

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 8 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K00337

研究課題名(和文) 大域的探索強化と局所解近傍の形状情報を用いる摂動型カオス進化計算最適化手法

研究課題名(英文) Perturbation-based Chaotic Evolutionary Optimization Method Using Enhancement of Global Search and Landscape around Local Solutions

研究代表者

巽 啓司 (Tatsumi, Keiji)

大阪大学・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) 2,500,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、局所解を多数持つ制約無連続的大域的最適化問題に対する進化計算手法の開発として、(1)一般的な探索方法に適用可能なより柔軟性の高い摂動型カオス(2)近似ヘッセ行列を用いた摂動型カオス・微分不可能なケースや多点探索への拡張(3)ベイズ最適化手法を用いた摂動型カオス(4)標準基底に沿わない摂動型カオス、といった様々な状況に適したカオス力学系の提案とそのカオス的性質の理論的解析、力学系を利用したアルゴリズム開発を行った。さらに、ベンチマーク問題に対する求解性能評価を行い、求解能力だけでなく、汎化性や変数変換等に対する不変性などの有用性を確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ビッグデータ等の大規模なデータ処理では、局所解が多数存在する最適化問題に対し、良質な解を現実的な時間内で求める必要に迫られることが多い。また、関数値が悪スケールであったり、歪な局所解をもつ場合もしばしばあり求解がより困難となる。そのような問題に対する汎用性の高いメタヒューリスティック解法として、本研究で開発した、摂動型カオス力学系を用いた方法は、カオスの持つ「初期鋭敏性」を生かした多様な探索に加え、局所解近傍の形状を利用しつつ、変数変換やスケール変化に対して探索を適応的に調整可能な汎用性の高い進化的手法であり、様々な分野でのデータ処理能力向上に貢献できると考えられる。

研究成果の概要(英文)：In this study, we developed evolutionary techniques for unconstrained continuous global optimization problems with many local solutions. First, we proposed perturbation-based chaotic systems (PCS) suitable for various situations such as (1) more flexible PCS which can be used in general search methods, (2) PCS using approximate Hessian, and its extension to non-differentiable cases and multi-point search, (3) PCS using Bayesian optimization, and (4) PCS which does not depend on the standard basis, and, in addition, we analyzed the properties of the proposed PCSs. Secondly, we developed metaheuristic methods using PCSs, and evaluated the performance of them for the benchmark problems, which show its usefulness not only in solving performance but also in generalization ability and invariance to variable transformations.

研究分野：大域的最適化問題に対するメタヒューリスティック解法の研究

キーワード：大域的最適化 カオス 準ニュートン法 メタヒューリスティック解法 PS0

様式 C-19、F-19-1、Z-19（共通）

1. 研究開始当初の背景

近年、ビックデータをはじめとして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」の求解がより重要になってきている。それらの問題は、局所解が多数存在し厳密な最適解を求めることが困難な大域的最適化問題となることが多く、さらに、関数値が悪スケールであったり、歪な局所解をもつ場合はさらに求解が難しくなる。そのような場合にも効率的に求解を行うため、局所解近傍の形状を取得し、その情報をもとに変数変換やスケーリングを適応的に調整する方法が提案されている [2,5]。他方、異らは、摂動型カオス力学系を提案し、カオスの持つ「初期点に対する鋭敏性」などの性質を生かして、大域的小および局所的な解の探索を同時に行えることを示している [6,7,9]。本研究では、これらの局所解近傍の情報を用いた摂動型カオス力学系を提案し、さらに、その系が多くの局所解を探索可能な軌道を生成するような改良を行い、更なる高効率な進化計算法を提案する。また、より自由度の高い探索方法にも適用可能なカオス生成法の一般化も同時に行う。

2. 研究の目的

本研究では、局所解を多数持つ制約無連続的大域的最適化問題： (P) $\min f(x)$ に対する進化計算手法の開発を行った。ここで関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ は多峰性関数とし、その局所解集合を $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ で表す。

まず、局所探索能力の強化として、目的関数の局所解近傍の情報をもとに適応的な座標・スケーリング変換を行い求解上の頑健性・不変性をもつ手法を提案する。加えて、目的関数の多峰性に対する大域的探索能力強化のため、力学系が多くの局所解付近を探索する軌道をもつような設計方法を検討、また、多数探索点の協調的な探索など勾配型の探索以外の方法に対して適用可能な、より柔軟な摂動型カオスの拡張・改良を行った。最後に提案力学系の理論的なカオス性十分条件の導出による求解時のパラメータ選択の容易化や、系を用いた進化計算手法の開発を行う。

