

平成 30 年 6 月 21 日現在

機関番号：13601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K16063

研究課題名（和文）任意変数型Black-Box最適化に対する効率的アルゴリズムの自動設計

研究課題名（英文）Automatic Design of Efficient Algorithms for Black-Box Optimization in Arbitrary Search Domains

研究代表者

秋本 洋平（AKIMOTO, Youhei）

信州大学・学術研究院工学系・助教

研究者番号：20709654

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、工学・エネルギー・環境問題などの解決に必要なブラックボックス最適化に対して、最適化プロセスを抜本的に効率化する最適化法の方法論を開発・検討した。最適化プロセスにおいてボトルネックとなる事前パラメータの調節を不要なものとするべく、事前パラメータの探索への影響を実験的および理論的に解析し、一部のパラメータの最適な値を導くことに成功した。また、その他の事前パラメータについても適応機構の開発を行い、事前パラメータ調節を取り除くことに成功した。加えて、統計的技法やヒューリスティック技法を取り入れ、方法論そのものの探索効率を改善した。本研究の成果は、最適化技術の普及につながると期待される。

研究成果の概要（英文）：In this research, we developed and examined a methodology of optimization methods that drastically improves optimization process for black box optimization, which is indispensable for solving engineering, energy and environmental problems. Considering that the bottleneck of optimization process is often hyper-parameter tuning based on trial-and-error, we tried to remove the need of the hyper-parameter tuning, so that the users can use the search algorithm out-of-the-box. We experimentally and theoretically analyzed the influence on hyper-parameter of search algorithms, and succeeded to derive the optimum values of some parameters. We also developed an adaptation mechanism for other preliminary parameters and succeeded in removing the hyper-parameter adjustment. In addition, we adopted statistical techniques and heuristic techniques to improve the search efficiency of methodology itself. The results of this research are expected to lead to the diffusion of optimization technology.

研究分野：ブラックボックス最適化

キーワード：進化計算
ータ同定 ハイパーパラメータ 高次元最適化 情報幾何 制約付き最適化 収束率解析 最適パラメ

1. 研究開始当初の背景

工学のみならず、エネルギー・環境に関わる様々な課題へのアプローチとして、大規模シミュレーションを利用した Black-Box 最適化の需要が高まっている。進化計算を始めとする Black-Box 最適化法の多くは、最適化対象となるパラメータの型(バイナリ型や実数型)に特化した設計となっている。複数のパラメータ型を含むような最適化問題を効率的に最適化するためには、問題毎に試行錯誤的にアルゴリズムを設計し、ハイパーパラメータを調整する必要があった。しかし、これは非常に骨の折れる作業であり、情報技術の普及発展の妨げとなる。

2. 研究の目的

本研究では、任意変数型 Black-Box 最適化に対し、効率的な探索アルゴリズムを自動生成する枠組みの構築を目的とし、研究を実施した。これにより、Black-Box 最適化法の利用者は、問題毎の試行錯誤的なアルゴリズム設計やハイパーパラメータ調整から開放され、システムの最適化プロセス全体の抜本的な効率化が期待できる。

3. 研究の方法

効率的なアルゴリズムとして知られる CMA-ES や PBIL と呼ばれる進化計算を情報幾何の観点から統一した最適化法の枠組みとして、IGO (Information Geometric Optimization) が近年提案された。利用者は、最適化対象となるパラメータ空間に定義される確率モデルを選択することで、アルゴリズムの自動生成を可能とする。一方、そのハイパーパラメータの調整が必要であること、確率モデルの選択によっては効率的でないこと、などが課題であった。本研究では、以下の二点に着目し、研究を実施した。

(1) 事前パラメータの影響解析と適応メカニズムの設計: IGO における重要なハイパーパラメータに、各イテレーションに生成する候補の数(サンプル数)と各イテレーションにおいて確率分布の更新量を定める学習率の二つが挙げられる。前者は大きいほど並列化性能および大域的探索性能の観点から望ましいが、おおよそ線形にシミュレーション回数が増加する。また、後者は1に近いほど学習速度が高まるが、サンプル数が小さい場合にはその限りではない。両者の役割を理論上明確にし、これを踏まえて理想的な状況を実現するように適応するメカニズムの開発を目指し、研究した。

