

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 15 日現在

機関番号：13601

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2013～2014

課題番号：25880012

研究課題名(和文) 情報幾何に基づく新しい進化型探索フレームワーク構築に関する研究

研究課題名(英文) Evolutionary search framework based on the information geometry

## 研究代表者

秋本 洋平 (AKIMOTO, Yohei)

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) 2,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、情報幾何に基づく進化型探索アルゴリズムの枠組みである Information-Geometric Optimization (IGO) の拡張と最適化プロセスの効率化を目指し、高次元最適化問題のための IGO アルゴリズム設計、制約付き最適化問題のための IGO アルゴリズム設計、ノイズ付き最適化問題におけるリサンプリング戦略の性能解析とリサンプリング回数の設計などの研究成果を得た。

研究成果の概要(英文)：In this work, we have studied the Information-Geometric Optimization (IGO) that is a recently proposed framework of probability model based search algorithm for arbitrary optimization problems based on the information geometry. We have designed a novel variant of the covariance matrix adaptation evolution strategy for high dimensional continuous optimization, a new algorithm for constraint continuous optimization, both of which are based on the IGO principle. We have also studied the runtime of a general comparison based algorithm with fitness averaging strategy on noisy discrete optimization problems and derived the required number of fitness resampling.

研究分野：ソフトコンピューティング

キーワード：確率的探索法 進化計算 情報幾何 確率近似 高次元最適化 制約付き最適化 ノイズ付き最適化  
勾配推定

## 1. 研究開始当初の背景

現実世界において現れる最適化問題の多くは、目的関数や制約関数の評価に計算コストの高いシミュレーションを要する。これらの関数については、勾配等の微分情報を解析的に得る事ができないため、問題の微分可能性を仮定しない直接探索法が有効である。従来、の直接探索法である遺伝的アルゴリズム (GA) や焼き鈍し法 (SA) は、汎用的なため比較的容易に利用可能であるが、多くの解評価回数、すなわち数多くのシミュレーションを必要とするため探索効率が悪い。問題に特化した探索アルゴリズムは、特定の問題においては探索効率が高い一方、問題の定式化を変更したり、問題に内在するパラメータを変更した場合に、探索アルゴリズムの事前パラメータを再チューニングすることが必要となるほか、アルゴリズムの再設計が必要となる場合も数多く見られる。計算コストの高い最適化問題では、試行錯誤が必要となるパラメータチューニングやアルゴリズムの再設計は、実用上ボトルネックとなる。現実世界に現れる最適化においては、アルゴリズム設計やパラメータ調整まで含めた最適化プロセス全体の効率化が求められている。

Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMA-ES) [Hansen 2014] は、探索空間が連続な場合、すなわちパラメータが実数値をとる場合、目的関数が非凸、悪スケール、変数非分離、多峰な、一般に最適化困難とされる問題に対して効率的であり、事前パラメータのチューニングが必要ない探索アルゴリズムである。近年の理論研究の結果、CMA-ES は期待利得関数の自然勾配に従って探索を行っていることが判明し [Akimoto 2010]、この知見をもとに CMA-ES を一般化した Information-Geometric Optimization (IGO) [Ollivier 2011] が提案された。IGO は、

概念上、探索空間の連続性・非連続性によらず、任意の最適化問題に適用可能な汎用的な探索アルゴリズムの枠組みであり、離散最適化にも効率的である。しかし、現実の最適化において頻出の、高次元空間における最適化や、制約条件のある最適化、目的関数がノイズを含む最適化においてはその探索性能は明らかにされていない。また、内在する確率モデルの選択方法や事前パラメータの一般的な設計指針は与えられていない。このため、高次元最適化や制約付き最適化、確率的最適化においては、事前にモデル選択やパラメータチューニングが必要となるのが研究開始当初の実情であった。

## 2. 研究の目的

最適化プロセス全体の効率化のため、近年提案された情報幾何に基づく進化計算の枠組み Information Geometric Optimization (IGO) に着目し、IGO を高次元最適化問題、制約付き最適化問題、ノイズ付き最適化問題へ応用する。これらの研究を通して IGO における事前パラメータや確率モデルの選択に関する知見を獲得し、IGO による最適化プロセス全体の効率化の実現を目的とした。

