

探索空間の探索難易度を考慮した IMODE

西尾 樹人[†] 穴田 一[†]東京都市大学 大学院総合理工学研究科[†]

概要：単一目的連続最適化問題を解くアルゴリズムとして3つの探索手法から構成される IMODE が注目されている。しかし評価値の変動の激しい領域と変化の緩やかな領域が混在する問題において、探索が困難な評価値の変動が激しい領域を十分に探索することなく緩やかな領域の局所解に陥ってしまうケースがあり、変動が激しい箇所はより重点的に探索するように改良すべきであると考えられる。そこで本研究では、各個体の評価値の変動を記録し、変動の激しい個体へ向かう探索を新たに追加することで探索が困難な変動の激しい領域内の優良解を逃さない探索の実現を目指す。

1 はじめに

近年システムの高速度化、複雑化に伴い、大規模システムの最適化の需要が急速に高まっている。大規模システムの最適化はほとんどが高次元の問題で定式化されるが、実用可能な時間内に正確な解を求めるのが困難とされている。そんななか高次元の最適化問題の解を効率的に求める手法として、比較的単純でありながら優れた精度を持つ差分進化 (Differential Evolution : DE) が注目されている [1]。

近年では DE の個体数、変異に用いられるスケーリングファクタ、交叉に用いられる交叉率の3つの制御パラメータを探索過程で状況に応じて更新するアルゴリズムである適応的差分進化 LSHADE (Success-History Based Adaptive DE with Linear Population Size Reduction) [2] が提案された。

LSHADE では個体ごとに異なるスケーリングファクタと交叉率を設定して、各個体の解が更新された際にスケーリングファクタと交叉率の2つの制御パラメータを記録し、その記録に基づいてパラメータを変化させるとともに3つ目のパラメータである個体数を一定の割合で減少させている。また DE の突然変異は重要な役割を果たしており、変異ベクトルを生成する数式に関しても多くの研究が行われ、様々

な変異戦略が提案されている [3]。最も評価値の良い個体の周辺を探索する戦略や評価値の良い上位数パーセントからランダムに選んだ個体を目指す戦略、ランダムな探索を行う戦略、他の個体を内分した座標へ向かう戦略などがある。Improved Multi-Operator Differential Evolution (IMODE) では変異ベクトルの生成に用いる変異戦略を3つ用意し、それぞれの変異戦略に従った個体群の評価値の改善度を基に各変異戦略に割り当てる個体数を更新する [4]。3つの変異戦略には親個体から比較的良い個体へ向かう戦略が2種類とランダムな探索を行う戦略で構成され、扱う問題や探索状況に応じた探索を行っている。しかし、評価値の変化の激しい領域と変化が緩やかで平均的に評価値の良い領域が混在する問題において、解空間上にランダムに生成された個体は、評価値の変動が激しい領域を詳しく探索することがないまま、評価値が平均的に良く範囲も広い緩やかな領域へ集まってしまう、変動の激しい領域内の最良解を発見することなく局所解に陥ってしまうという問題がある。

そこで本研究では、IMODE のランダムな探索をの代わりに評価値の変動が激しい個体へ向かう探索を導入する。具体的には DE において親個体と子個体の評価値の比較を行う選択時に、その2個体間の単位距離あたりの評価値の差を全ての個体で計算して各個体周辺の評価値の変動の激しさを測り、変動の比較的激しい個体へ向かう突然変異を導入した。

IMODE Considering the Search Difficulty of the Search Space

[†] Mikito Nishio, Hajime Anada

Tokyo City University Graduate School of Integrative Science and Engineering

性能比較のために提案手法と IMODE について CEC2022 の 12 問のベンチマーク関数を用いた比較実験を行った[5]. その結果, 12 問中 11 問で IMODE 以上の結果が得られた.

2 既存研究

IMODE では交叉率 CR とスケーリングファクタ F を個体ごとに与え, 親個体と子個体を比較し, 評価値の良い方の個体の持つパラメータを基に次世代の個体に与えるパラメータを更新し, 個体数は全反復を通して一定の割合で減少させる. 3つの異なる変異戦略の割合に関しては各戦略の評価値の改善度を基に戦略を割り当てる割合を変化させる. IMODE の詳細な手順は次のとおりである.