3. 研究の方法

本研究は、問題 (P) の求解法として、異らがすでに研究を行っている摂動型カオスの更新式 [6]：

$$(S0) \quad x(t+1) := x(t) - \alpha \nabla f(x(t)) - \beta \omega c_\omega(x(t)), \quad c_\omega(x) = (\cos(\omega x_1), \dots, \cos(\omega x_n))^T$$

を用いた解法を、さらに発展させる形で研究を行った。研究目的で述べた摂動型カオスの生成法・性質について、a) 局所解近傍の形状情報を活かした摂動型カオス力学系の開発 b) 大域的な探索を強化した摂動型カオス力学系の設計 c) 柔軟性の高い一般的な摂動型カオス生成の開発、の3つの観点から各々の進化計算法を提案、アルゴリズムとしての実装、各方法の性能評価を行う。使用する摂動型カオス力学系も一部関係しつつそれぞれ異なるため、必要な力学系の理論的解析と対応する進化計算アルゴリズムの開発を、適宜、並行して行った。

4. 研究成果

(1) 一般的な探索方法に適用可能なより柔軟性の高い摂動型カオス

(S0) では、目的関数の最急降下方向に標準基底に沿った摂動を用いていたが、求解上の自由度を考えると、それをより緩め、必ずしも降下方向とは限らない更新方向 d を用いた力学系に、直交変換行列 T や、摂動項の振幅として $\{b_1, \dots, b_n\}$ を用いて

$$(S1) \quad x(t+1) = x(t) - \alpha d(x) - \omega T \begin{bmatrix} b_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & b_n \end{bmatrix} c_\omega(T^\top x(t)).$$

と拡張することで汎用性が増した方法を考える。ただし、関数 $d: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ が連続微分可能で、 $\nabla d(x)$ が対称、また、任意の局所解 $x^* \in \Omega$ に対し、その近傍 $N_{\sqrt{nr}}^2(x^*) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^*\|_2 \leq \sqrt{nr}\}$ 内で正定値であるような正の定数 $r > 2\pi/\omega$ が存在するとし、 $x^* \in \Omega$ に対し $d(x^*) = 0$ であるという仮定をおいた。そ

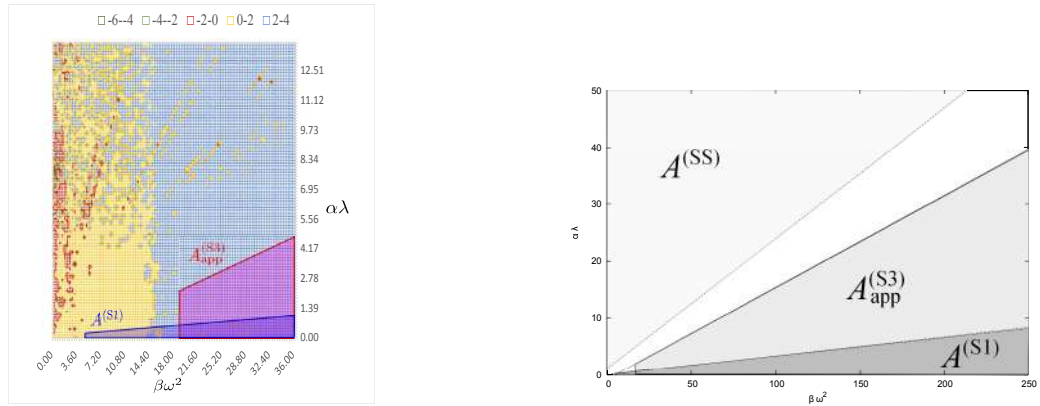
のもとで, (S1) の Li-York の意味 [4] でのカオス十分条件が, 従来示されたもの [8] より弱い条件:

$$\alpha\lambda_T^d \leq \frac{1.59}{\pi^2}\beta\omega^2 - \frac{8}{\pi^2}, \quad \beta\omega^2 \geq 6.6\pi,$$

となることを理論的に示した. ただし, λ_T^d は以下に定義される定数である.

$$\lambda_T^d := \sup_{x^* \in \Omega} \max \{ \|T^\top \nabla_x d(x) T\|_\infty \mid x \in N_r^\infty(x^*; T) \},$$

このことは, (S0) と同様に, (S1) も, 局所解 x^* 付近にスナップバックリペラ不動点 (吸引しながらも反発する不安定不動点) が存在し, それを利用して x^* 付近をカオス軌道で探索可能である.