## 3. 研究の方法

### (1) 確率モデルの選択と自然勾配の導出

IGO は与えられた確率モデルから解候補を生成し、評価し、期待利得関数の自然勾配を推定することで確率モデルのパラメータを更新し、確率モデルを最適解付近へと収束させる方法である。高次元最適化問題や制約付き最適化問題では、確率モデルの選択が探索性能に大きく影響することが予想される。本研究では、従来とは異なる確率モデルを選択し、自然勾配を解析的に導出することで効率的なアルゴリズムを導出し、探索性能を実験的に評価した。

## (2)理論解析とパラメータ設計

一般に、探索アルゴリズムに内在する事前パラメータの適切な値は、目的関数や探索空間の次元数など、最適化問題に依存する。CMA-ES では事前パラメータが最適化問題の次元数のみに依存して予め設計されている。しかし、IGO においては、事前パラメータの設計指針は与えられていない。事前パラメータに推奨値を与えるためには、探索アルゴリズムの理論解析が役立つ。本研究では、ノイズ付き最適化問題において探索速度の理論解析を行い、ノイズ無しの場合と比較することで、ノイズ付き最適化問題に対するパラメータの自動設計法を提案し、理論的に評価した。

## 4. 研究成果

### (1)高次元最適化のためのアルゴリズム

設計変数の次元数  $D$  が 1000 を越えるような高次元最適化に CMA-ES を適用する際、共分散行列の格納と更新のために、 $D$  の二乗に比例したメモリと計算量を必要とする。これは、 $D$  が大きくなるとボトルネックとなる。本研究では、共分散行列を  $D$  に比例した数のパラメータで表現する正規分布モデルを採用し、対応する自然勾配を解析的に導出した。また、この自然勾配を  $D$  に比例した計算量で求めるアルゴリズムを構築した。この結果、従来法では数百次元程度が限界とされていたのに対し、提案法では最大 100000 次元の連続最適化問題を解くことに成功した。また、従来提案されている方法と比較し、実行時間および目的関数評価回数の両面において多くの場合に優れていることを示した。

### (2)制約付き最適化のためのアルゴリズム

進化計算において、最も単純で応用範囲の広い制約対処法の一つに棄却サンプリングがある。CMA-ES は、正規分布モデルを用いた

IGO であると考えられるが、棄却サンプリングを併用した場合、実際に解の従う確率分布は切断正規分布となる。そのため、確率モデルのパラメータ更新は期待利得関数の自然勾配とは異なる。本研究では、CMA-ES が制約条件の境界付近で望ましい振る舞いをとらない原因がこれにあると考え、切断正規分布モデルにおける自然勾配を導出し、これに従う場合の振る舞いを線形制約付き二次関数のもとで解析的に評価した。切断正規分布の自然勾配を用いた場合には、制約条件の有無に関わらず二次関数においてヘッセ行列の学習が可能であることを理論解析および数値実験によって示した。一方、制約条件が非線形の場合には自然勾配計算のために Fisher 情報行列を推定しなければならず、計算時間の面で不利であることも判明した。制約条件が非線形な場合の自然勾配の解析的な導出や近似方法の検討は今後の課題である。

### (3)確率的最適化のためのパラメータ設計

目的関数の値にノイズが付加される確率的最適化問題に対して有効な方法の一つとして平均化が挙げられる。平均化は、目的関数の評価を複数回繰り返し、その平均値を目的関数の推定値とする方法である。理論上、ノイズが不偏ならば十分な回数再評価を繰り返せば目的関数の推定値は真の値に近づくため有効な方法であるが、非効率となりやすい。実用上は、可能な限り少ない再評価回数で最適化を実施するのが望ましいが、必要な再評価回数はノイズの種類や分散に依存するため事前に調節することが困難である。本研究では、離散最適化において、ノイズの分散が既知および未知な場合に必要な再評価回数を導出し、このもとでアルゴリズムの実行時間を理論的に導出した。これにより、事前パラメータ調節を必要としないノイズ対処法が実現された。本研究の成果を連続最適