Step 1 : 初期化

まず探索領域内で NP 個の個体 $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_{NP}\}$ を次式(1)によって一様ランダムに生成する.

$$x_{i,j} = x_j^{\min} + (x_j^{\max} - x_j^{\min}) \times \text{rand}(1, NP) \quad (1)$$

$$i \in NP \text{ and } j = 1, 2, \dots, D$$

ここで $x_{i,j}$ は i 番目の個体の j 次元目の要素を, x_j^{\max} , x_j^{\min} はそれぞれ探索領域の j 次元での下限と上限を, D は問題の次元数を rand は $[0,1]$ の一様乱数を生成する関数を示している.

Step 2 : 突然変異

各個体 \mathbf{x}_i を基に変異ベクトル \mathbf{v}_i を, 個体ごとに割り当てられた変異戦略を用いて生成する. 各個体に割り当てる 3 つの変異戦略は DE/current-to- φ best with archive/1, DE/current-to- φ best without archive/1, DE weighted-rand-to- φ best で, それぞれの変異式を次式(2)~(4)に示す.

$$\text{DE/current-to-}\varphi \text{ best with archive/1}$$

$$v_{i,j} = x_{i,j} + F_i \times (x_{\varphi,j} - x_{i,j} + x_{r1,j} - x_{r2,j}) \quad (2)$$

$$\text{DE/current-to-}\varphi \text{ best without archive/1}$$

$$v_{i,j} = x_{i,j} + F_i \times (x_{\varphi,j} - x_{i,j} + x_{r1,j} - x_{r3,j}) \quad (3)$$

$$\text{DE weighted-rand-to-}\varphi \text{ best}$$

$$v_{i,j} = F_i \times x_{r1,j} + F_i \times (x_{\varphi,j} - x_{r3,j}) \quad (4)$$

ここで F_i は個体 i のスケーリングファクタを示しており $(0,1]$ の値を取る. \mathbf{x}_{φ} は全個体のうち評価値の良い上位 25%からランダムに選ばれた個体を, \mathbf{x}_{r1} , \mathbf{x}_{r3} は個体 \mathbf{x}_i と \mathbf{x}_{φ} 以外の個体から, \mathbf{x}_{r2} はその個体群に加え Step4 の選択時に選ばれなかった劣った個体を集めたアーカイブ \mathbf{A} からランダムに選択された個体を示している.

Step 3 : 交叉

各変異ベクトル \mathbf{v}_i と親個体 \mathbf{x}_i を基に, 次式(5)を用いて, 30%の確率で二項交叉を, 70%の確率で指数交叉を行うことで子個体 \mathbf{u}_i を生成する.

$$u_{i,j} = \begin{cases} v_{i,j}, & \text{if } \text{rand}(0,1) \leq Cr_i \text{ or } j = j_{rand}, \\ x_{i,j}, & \text{otherwise,} \\ & \text{if } \text{rand} \leq 0.3 \\ v_{i,j}, & \text{for } j = \langle l \rangle_D, \langle l+1 \rangle_D, \dots, \langle l+L-1 \rangle_D \\ x_{i,j}, & \text{for all other } j \in [i, D], \\ & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5)$$

ここで Cr_i は個体 i の交叉率を, $\mathbf{x}_{i,j}$, $\mathbf{v}_{i,j}$, $\mathbf{u}_{i,j}$ は i 番目の個体, その変異ベクトル, 子個体のそれぞれの j 次元目の要素を, j_{rand} はランダムに選択された次元を示している. $\langle l \rangle_D$ は l を D で割った余りを, l は $[1, NP]$ で生成された整数の乱数を示している. L は交叉する次元数を示しており, 0 で初期化し, 以下のステップを繰り返すことで個体ごとに更新する.

L の生成ステップ

1. $L = 0$
2. $L = L + 1$
3. $\text{rand} \leq Cr_i$ かつ $L < D$ の場合 2 に戻る

Step 4 : 選択

子個体 \mathbf{u}_i とその親個体 \mathbf{x}_i を目的関数値で比較し、良い方を次の反復で用いる個体として選択する。この時選択されなかった個体をアーカイブ個体群 \mathbf{A} に追加し、追加したらアーカイブ個体群の個体数が設定した上限 $|\mathbf{A}|$ を上回る場合、アーカイブ個体群のランダムに選択した個体と交換する。

Step 5 : 各戦略の個体数の更新

各戦略を評価するため、それぞれの戦略の個体の評価値の改善度を、次式(6)を用いて更新する。

$$diff_{op} = \frac{1}{NP_{op}} \sum_{i=1}^{NP_{op}} (f(\mathbf{x}_{op,i}^{old}) - f(\mathbf{x}_{op,i})), \quad \forall op = 1, 2, 3 \quad (6)$$