(a) 条件を満たすパラメータ値範囲とリアプノフ指数の比較 (b) 条件を満たすパラメータ値範囲の比較

図 1: 各カオスの十分/必要条件の比較

さらに, 例題に対する, 今回導出した十分条件の近似と従来の十分条件を満たす α, β, ω の条件, ($A^{(SS)}$) および ($A^{(S1)}$), とリアプノフ指数 (負であればカオス) の比較 (図 1 左) や, (S1) がカオス的とならないパラメータの条件 (カオス的となる必要条件の補集合 $A^{(SS)}$) との比較 (図 1 右) を行い, 十分に条件が緩和できていることを確認した (雑誌論文 3).

(2) 近似ヘッセ行列を用いた摂動型カオス

カオス更新式 (S0) を改良した準ニュートン法に基づく更新式:

$$(S2) \quad x(t+1) := x(t) - \alpha H(t+1) \nabla f(x(t)) - \beta \omega c_\omega(x(t))$$

を提案. 従来の数値計画法での準ニュートン法では, 現在 t と過去 $t-1$ の微分値 $\nabla f(x(t)), \nabla f(x(t-1))$ を用いて近似した, ヘッセ行列の逆行列 H による準ニュートン方向を計算することで, 局所解付近の目的関数の形状を推測している. その際, H の正定値性が必要であり, 条件 $y(t)^\top s(t) > 0, Hy(t) = s(t), y(t) := \nabla f(x(t)) - \nabla f(x(t-1)), s(t) := x(t) - x(t-1)$, を満たすように, 正確な直線探索のもとで H は更新され, 1 つの局所解に収束してアルゴリズムが終了することを前提としている.

提案法 (S2) は, 摂動項をもち, そのカオス性により局所解には収束しない軌道を生成する. そのような状況下でも, H の正定値性を保持する修正法を, H の代表的更新法である, BFGS 法や SR1 法のそれぞれについて提案した. また, 適当な仮定のもとでの, (S2) がカオス的となる条件を理論的に導出, その条件が目的関数 f に完全に無関係の

$$\alpha < \frac{1.59}{\pi^2}\beta\omega^2 - \frac{8}{\pi^2}, \quad \beta\omega^2 \geq 6.6\pi,$$

という条件であり, また, その探索がスケール変換に対して不変性であることを確認し, 求解上の利点を示した.

さらに, ステップ幅の適応的な選択方法を用いたカオスのアニーリング法を提案し, 分岐図によるストレンジアトラクタのサイズの解析を行い, 適応的ステップ幅を用いた場合, より局所解付近の近似精度が高いことを示した (図 2).

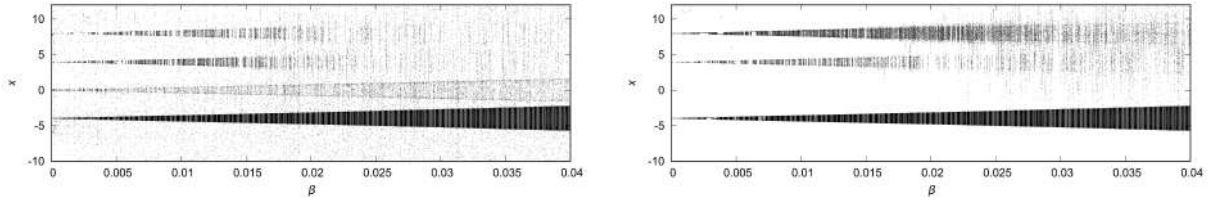


図 2: 3つの局所解を持つ問題に対する、定数ステップ幅 $\alpha = 1$ (左) と適応的ステップ幅を用いた場合 (右) の (S2) の分岐図

加えて、数値実験において、従来法と比較し、BFGS・SR1法を用いた (S2) と、(S0) を用いるカオスアニーリング法を比較し、前者の求解能力が高く、BFGS法、SR1法が有効となる問題がそれぞれ異なることや、SR1法が計算時間が短縮可能であり、総合的にはSR1法を採用することが有効であることを確認した (雑誌論文2, 学会発表1,2,4)。

一方、CMA-ESのrank- μ update, rank-one updateの2種類を用いて共分散行列の更新を行う方法に、摂動型カオス力学系を組み合わせる方法を提案し、上記の方法との比較を行った。局所解の1点周りの近似に用いる探索点数が大幅に多くなるため、計算量の面で不利となることが分かった。

(3) (S2) の微分不可能なケースと多点探索への拡張

中心差分を導入することで、一部微分不可能な領域を持つ目的関数に適用可能な摂動型カオス生成法 (S3) を提案、ただし、微分不可能な点の存在を考慮に入れたカオス理論 [1] を援用することで、適当な仮定のもとでの更新式の理論的なカオス的条件を示し、分岐図等での解析も行った。