(2) 探索効率化メカニズムの開発と多様な困難さへの対処: IGO は前述のように効率のよい最適化アルゴリズムである CMA-ES や PBIL

を一般化したものであるが、CMA-ES や PBIL には独自のヒューリスティックな工夫が施されている。これらは、CMA-ES や PBIL の成功やパラメータの変化に対するロバスト性に欠かせない要因であるが、IGO への一般化の際に取り除かれている。これは、情報幾何的な観点から解釈することが困難であったためである。本研究では、既存のヒューリスティック技法を IGO へ導入すること、また、情報幾何的な観点であるがゆえに導入が可能な統計的効率化技法の両者を取り入れることで、探索の効率化と事前パラメータの影響緩和を試みた。加えて、ノイズ、制約、高次元性などの困難さを持つ最適化への応用方法を検討した。

4. 研究成果

(1) 事前パラメータの影響解析と適応メカニズムの設計

サンプル数の適応機構: サンプル数は探索の効率と最終的に得られる解の質に最も影響を与えるパラメータであり、最も事前調節が必要とされるハイパーパラメータである。我々は、確率分布パラメータの更新量の信号対ノイズ比を推定し、これを一定に保つようにサンプル数を適応する機構を開発した。これにより、一度の探索に関わるシミュレーション回数の微増が確認されるものの、試行錯誤的な事前パラメータ調節が不要になることで、最適化プロセス全体の効率化を実現した。

学習率の実験的影響解析: 学習率とサンプル数には強い依存関係があることが、経験的によく知られている。進化計算においては、その進化的な着眼点からか、サンプル数を多くとることが、大域的探索性能の向上につながると考えられ、実際にそのような傾向が実験的によく知られている。しかし、そのメカニズムについては明かされていない。本項目では、学習率とサンプル数の依存関係に着目し、多峰性関数における性能評価実験を行った。その結果、従来の知見とは異なり、サンプル数は非常に小さい値としても、学習率を小さくすることで大域的探索性能が改善することを明らかにした。この成果は、サンプル数が直接的に大域的探索性能に起因しているのではないことを示している。

無限次元解析とこれに基づく最適パラメータの導出: 本項目では、連続パラメータ最適化において、次元数を無限に大きくした場合のアルゴリズムの振る舞いを解析した。無限次元とすることで、パラメータとアルゴリズム1ステップでの改善率の関係を明示的な式に書き下すことができる。これを用いて、最適な分散パラメータや最適な重みパラメータを導出することに成功した。

ヒューリスティック技法の導入による効率化とロバスト化。IGO に取り入れられていないヒューリスティックな工夫の一つに Cumulation と呼ばれる方法がある。本項目では, cumulation によるパラメータ移動ベクトルの累積を用いたパラメータ更新抑制機構を開発した。これにより, 学習率が不用意に大きい場合などにも安定した最適化が可能になった。

(2) 探索効率化メカニズムの開発と多様な困難さへの対処

サンプル数再利用メカニズムの提案。IGO においては, サンプル数はパラメータ更新に利用する自然勾配推定のためのモンテカルロサンプルと解釈される。我々は, モンテカルロ推定において, 異なる分布からのサンプルを活用する重点サンプリングの技術を応用することで, 必要なサンプル数の削減に成功した。

高次元 Black-Box 連続最適化のための確率モデル選択と, 計算量の改善。IGO は任意の変数型に対して定義されるが, 確率モデルの選択によっては, アルゴリズムの計算量がボトルネックとなる。とりわけ, 連続変数の最適化が関わる場合, 変数の数が多くなるにつれ, 計算コストの増加が顕著になる。本項目では, 多変量正規分布モデルのなかで, 共分散行列を限られたパラメータで表現できるモデルをとりあげ, 計算量的に効率的なパラメータ更新方法を開発した。

制約付き最適化への応用。IGO の枠組みでは, 確率モデルが実行可能領域内で定義されている必要があるが, 現実的な最適化問題において, 予め実行可能領域内でのみ定義された確率モデルの準備は困難である。本項目では, 実行不能領域でのシミュレーションが不可能な問題へ対処できるよう, 制約付き最適化問題を無制約最適化へ変換する方法論を提案した。