ここで $(f(\mathbf{x}_{op,i}^{old}) - f(\mathbf{x}_{op,i}))$ は op 番目の変異戦略を割り当てられた個体で、i 番目の個体の前ステップと現在の目的関数値の差を示している。次に各変異戦略に割り当てる個体数を、各戦略の改善度を基に、次式(7)を用いて更新する。

$$NP_{op} = \max \left(0.1, \min \left(0.9, \frac{diff_{op}}{\sum_{op=1}^3 diff_{op}} \right) \right) \times NP, \quad \forall op = 1, 2, 3 \quad (7)$$

ここで、どの戦略でも解が良くない場合、つまり $diff_{op}$ がすべて0以下の場合 NP_{op} は全て全個体数の1/3とする。

Step 6 : パラメータの適応

次世代の個体ごとのスケーリングファクタ F_i 、交叉率 Cr_i を、次式(8)(9)を用いて生成する。

$$F_i = randc_i(\mathbf{M}_{F,r_i}, 0.1) \quad (8)$$

$$Cr_i = \begin{cases} 0, & \text{if } \mathbf{M}_{CR,r_i} = \perp. \\ randn_i(\mathbf{M}_{CR,r_i}, 0.1), & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (9)$$

ここ $randc$ はコーシー分布から、 $randn$ は正規分布からランダムに生成した値を、 \perp は終端値を示してい

る。終端値は Step 4 の選択時に交叉率が0の場合のみ解が更新された場合に記録され、交叉率を生成する際に終端値が読み込まれると0を中心とした確率分布による生成ではなく、すべて0を出力する。

F, CR を生成するための確率分布の中心ベクトルとなっている $\mathbf{M}_{F,k}, \mathbf{M}_{CR,k}$ は要素数Hの集合であり、 r_i は $[1, H]$ の区間で生成された一様乱数である。 $\mathbf{M}_{F,k}, \mathbf{M}_{CR,k}$ は次式(10)を用いて計算される。

$$\mathbf{M}_{z,k}^{t+1} = \begin{cases} \text{mean}_{WL}(S_z), & \text{if } S_z \neq \text{null}, \forall z \in \{F, CR\}, \\ \mathbf{M}_{z,k}^t, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (10)$$

$$\text{mean}_{WL}(S_z) = \frac{\sum_{\gamma=1}^{|S_z|} w_\gamma S_z^\gamma}{\sum_{\gamma=1}^{|S_z|} w_\gamma} \quad \forall z \in \{F, CR\}$$

$$w_\gamma = \frac{|f(\mathbf{u}_\gamma^t) - f(\mathbf{x}_\gamma^t)|}{\sum_{\gamma=1}^{|S_z|} |f(\mathbf{u}_\gamma^t) - f(\mathbf{x}_\gamma^t)|}$$

ここで S_F, S_{CR} は選択時に成功した個体iの F_i と CR_i である。kは成功履歴を保持するメモリーのインデックスで、各反復で1カウントしHを上回るとk=1にリセットされる。また \mathbf{M}_{CR} は S_{CR} の要素がすべて0のとき終端値 \perp が割り当てられ、その場合DEの交叉時に交差する次元数は1つとなる。

Step 7 : 個体数の線形減少

個体数を設定した最大値から最小値に全反復を通して、次式(11)を用いて一定の割合で減少させる。個体数を減らす際は目的関数値の最も悪い最悪個体を削除する。その後 Step2 に戻る。

$$NP_{G+1} = \text{round} \left[\left(\frac{NP^{min} - NP^{init}}{MAX_{FES}} \right) \times FES + NP^{init} \right] \quad (11)$$

ここで NP^{min}, NP^{init} はそれぞれ個体数の最小値と最大値を、 FES, MAX_{FES} はそれぞれ現在の目的関数による評価回数とその最大値を示している。

Step 8 : ローカル探索

関数評価回数 FES がその最大 MAX_{FES} の85%に達した際に確率 $prob_{ls}$ で逐次二次計画法(SQP)を用い

てローカル探索を行う。手順は以下のとおりである。

1. $FES \geq 0.85 \times MAX_{FES}$ かつ $rand \leq prob_{ls}$ を満たす場合、SQP に入力として最良解を与える
2. SQP を CFE_{ls} 回実行する。
3. 得られた値が改善した場合は、現在の最悪個体を得られた解に置き換え、 $prob_{ls}$ を 0.1 に設定し、そうでない場合は $prob_{ls}$ を 0.0001 に設定する
4. 関数評価回数を実行した $prob_{ls}$ 分カウントする

