $\Sigma$  の基底ベクトルを写すことで定める。この選択された座標系を  $\Sigma_a$  と呼ぶ。

このとき、座標系  $\Sigma, \Sigma_a$  間の座標変換の計算量は  $O(n)$  であり、計算量の増加が抑えられる。PSO の表現座標依存性を解消する従来研究は、いくつかあるが[3]、それに比しても計算量の増加は十分に小さい。

### 選出座標系での IPSO-SDPC: CPSO-P

選択された座標系  $\Sigma_a$  上で、 $\Sigma$  での IPSO-SDPC と同様の更新を行うことで、前述の PSO の回転変換に対する依存度を改善する。この方法では、IPSO-SDPC と同様に、カオス更新式による探索が  $\Sigma_a$  の軸に沿って行われるが、 $\Sigma_a$  は  $\Sigma$  とは別に定期的に選択される座標系であり、 $\Sigma$  への依存は低減化される。また、 $d$  として、pbest 集合中の射影を用いて、pbest が分布する方向を選択的に基底ベクトルとするため、IPSO-SDPC での軸に沿った探索の有効性をある程度保持することを目指している。

また、CPSO-P の探索は、座標表現を除き、従来の IPSO-SDPC と同じ探索を行うため、カオス的となるパラメータ値に関する条件は、IPSO-SDPC と同様に与えられる。

### 基準点を用いた GWO: IGWO

GWO での各探索点 grey wolf の探索範囲を原点ではなく、基準点  $\hat{p}^G(t)$  を用いて決定し、更新を行う手法である Improved GWO (IGWO) を提案した。 $\hat{p}^G(t)$  は、GWO の各 grey wolf が探索で見つけた pbest  $\hat{p}^i(t)$  の重心である。この改良により、オリジナル GWO の原点に依存した探索範囲の調整は行われず、非効率な探索を避けることができる。また、この手法の基準点は pbest の重心であるため、最良解が pbest の重心に近い場合には、その周辺を詳細に探索し、遠い場合は広い範囲を探索することになり、集中化と多様化のバランスがとれた探索となることが期待できる。

### 集中化探索の強化と汎化性を改良したカオス的 PSO: CPSO-PI

IGWO と CPSO-P を組み合わせ求解の汎化性と求解性能のバランスをとる方法 CPSO-PI を提案した。CPSO-P で更新を行うパーティクルに加えて、IGWO で更新を行うパーティクルを導入し、PSO パーティクル、GWO パーティクルごとに、それぞれ最良解  $p^i(t)$  と  $\hat{p}^i(t)$  の更新を行う。また、2 種類のパーティクルが互いの特長のある探索を妨げないように、基本的に 2 種類の最良解の情報は共有しないものとし、上位 3 つの最良解  $g^1(t), g^2(t), g^3(t)$  についてのみ、図 2 に示すように、2 種類のパーティクルの最良解を用いて更新する。

CPSO-P による多様な探索と GWO による集中化探索をバランスよく使用するため、GWO パーティクル数は反復が進むごとに減少させ、PSO パーティクル数は全探索中一定とする。各時刻において PSO パーティクルの位置をランダムに選択した GWO パーティクルにコピーする。

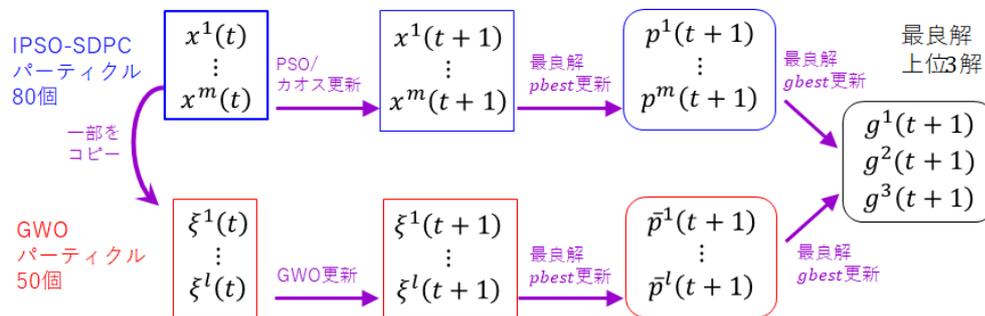


図 2. CPSO-PI での探索パーティクル間の情報共有法

### 数値実験結果

ベンチマーク問題を回轉變換により表現座標系を変換した問題に IPSO-SDPC, CPSO-P, CPSO-PI を適用し, その性能を比較した. 回轉變換は  $I_R$  回の 2 次元平面上の回轉變換の合成により設定した. 多くの問題で, 問題表現の変化に対する CPSO-P や CPSO-PI の求解性能の変動は小さく抑えられ, 求解性能も向上していることを確認した. その一例として, 50 次元, 目的関数値の評価回数を 400000 回, 50 回試行,  $I_R = 0, 80$  での比較結果を表 1 に示す. 赤字は, 3 手法中, 最小関数値が得られたことを表す. また, 一つの問題に対する各  $I_R$  での関数値の推移を図 3 に示す.