重複探索の検知と効率的なリスタート戦略の開発。多点探索アルゴリズムは大域的探索能力に優れると言われているものの, 大域的最適解への保証がなされてはならず, 満足のいく最適解が得られるまで最適化を繰り返すリスタート戦略は必要不可欠である。リスタートの課題として, 探索済み領域を繰り返し探索する重複探索がある。本項目では, 重複探索を, 履歴と現在の分布間の KL ダイバージェンスに基づいて検知する枠組みを提案し, これを用いたリスタート戦略を提案した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

(雑誌論文)(計20件)

阪本 直気, 秋本 洋平, ブラックボックス最適化のための不変性を考慮した線形制約対処法の提案, 進化計算学会論文誌, vol. 9, 2018, pp. 21--30, 査読有, DOI:10.11394/tjpnsec.9.21

Youhei Akimoto, Anne Auger, Nikolaus Hansen, Quality Gain Analysis of the Weighted Recombination Evolution Strategy on General Convex Quadratic Functions, Theoretical Computer Science, 2018, 査読有, To appear

Kento Uchida, Shinichi Shirakawa, Youhei Akimoto, Analysis of Information Geometric Optimization with Isotropic Gaussian Distribution Under Finite Samples, Genetic and Evolutionary Computation Conference, 2018, 査読有, To appear, DOI:10.1145/3205455.3205487

Naoki Sakamoto, Youhei Akimoto, Ranking Based Linear Constraint Handling Method with Adaptive Penalty, Genetic and Evolutionary Computation Conference, 2018, 査読有, To appear, DOI:10.1145/3205455.3205462

Kouhei Nishida, Youhei Akimoto, PSA-CMA-ES: CMA-ES with Population Size Adaptation, Genetic and Evolutionary Computation Conference, 2018, 査読有, To appear, DOI:10.1145/3205455.3205467

Kouhei Nishida, Youhei Akimoto, Benchmarking the PSA-CMA-ES on the BBOB Noiseless Testbed, Proceedings of GECCO '18 Companion, 2018, 査読有, To appear, DOI:10.1145/3205651.3208297

Takahiro Yamaguchi, Youhei Akimoto, A Note on the CMA-ES for Functions with Periodic Variables, Proceedings of GECCO '18 Companion, 2018, 査読有, To appear, DOI:10.1145/3205651.3205669

Youhei Akimoto, Anne Auger, Nikolaus Hansen, Quality Gain Analysis of the Weighted Recombination Evolution Strategy on General Convex Quadratic Functions, Foundations of Genetic Algorithms, 2017, pp. 111--126, 査読有, DOI:10.1145/3040718.3040720

Hidekazu Miyazawa, Youhei Akimoto, Effect of the Mean Vector Learning Rate in CMA-ES, Genetic and Evolutionary Computation Conference, 2017, pp. 721--728, 査読有, DOI:10.1145/3071178.3071203

Naoki Sakamoto, Youhei Akimoto, Modified Box Constraint Handling for the Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy, Proceedings of GECCO '17 Companion, 2017, pp. 183--184, 査読有 , DOI:10.1145/3067695.3075986

Keigo Tanaka, Youhei Akimoto, Introducing the Cumulation to the Population Based Incremental Learning and the Compact GA to Relax Genetic Drift, Proceedings of GECCO '17 Companion, 2017, pp. 199--200, 査読有 , DOI:10.1145/3067695.3075987

Takahiro Yamaguchi, Youhei Akimoto, Benchmarking the Novel CMA-ES Restart Strategy Using the Search History on the BBOB Noiseless Testbed, Proceedings of GECCO '17 Companion, 2017, pp. 1780--1787, 査読有 , DOI:10.1145/3067695.3084203

西田 昂平, 秋本 洋平, CMA-ES のための集団サイズ適応機構の提案と評価, 進化計算学会論文誌, vol. 8, 2017, pp. 61--74, 査読有 , DOI:10.11394/tjpnsec.8.61

阪本 直気, 秋本 洋平, CMA-ES における矩形制約対処法の改良と線形制約への拡張, 進化計算学会論文誌, vol. 8, 2017, pp. 23--35, 査読有 , DOI:10.11394/tjpnsec.8.23

Youhei Akimoto, Nikolaus Hansen, Projection-Based Restricted Covariance Matrix Adaptation for High Dimension, Genetic and Evolutionary Computation Conference, 2016, pp. 197--204, 査読有 , DOI:10.1145/2908812.2908863