以上を、関数評価回数 FES がその最大 MAX_{FES} に達するまで繰り返す。

3 提案手法

本研究では 3 つの変異戦略のうちランダムな探索を変動の激しい個体へ向かう戦略に置き換える。個体 i の変動の激しさ $tilt_i$ は次式(12)を用いて各個体計算する。

$$tilt_i = \frac{|f(x_i) - f(u_i)|}{|x_i - u_i|} \quad (12)$$

また変異式は次式(13)である。

$$v_{i,j} = x_{i,j} + F_i \times (x_{t\phi,j} - x_{i,j} + x_{r1,j} - x_{r2,j}) \quad (13)$$

ここで $x_{t\phi,j}$ は全ての個体の中で激しさの大きい上位 25%からランダムに選択された個体を示している。また、DE の選択時に採択されなかった劣った個体はアーカイブ個体群へ追加されるが、変動の激しい領域へ向かう探索は他の 2 つの戦略とは異なる領域を探索するため、変動の激しい個体への探索で作成された子個体をアーカイブ個体群に保存するとアーカイブ個体群を利用する戦略 DE/current-to- ϕ best with archive/1 に悪影響を及ぼしてしまうことが考えられるため、変動の激しい領域へ向かう探索において作成された子個体はアーカイブに保存しない。

また、既存手法では戦略の各個体へ割り当てる割合 NP_{op} は既存手法では 1/3 ずつに、スケーリングファクタ F と交叉率 CR は 0.5 に初期化されていた。しかし本研究では、探索序盤において変動の緩やかな領域への個体の集中を防ぎ、変動の激しい領域をより入念に探索するために各戦略の割り当てる割合の初期値を 1/4, 1/4, 1/2 に、スケーリングファクタ F と交叉率 CR の初期値を 0.1 に変更する。

4 実験

提案手法と既存手法の性能に関して CEC2022 のベンチマーク問題を用いて試行回数 31 回で比較実験を行った。ベンチマーク問題の各特性については以下の表 1 に示す[5]。

表 1.CEC2022 ベンチマーク問題

	No.	Functions	F _i
Unimodal Function	1	Shifted and full Rotated Zakharov Function	300
Basic Functions	2	Shifted and full Rotated Rosenbrock's Function	400
	3	Shifted and full Rotated Expanded Schaffer's f6 Function	600
	4	Shifted and full Rotated Non-Continuous Rastrigin's Function	800
	5	Shifted and full Rotated Levy Function	900
	Hybrid Functions	6	Hybrid Function 1 (N = 3)
7		Hybrid Function 2 (N = 6)	2000
8		Hybrid Function 3 (N = 5)	2200
Composit Functions	9	Composition Function 1 (N = 5)	2300
	10	Composition Function 2 (N = 4)	2400
	11	Composition Function 2 (N = 4)	2600
	12	Composition Function 4 (N = 6)	2700
Search range: [-100,100]D			

表2.提案手法の結果

	Min	Median	Max	Mean	Std
F1	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00
F2	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00
F3	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00
F4	4.980.E+00	9.956.E+00	1.890.E+01	1.138.E+01	3.361.E+00
F5	0.000.E+00	0.000.E+00	1.427.E+01	2.137.E+00	4.189.E+00
F6	5.185.E-02	1.803.E-01	4.301.E-01	1.978.E-01	9.867.E-02
F7	0.000.E+00	0.000.E+00	2.833.E-08	9.140.E-10	5.089.E-09
F8	1.687.E-01	3.613.E-01	1.439.E+00	4.454.E-01	2.690.E-01
F9	0.000.E+00	2.293.E+02	2.293.E+02	2.219.E+02	4.118.E+01
F10	0.000.E+00	0.000.E+00	3.536.E-01	6.220.E-02	1.077.E-01
F11	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00	0.000.E+00
F12	1.588.E+02	1.614.E+02	1.635.E+02	1.615.E+02	1.239.E+00