化に発展させることが今後の課題である。

<引用文献>

[Hansen 2014] N. Hansen, A. Auger. Principled Design of Continuous Stochastic Search: From Theory to Practice. In Y. Borenstein, A. Moraglio eds., Theory and Principled Methods for the Design of Metaheuristics, Springer (2014)

[Akimoto 2010] Y. Akimoto, Y. Nagata, I. Ono, S. Kobayashi. Bidirectional Relation between CMA Evolution Strategies and Natural Evolution Strategies. Parallel Problem Solving from Nature -- PPSN XI, LNCS, Vol. 6238, pp. 154–163 (2010)

[Ollivier 2011] Y. Ollivier, L. Arnold, A. Auger, N. Hansen. Information-Geometric Optimization Algorithms: A Unifying Picture via Invariance Principles. arXiv:1106.3708v2

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 5 件)

1. Youhei Akimoto, Sandra Astete-Morales, Olivier Teytaud. Analysis of runtime of optimization algorithms for noisy functions over discrete codomains. Theoret. Comput. Sci. (2015) DOI:0.1016/j.tcs.2015.04.008 □to appear (査読有)
2. Martin Drozdik, Youhei Akimoto, Hernan Aguirre, Kiyoshi Tanaka. Computational Cost Reduction of Non-dominated Sorting Using M-front. IEEE Transactions on Evolutionary Computation (2015) DOI:10.1109/TEVC.2014.2366498□ to appear (査読有)
3. 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) DOI:10.1145/2739480.2754704 to appear (査読有)

4. Youhei Akimoto, Shinichi Shirakawa. Natural Gradient Approach for Linearly Constrained Continuous Optimization. Parallel Problem Solving from Nature - PPSN XIII, LNCS, Vol. 8672, pp. 252–261 (2014年9月15日) DOI:10.1007/978-3-319-10762-2 (査読有)
5. Youhei Akimoto, Anne Auger, Nikolaus Hansen. Comparison-based Natural Gradient Optimization in High Dimension. Proceedings of Genetic and Evolutionary Computation Conference, pp. 373–380 (2014年7月15日) DOI:10.1145/2576768.2598258 (査読有)

〔学会発表〕(計 6 件)

1. 大内 一季, 白川 真一, 秋本 洋平, 大原剛三. サンプルを再利用する CMA-ES に関する検討. 進化計算シンポジウム 2014 講演論文集, 12月20-21日, 広島県廿日市市安芸グランドホテル, pp. 84–91 (2014年12月20日)
2. 大内 一季, 白川 真一, 秋本 洋平, 大原剛三. Information Geometric Optimizationにおけるサンプルの再利用. 計測自動制御学会 システム・情報部門学術講演会 2014 講演論文集, 11月21-23日, 岡山大学津島キャンパス, pp. 752–757 (2014年11月21日)
3. Youhei Akimoto, Anne Auger, Nikolaus Hansen. A linear time natural gradient algorithm for black-box optimization in high dimension. Gaspard Monge Program for Optimization - Conference on Optimization & Practices in Industry : PGMO-COPI'14, Ecole Polytechnique, Paris-Saclay, Oct. 28th–31st. France (2014年10月30日)
4. Youhei Akimoto. Function-Value-Free Continuous Optimization in High Dimension. Mini Symposium on Function-Value-Free Optimization

(MS47), SIAM Conference on Optimization, San Diego, CA, USA, May 19-22 (2014年5月20日)

5. Youhei Akimoto, Shinichi Shirakawa. Natural Gradient Approach for Constrained Continuous Optimization. The 7th Evolutionary Computation Symposium, December 14-15, Kirishima, Kagoshima, Japan (2013年12月15日)
6. Youhei Akimoto, Sandra Astete-Morales, Olivier Teytaud. Additive Noise in Discrete Optimization. The 7th Workshop on Theory of Randomized Search Heuristics, ThRaSH'13, Sep. 13-14, Aberystwyth, Wales (2013年9月14日)

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

秋本 洋平 (AKIMOTO, Yohei)

信州大学・学術研究院工学系・助教

研究者番号：20709654

##### (2) 研究分担者

( )

研究者番号：

##### (3) 連携研究者

( )

研究者番号：