Kouhei Nishida, Youhei Akimoto, Evaluating the Population Size Adaptation Mechanism for CMA-ES on the BBOB Noiseless Testbed, Workshop Proceedings of Genetic and Evolutionary Computation Conference, 2016, pp. 1185--1192, 査読有 , DOI:10.1145/2908961.2931700

Kouhei Nishida, Youhei Akimoto, Evaluating the Population Size Adaptation Mechanism for CMA-ES on the BBOB Noisy Testbed, Workshop Proceedings of Genetic and Evolutionary Computation Conference, 2016, pp. 1193--1200, 査読有 , DOI:10.1145/2908961.2931701

Kouhei Nishida, Youhei Akimoto, Population Size Adaptation for the CMA-ES Based On the Estimation Accuracy of the Natural Gradient,

Genetic and Evolutionary Computation Conference, 2016, 2016, pp. 237--244, 査読有 , DOI:10.1145/2908812.2908864

Youhei Akimoto, Nikolaus Hansen, Online Model Selection for Restricted Covariance Matrix Adaptation, Parallel Problem Solving from Nature, 2016, pp. 3--13, 査読有 , DOI:10.1007/978-3-319-45823-6_1

Shinichi Shirakawa, Youhei Akimoto, Kazuki Ouchi, Kouzou Ohara, Sample Reuse in the Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy Based on Importance Sampling, Proceedings of Genetic and Evolutionary Computation Conference, 2015, pp. 305--312, 査読有 , DOI:10.1145/2739480.2754704

[学会発表](計16件)

田中 圭伍, 秋本 洋平, PBIL における重みパラメータの影響解析, 進化計算シンポジウム, 2017

阪本 直気, 秋本 洋平, 不変性を最大限に考慮した線形制約対処法の提案, 進化計算シンポジウム, 2017

山口 貴大, 秋本 洋平, 探索履歴を用いた確率的打ち切り機構の性能評価, 進化計算シンポジウム, 2017

内田 絢斗, 秋本 洋平, 等方性ガウス分布を用いた Information Geometric Optimization の有限サンプル解析, 進化計算シンポジウム, 2017

清水 卓麻, 秋本 洋平, CMA-ES における Importance Mixing を用いた解の再利用法, 平成 29 年度電子情報通信学会信越支部大会, 2017

田中 圭伍, 秋本 洋平, Cumulation を導入した PBIL における Genetic Drift 抑制効果, 平成 29 年度電子情報通信学会信越支部大会, 2017

西田 昂平, 秋本 洋平, 集団サイズ適応を用いた CMA-ES におけるステップサイズ補正, 平成 29 年度電子情報通信学会信越支部大会, 2017

阪本 直気, 秋本 洋平, 線形制約対処法の不変性に関する一検討, 平成 29 年度電子情報通信学会信越支部大会, 2017

阪本 直気, 秋本 洋平, 矩形制約対処法の線形制約への一般化, 平成 29 年度電子情報通信学会信越支部大会, 2017

阪本 直気, 秋本 洋平, ブラックボックス連続最適化におけるランキングベース制約対処法の検討, 計測自動制御学会システム・情報部門 学術講演会, 2017

山口 貴大, 秋本 洋平, 探索履歴を用いた CMA-ES リスタート戦略の性能評価, 平成 29 年度電子情報通信学会信越支部

大会, 2017

山口 貴大, 秋本 洋平, 離散値最適化へのSep-CMA-ESの適用, 計測自動制御学会 システム・情報部門 学術講演会, 2017, pp. 491-496

宮澤 秀和, 秋本 洋平, CSA を導入したCMA-ES における最適パラメータ設定と探索性能の調査, 進化計算シンポジウム, 2016

Youhei Akimoto, Comparison-based Stochastic Algorithm with Adaptive Gaussian Model for Large-Scale Continuous Optimization, The fifth International Conference on Continuous Optimization, 2016

宮澤 秀和, 秋本 洋平, CMA-ES における確率モデルと学習率に見られる傾向の観測, 進化計算シンポジウム, 2015

西田 昂平, 秋本 洋平, Information Geometric Optimization における集団数の適応的更新法, 計測自動制御学会 システム・情報部門 学術講演会, 2015

6. 研究組織

(1) 研究代表者

秋本 洋平 (AKIMOTO, Youhei)

信州大学・学術研究院工学系・助教

研究者番号: 20709654