表3.順位和検定の結果

F1	=
F2	=
F3	=
F4	-
F5	=
F6	=
F7	=
F8	=
F9	+
F10	+
F11	=
F12	+

図1.F10における評価値・個体群の分散・最良解更新戦略の推移

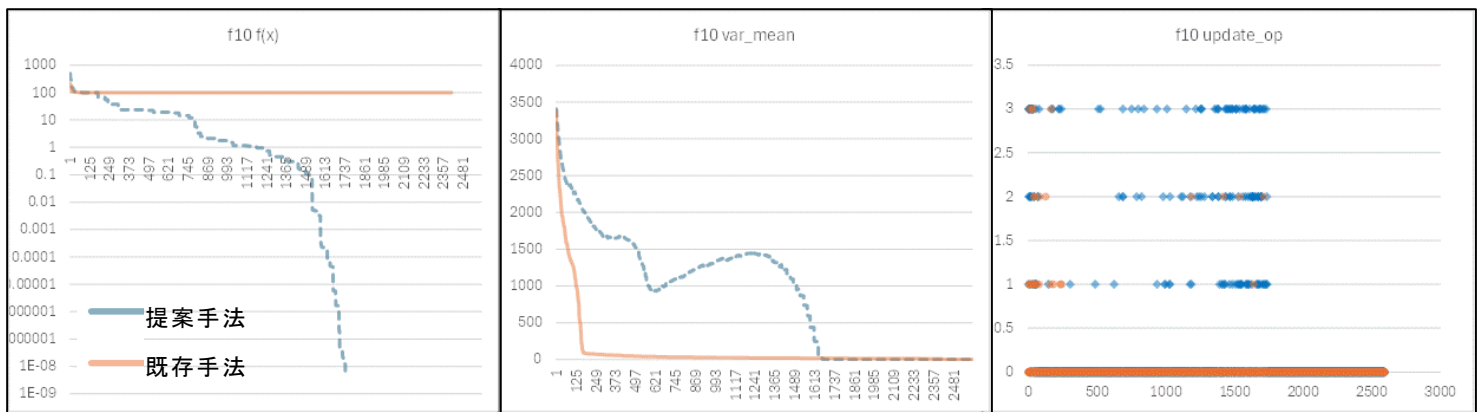


図2.F4における評価値・個体群の分散・最良解更新戦略の推移

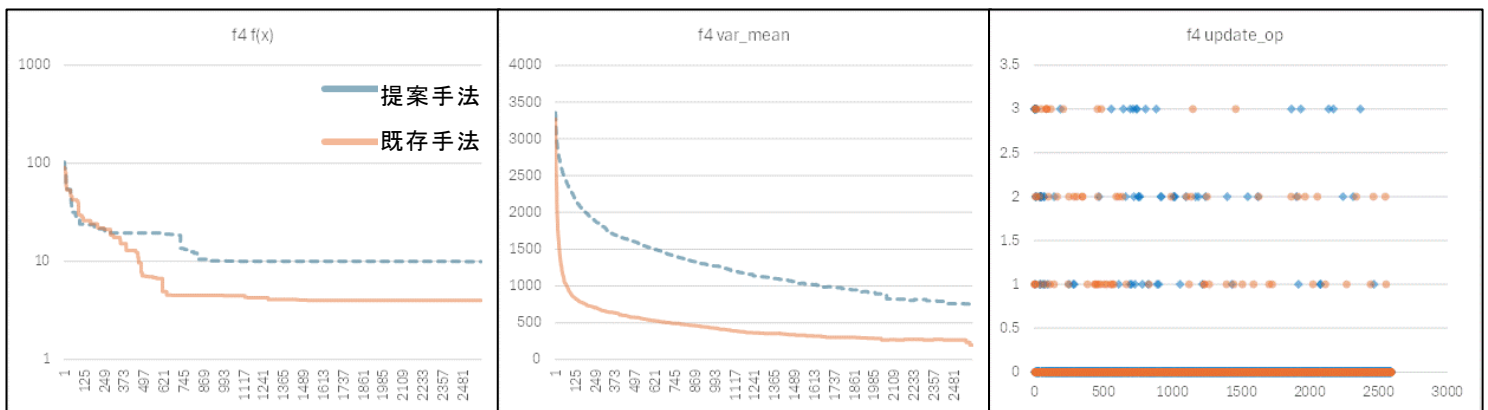


図3.D=2の場合のF4・F10

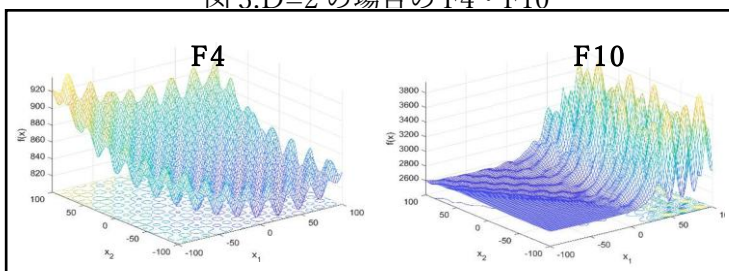


表2がCEC2022のベンチマーク問題12問の結果の最小値, 中央値, 最大値, 平均, 標準偏差である. IMODEより改善した部分を青の縦縞で, 等し

い部分を緑の横縞で, 悪化した部分を赤の水玉で示した. 表から12問中11問で既存手法以上の結果が得られたことがわかる.