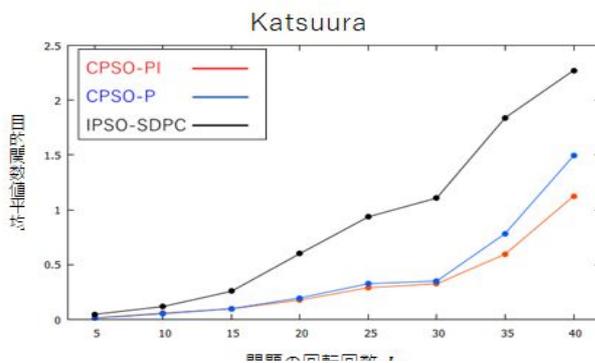


図 3. Katsuura の各  $I_R$  の回轉變換に対する 3 手法の比較

Function	IR=0			IR=80		
	提案法		従来法	提案法		従来法
	CPSO-PI	CPSO-P	IPSO-SDPC	CPSO-PI	CPSO-P	IPSO-SDPC
Bent cigar	9.84E-01	2.53E+02	8.49E-05	1.11E-13	2.74E-07	2.98E-07
Sum of different power	6.20E-01	3.92E+00	4.00E-02	3.69E+32	7.03E+32	2.25E+41
Zakharov	4.15E-17	1.80E-11	7.62E-11	1.23E-19	7.21E+00	2.59E+02
Rosenbrock	3.25E+01	3.55E+01	4.41E+01	4.89E+01	4.90E+01	4.91E+01
Ackley	1.73E+01	1.52E+01	1.96E+01	1.70E-10	5.02E-02	1.84E-01
Griewank	6.80E-02	1.16E-02	1.26E-02	1.05E-01	3.53E-01	4.07E-01
Katsuura	6.15E-03	1.13E-03	6.35E-02	2.80E+00	3.11E+00	3.17E+00
Happycat	7.52E-01	8.48E-01	6.83E-01	8.79E-01	9.51E-01	9.47E-01
HGBat	5.35E-01	6.19E-01	5.99E-01	5.08E-01	5.09E-01	5.88E-01
Schaffer's	1.44E-02	3.74E-02	4.64E-04	8.08E-01	1.32E+00	1.56E+00

表 1. 回轉變換させた問題への CPSO-PI, CPSO-P, IPSO-SDPC の適用結果

### (3) おわりに

上記(1) の報告のとおり, 多点探索での効率的な求解が可能で, 2 次導関数情報共有による逆ヘッセ行列更新法および多点探索法型準ニュートン法が開発できたことや, (2) の報告のとおり, 問題表現座標に依存せず, 不変で効率的な汎化性の高い多点探索法探索の開発や, それを用いてさらに汎化性・効率を向上させた, PSO, GWO の組み合わせ解法の開発により, ビッグデータなど大量のデータのもとでデータ処理が不可欠となり, そこでの最適化が必須となっている「大域的最適化」「機械学習」や「分散最適化」といった分野での, 汎用性・求解効率向上に大きく貢献できたと考えている.

### 参考文献

- [1] S. Gratton, V. Malmedy, P. Toint, "Quasi-Newton updates with weighted secant equations," *Optimization Methods and Software*, Vol. 30 (4), pp. 748-755 (2015)
- [2] N. Boutet, R. Haelterman, J. Degroote, "Secant update version of quasi-Newton PSB with weighted multiseant equations," *Computational Optimization and Applications*, Vol. 75 (2), pp. 441-466 (2020)
- [3] W. Kumagai, K. Yasuda, "Particle swarm optimization with rotational invariance using correlativity," 2018 IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics, pp. 1201-1208 (2018)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 巽 啓司, 木下 直
2. 発表標題 探索範囲を調整するシフト不変なGrey Wolf Optimizer
3. 学会等名 第66回 システム制御情報学会 研究発表講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Keiji Tatsumi, Nao Kinoshita
2. 発表標題 Shift-invariant grey wolf optimizer exploiting reference points and random selection of step-sizes
3. 学会等名 61st Annual Conference of the Society of Instrument and Control Engineers (SICE) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 木中 翔琉, 巽 啓司
2. 発表標題 多点探索法での探索点間の情報を共有する準ニュートン更新 (発表確定)
3. 学会等名 第67回 システム制御情報学会 研究発表講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 木下 直, 巽 啓司
2. 発表標題 求解能力と汎化性を改良したGWOとカオスのPSOのハイブリッド手法
3. 学会等名 第49回知能システムシンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 N. Kinoshita, K. Tatsumi
2. 発表標題 Chaotic particle swarm optimization using a rotation transformation based on two best solutions
3. 学会等名 2020 IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics (SMC) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 木下直, 巽啓司
2. 発表標題 最適化問題の座標表現に対して不変な求解を行うカオス的 particle swarm optimization
3. 学会等名 第 64 回システム制御情報学会 研究発表講演会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関