次に、PSOと組み合わせた多点探索法を実装し、実際の数値実験での検証を行った。微分可能な問題に対しては、(S2), (S3) を用いた方法ともにカオス性も含め、求解効率に大きな差がないことを確認した。微分不可能な関数に対しては、(S3) を用いた方法が、カオス的・大域的な探索や、SR1型準ニュートン方向への更新が求解上有効に働いていることを確認した。

(4) ベイズ最適化手法を用いた摂動型カオス

Particle Swarm Optimization (PSO) や Firefly algorithm (FA) など多数の探索点をもつメタヒューリスティック解法を拡張した「得られた解を局所解にもつガウス関数を用いた摂動型カオス近似解法」を提案した。各探索点 i に対し、 i の位置 $x^i(t)$ の近傍で、 i の見つけた最良解より目的関数値が小さい (他の探索点が見つけた) 最良解に対し、

$$S^i(t) := \{k \in I^P \mid f(p^k(t)) \leq f(p^i(t)) \cap \|x^i(t) - p^k(t)\| \leq c\}.$$

という添字集合を作成し、その最良解をそれぞれ局所解にもつ関数

$$f^i(x; t) = - \sum_{k \in S^i(t)} \frac{1}{2\gamma} \exp(-\gamma \|x - p^k(t)\|^2),$$

により、 i の位置の近傍の関数を近似、関数 f^i に対する摂動項付き最急降下法を導入することで

$$(S4) \quad x_j^i(t+1) = x_j^i(t) - \alpha \sum_{k \in S^i(t)} \frac{x_j^i(t) - p_j^k(t)}{\exp(\gamma \|x^i(t) - p^k(t)\|^2)} - \eta\omega |S^i(t)| \cos(\omega x_j^i(t)).$$

新たなカオス的な更新式を導出した。この方法により、従来、各探索点の探索が (PSO では) 自身の最良解に基づいて行われていた部分 [3] を、多様にすることが可能になった。

また、(S4) のカオス性十分条件が、パラメータ値に関する条件として

$$\alpha \leq \frac{1}{3\pi^2} \eta\omega^2, \quad 2\pi \leq \eta\omega^2$$

となることや、生成される点列の範囲を概算することで、探索時のパラメータ設定条件をより容易にできることも示した。さらに、従来は探索初期にカオス的に多様な探索を行い、終盤に降下法を行うことで多様性と

集中化のバランスを調整していたものを、常にカオス的な探索を行いつつストレンジアトラクタのサイズを調整し探索のバランスをとる方法を提案し、パラメータ調整を簡単化した。さらに、この方法をベンチマーク問題に適用し、その性能が従来法 [9] に比して求解性能が高いことを確認した (雑誌論文 1, 学会発表 5)

(5) 標準基底に沿わない摂動型カオス

提案法の汎化性能を高めるため、求解対象の問題 (P) を表現するための座標系が変化しても、力学系が不変となるカオス生成法についての研究をすすめた。区分的滑らかな関数を更新式にもつカオスの最新の研究結果を反映させ [1], 適切に基準点 x_0 を定め、現在の点 $x(t)$ との差ベクトル $u(t) = x(t) - x_0$ と, x_0 の同心超球に接する超平面上に新たな正規基底 $\bar{e}^1, \dots, \bar{e}^n$, ただし, $k(u) = \arg \max_{i \in N} \{|u_i|\}$, をとり, それに沿った摂動

$$\beta \sin(\omega_d \|u\|) \frac{u}{\|u\|} + \sum_{i \neq k(u) \in N} \beta \sin(\omega_v \theta_i(u) \|u\|) \bar{e}^i(u),$$

ここで $\|u\|_i = \sqrt{u_{k(u)}^2 + u_i^2}$.

を付加する力学系を提案した (図 3).

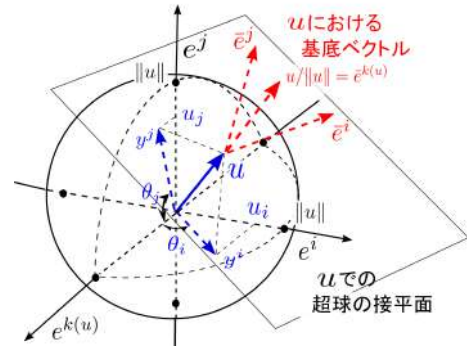


図 3: 同心超球を用いた新しい座標系 $\bar{e}_1, \dots, \bar{e}_n$

この更新式において、近似的に従来の標準基底依存の摂動型カオスとほぼ同様なカオス条件・暫定解間の探索条件が保証されることを示した。さらに、表現座標に依存する従来法 [9] に比べ、探索領域が広がる可能性を考慮し、探索を主として行う方法以外への探索領域縮小する手法をとりいれ、実際の数値実験により、その従来法との比較において、問題表現に回転変換が加わった場合に、その探索が不変であることや、従来法に比して求解効率がほぼ同じもしくは優れていることを確認した (学会発表 3, 6)。