表3は31回試行の結果に対し有意水準5%のMann-Whitney U検定を用いた順位和検定の結果であり, 有意差ありで改善した部分を「+」で, 有意差が見られなかった部分を「=」で, 有意差ありで悪化した部分を「-」で示した. 結果から関数F4では有意差ありで改悪したが, 12問中3問で既存手

法に比べて有意差ありで改善したことがわかる。

ここで結果が改善したF10と改悪したF4について探索過程での評価値と個体群の分散の推移、個体群の中での最良解を更新した戦略に関して調べる。

図1はF10での結果を、図2はF4での結果を示した提案手法を橙の実線で既存手法を青の破線で示した。また各問題の概形に関して次元数を $D=2$ に落とし可視化したものを図3に示す。結果より既存手法よりも改善したF10において提案手法は局所解に陥ることなく、追加した探索空間の評価値の変動を考慮した戦略も用いながら探索を行っていることがわかる。また既存手法よりも改悪したF4において提案手法は個体群の分散の減少が遅く、既存手法との評価値の差が中盤から開いていることがわかる。

5 考察

本研究ではDEの複数の変異戦略を組み合わせる探索を行うIMODEの改良として、探索が困難な変動の激しい領域内の優良解を逃さない探索の実現を目指し、親個体と子個体の単位距離あたりの評価値の差によって変動の激しさを定義し、IMODEのランダムな探索代わりに変動の激しい個体へ向かう探索を導入した。ほとんどの問題で既存手法以上の結果が得られ、探索空間の評価値の変動を考慮した戦略が有効であることが示された。また、改善した問題と改悪した問題に関して、探索過程での評価値・個体群の分散・最良解を更新した戦略の推移を確認した。その結果F10では序盤から局所解に陥ることなく評価値が減少し、追加した難易度を考慮した探索によって最良解が更新されていることが分かった。これらの結果から探索の序盤に評価値の良い領域だけでなく、変動の激しい領域も探索することで局所解への個体の集中を防いでいることが考えられる。F4では提案手法の個体群の分散の減少速度が遅く、なおかつ探索がうまくいっていないことが分かった。これは個体の密集を遅くした結果、個体群の中での最良解の周辺を細かく探索できなかったことが要因として考えられる。

今後の展望として、本研究では評価値の変動が激しく探索難易度の高い領域内の最良解を逃さないために、スケールリングファクタ・交叉率の初期値を小さくし、難易度考慮の探索個体の初期割合も大きく設定したが、結果として変動の激しい領域と緩やかな領域を持つ問題においてはうまく働く一方、そうでない問題においては序盤の探索速度の遅さが原因で性能が落ちてしまった。そのため、評価値の変動を考慮した探索が成功していない場合にスケールリングを大きくするなどし、評価値の良い個体の周辺を重点的に探索させることでF4のような多峰性の問題においても性能を向上させることができると推察される。

参考文献

- [1]. Storn R., Price K. "Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces" J. Global Optim, (1997), pp.341-359
- [2]. R. Tanabe and A. Fukunaga, "Improving the search performance of shade using linear population size reduction", IEEE Congress on Evolutionary Computation, (2014), pp. 1658-1665
- [3]. Sallam K.M., Elsayed S.M., Chakraborty R.K., Ryan M.J. "Improved multi-operator differential evolution algorithm for solving unconstrained problems", IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC), IEEE (2020), pp.1-8
- [4]. Gomez J. "Self adaptation of operator rates in evolutionary algorithms" Genetic and Evolutionary Computation Conference, Springer (2004), pp.1162-1173
- [5]. Abhishek Kumar, Kenneth V. Price, Ali Wagdy Mohamed, Anas A. Hadi, P. N. Suganthan. "Problem Definitions and Evaluation Criteria for the CEC 2022 Special Session and Competition on Single Objective Bound Constrained Numerical Optimization" IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC) IEEE (2022).