

種分化を導入した Differential Evolution による 探索の効率化

Improvement of Search Performance of Differential Evolution by using Speciation

中村 圭佑

Keisuke NAKAMURA

広島市立大学大学院情報科学研究科

Email: knakamura@ints.info.hiroshima-cu.ac.jp

原 章

Akira HARA

広島市立大学大学院情報科学研究科

Email: ahara@hiroshima-cu.ac.jp

高濱 徹行

Tetsuyuki TAKAHAMA

広島市立大学大学院情報科学研究科

Email: takahama@info.hiroshima-cu.ac.jp

Abstract—Differential Evolution (DE) is simple but powerful algorithm for optimization problems. Offspring are generated by the crossover between parents and mutant vectors. There are two methods for selecting the base vector in the mutant vector, best and rand. It is difficult to select the appropriate strategy according to the problems. In this paper, we propose a new species-based DE method for searching a global optimum. Our speciation methods utilize Beta-skeleton graph and K-means clustering. The search space is divided into multiple sub-spaces by the speciation, and respective species search for various solutions. As a result, a global optimum can be acquired more efficiently. We applied our proposed methods to some function optimization problems and showed their effectiveness.

I. はじめに

単峰性関数、多峰性関数の最小値または最大値を探索する関数最適化問題は、古くから良く知られた問題である。唯一の最適解を発見することを目的とするアルゴリズムでは、多峰性関数のような局所解が多数存在する場合、関数値の良い個体を見つけるとそちらに引きずられて局所解に収束してしまい、大域的最適解を発見できないという問題がある。

本研究では、遺伝的アルゴリズムと似た構造をもつ Differential Evolution[1] に注目した。Differential Evolution の子供の生成は、親個体と親個体ではない個体から生成された変異ベクトル ($x^{r1} + F \cdot (x^{r2} - x^{r3})$) との交叉によって行われる。変異ベクトルのベースとなるベースベクトル (x^{r1}) の選択方法には、rand と best の 2 通りがある。局所解をもたない単峰性関数に関しては、個体集団内で一番良い値をもつ個体をベースベクトルに選ぶ best の方が収束が速い。しかし、局所解をもつような多峰性関数では局所解に収束してしまい、大域的最適解を探し出すことが難しい。一方、rand はベースベクトルを個体集団の中からランダムに選ぶため、局所解に陥りにくいのが、単峰性関数においては best よりも収束が遅い。

そこで、種分化を導入することにより、部分ごとに住み分けながら局所的に探索を行い、複数の最適解を同時に発見できるような、種分化を導入した Differential Evolution[2] を参考にし、探索空間を複数に分けることでより効率的に最適解を探索できる新しい種分化を導入した Differential Evolution

を提案する。種分化手法にはなわばり半径を使用するもの [2]、グラフ (ガブリエルグラフ、相対近傍グラフ) を使用するもの [3] がある。本研究では新たにグラフとしてベータスケルトンを用いる方法とクラスタリング手法である k-means 法を種分化に取り入れた手法を提案する。単峰性関数、多峰性関数のベンチマーク関数を解き、Differential Evolution におけるベースベクトルの選択方法 rand, best と比較することにより、本手法の有効性を示す。

II. DIFFERENTIAL EVOLUTION

Differential Evolution[1](以下、DE と略す) は、実数空間における最適化アルゴリズムである。DE/base/num/cross は DE の表記方法で、以降で説明する DE の手法を示している。< base > はベースベクトル x^{r1} の選択方法、< num > は $x^{r2} - x^{r3}$ のような差分ベクトルの数、< cross > は交叉方法を意味している。 x^{r1} , x^{r2} , x^{r3} は子個体を生成するときに使われる個体である。

A. Differential Evolution のアルゴリズム

DE のアルゴリズムを以下に示す。

- 1) ランダムに個体を生成し集団を形成
- 2) 個体の関数値を計算
- 3) 子個体の生成
 - a) x^{r1} , x^{r2} , x^{r3} の選択
 - b) 変異ベクトル v の生成
 - c) 変異ベクトル v と親個体 x^P を交叉し、子個体 x^{child} を生成
- 4) 置換え
 - 生成された子個体 x^{child} と親個体 x^P の関数値の比較を行い、子個体 x^{child} の関数値の方が良ければ、置換えを行う
- 5) 終了条件を満たしていなければ、3. に戻る

B. 子個体の生成

各々の個体 x^P において、それぞれ一つずつ子個体を生成する。DE における子個体の生成は、GA のように親同士を

交叉させるのではなく、親個体 x^P と式(1)で生成される変異ベクトル v を遺伝子単位で交叉させることで行われる。

$$v = x^{r1} + F \cdot (x^{r2} - x^{r3}) \quad (1)$$

ベースベクトル x^{r1} には以下の2種類の選択方法がある。

- rand
全体からランダムに選択される。
- best
全体で最も関数値の良い個体を選択する。

式(1)の x^{r1}, x^{r2}, x^{r3} は条件 $r1 \neq r2 \neq r3 \neq P$ のもとで選択される。 x^{r2}, x^{r3} は特に制限なく全体からランダムに選択される。パラメータ F は、差分ベクトルの伸縮を意味するスケールリングファクタである。

また、交叉方法は exponential crossover と binomial crossover があり、本研究では、exponential crossover を使用する。

- exponential crossover (指数交叉)
 - 1) 交叉を始める遺伝子をランダムに決める
 - 2) 親個体 x^P と変異ベクトルの遺伝子を交換する
 - 3) 次の遺伝子に進む
 - 4) 交叉率 CR よりも区間 [0,1] の一様乱数の値が小さく、かつ全ての遺伝子を巡回していなければ2.に戻る