< 引用文献 >

- ① Gardini, L., Sushko, I., Avrutin, V. and Schanz, M. “Critical homoclinic orbits lead to snap-back repellers,” *Chaos, Solitons and Fractals*, **44**, 2011, 433–449.
- ② Hansen, N., et al., “Evolution strategies,” *Handbook of Computational Intelligence*, 2016.
- ③ Kennedy, J. and Eberhart, R. C., “Particle swarm optimization,” *Proc. of the IEEE International Joint Conf. on Neural Networks, IEEE Press*, 1995, 1942–1948.
- ④ Li, C. and Chen, G., “An improved version of the Marotto Theorem,” *Chaos Soliton. Fract.*, **18**, 2003, 69–77.
- ⑤ Takimoto, N., et al., “Global optimization with Gaussian regression under the finite number of evaluation,” *Proc. SIMULTECH-2015*, 2015.
- ⑥ Tatsumi, K., Obita, Y. and Tanino T., “Chaos generator exploiting a gradient model with sinusoidal perturbations for global optimization,” *Chaos Soliton. Fract.*, **42**, 2009, 1705–1723.
- ⑦ Tatsumi, K., Ibuki, T. and Tanino, T., “A chaotic particle swarm optimization exploiting a virtual quartic objective function based on the personal and global best solutions,” *Applied Mathematics and Computation*, **219**, 2013, 8991–9011.
- ⑧ Tatsumi, K. and Tanino, T., “A sufficient condition for chaos in the gradient model with perturbation method for global optimization,” *International Journal of Bifurcation and Chaos*, **23** (6), 2013, 1350102.
- ⑨ Tatsumi, K., Ibuki, T. and Tanino, T., “Particle swarm optimization with stochastic selection of perturbation-based chaotic updating system,” *Applied Mathematics and Computation*, **269**, 2015, 904–929.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Tomoki Kuwabara, Hrumoto Mineoka, Keiji Tatsumi	4. 巻 11
2. 論文標題 A Perturbation-Based Chaotic Particle Swarm Optimization Searching around Multiple Personal Best Solutions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 SICE Journal of Control, Measurement, and System Integration	6. 最初と最後の頁 349 ~ 356
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.9746/jcmsi.11.349	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Keiji Tatsumi, Tetsuzo Tanino	4. 巻 27
2. 論文標題 A Perturbation Based Chaotic System Exploiting the Quasi-Newton Method for Global Optimization	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 International Journal of Bifurcation and Chaos in Applied Sciences and Engineering	6. 最初と最後の頁 1750047-1,23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S021812741750047X	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Keiji Tatsumi	4. 巻 27
2. 論文標題 A Weaker Sufficient Condition for the Chaoticity of Extended Perturbation-Based Updating System for Global Optimization	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 International Journal of Bifurcation and Chaos in Applied Sciences and Engineering	6. 最初と最後の頁 1750085-1,24
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S0218127417500857	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔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 Keiji Tatsumi
2. 発表標題 Modified Perturbation-based Chaotic System Using the Quasi-Newton Method with the Symmetric Rank-one Formula for Global Optimization
3. 学会等名 2018 IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kei Kouno, Kousuke Ise, Keiji Tatsumi
2. 発表標題 A Modification of Perturbation-based Chaotic System Using Quasi-Newton method for Global Optimization
3. 学会等名 the SICE Annual Conference 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 東 諒, 河野 圭, 巽 啓司
2. 発表標題 同心超球上の摂動を用いたカオス的Particle Swarm Optimization
3. 学会等名 計測自動制御学会 第46回知能システムシンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 巽啓司
2. 発表標題 SR1公式に基づく準ニュートン法を用いる摂動型カオスの 大域的最適化への適用
3. 学会等名 計測自動制御学会 システム・情報部門 第45回 知能システムシンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 峰岡 晴彦, 巽 啓司
2. 発表標題 パーティクルごとに探索に用いる最良解が異なるChaotic Particle Swarm Optimization
3. 学会等名 計測自動制御学会 システム・情報部門 学術講演会 2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 巽啓司
2. 発表標題 同心超球上の摂動を用いた大域的最適化のためのカオス生成法
3. 学会等名 計測自動制御学会システム・情報部門学術講演会 2019
4. 発表年 2019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
--	---------------------------	-----------------------	----