III. 種分化を導入した DIFFERENTIAL EVOLUTION

種分化とは、生物が進化する過程で生じた集団の分化、つまり、新たな種が形成される過程のことを指す。これにより、集団ごとに異なる様々な進化が可能になる。つまり、種分化の特徴として、探索空間を部分空間に分け、各部分で最良解を得るような探索を行い、複数解を同時に発見する。これが種分化を導入したDE[2]である。種分化方法には、なわばり半径による種分化、近傍グラフに基づく種分化がある。本研究では新たに、クラスタリング手法である k-means 法による種分化を提案する。本節ではこれらについて説明する。

A. なわばり半径による種分化

文献 [2] ではなわばり半径による種分化が提案されている。種の支配者は、個体集団の関数値の良い上位個体から決められる。図1は最小化問題において $f(A) < f(B) < f(C)$ となっている例である。既に存在する種の支配者のなわばり半径 R の中に入っていない関数値の良い個体が新たな種の支配者 x^s となる。複数のなわばりの交わり部分に属している個体は、属する種の支配者の関数値が最も良い支配者の種に属するものとし、他の種に重複して属することはない。式(2)はなわばり判定条件である。個体 x^i と種の支配者 x^s とのユークリッド距離 d_{is} と、あらかじめ与えられているなわばり半径 R を用いてなわばりに含まれるかどうかを判定する。なわばり半径内の個体は x^s の種に属することになる。

$$d_{is} = \sqrt{\sum_{j=1}^D (x_j^i - x_j^s)^2} \leq R \quad (2)$$

この方法は有効であるが、なわばり半径 R をどのようにして決定するべきかという問題がある。

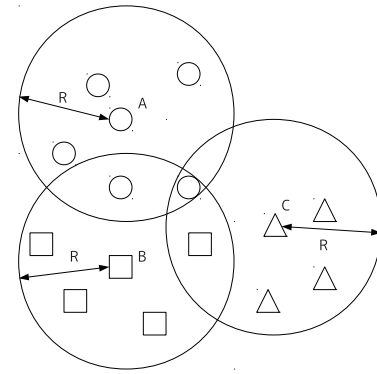


図1. 種となわばり

なわばりを張る種分化では、関数値の優良個体を種の支配者とし、支配者を中心としてあらかじめ定められた半径 R のなわばり内に存在する個体を種とみなす。SDEのアルゴリズムを以下に示す。

- 1) ランダムに個体を生成し集団を形成
- 2) 個体の関数値を計算
- 3) 種分化
 - a) 個体群を関数値の良い順にソート
 - b) 関数値の良い順に個体を種の支配者とし、種を形成する
- 4) 子個体の生成
- 5) 置換え
- 6) 終了条件を満たしていなければ、3)に戻る

種分化はDEアルゴリズムの子個体の生成直前に適用される。

B. ベースベクトルと差分ベクトルの選択

式(1)の変異ベクトル生成で使われる x^{r1}, x^{r2}, x^{r3} は種の中からランダムに選択される。この際、種に所属する最小個体を維持するために最小個体数 $SMIN$ が定義されている。種の所属個体数が $SMIN$ 個に満たない場合は、 $SMIN$ 個になるまで種のなわばり内に個体をランダムに増やしてから三つの個体を選択される。ただし、なわばり内にランダムに生成された個体は変異ベクトルの生成のみに用いられ、次世代には残らない。また、置換えの際に子個体の関数値が所属する種の支配者の関数値と等しい場合は、ランダムに個体を生成して親個体と置換えて種の中から類似した個体を省くという処理も行われている。SDE[2]では、種の内部だけで局所的に探索を進めるために、変異ベクトル生成に使用する x^{r1}, x^{r2}, x^{r3} は全て同じ種に属する個体の中からランダムに選択する。この x^{r1}, x^{r2}, x^{r3} の選択方法では種の中でのみ探索が進むので、複数の最適解や局所解をもつような関数では、探索に時間がかかってしまう場合がある。文献[4]では、最適解への収束を早めるため、種分化で得た情報を活用するように、所属している種の支配者を x^{r1} とする。また、種の外の情報も併せて大域的な探索ができるよう、 x^{r2}, x^{r3} を全体からランダムに選択する。本研究では、文献[4]の方法を使用している。

C. 近傍グラフに基づく種分化

近傍グラフに基づく種分化を導入した Differential Evolution[3] が提案されている。これは、なわばり半径を設定する際の問題を解決するためのものである。文献[3]では、ガブリエルグラフ、相対近傍グラフが導入されている。本研究では、新たにベータスケルトンによる種分化を導入した。まず、ベータスケルトンの説明をする。ベータスケルトン (β skeleton)[3] はユークリッド平面における点の集団 S から定義される無向グラフである。点 p, q について、これら 2 点からある一定の領域をとり、その領域内に集団 S の他の点がない場合、点 p, q を直線で結ぶ。 β は正の実数値とし、 β による領域は $\beta \leq 1$ と $\beta > 1$ のときで異なる。また、 $\beta = 1$ の時はガブリエルグラフ、 $\beta = 2$ の時は相対近傍グラフになる。以下に β の値による領域のとり方を示す。

- $\beta \leq 1$: 点 p, q を通る半径 $d_{pq}/(2\beta)$ の円の共通部分 (図 2)
- $\beta > 1$: 点 $p'((1 - \beta/2)p + (\beta/2)q)$ と点 $q'((\beta/2)p + (1 - \beta/2)q)$ を中心とする半径 $\beta d_{pq}/2$ の円の共通部分 (図 3)

ここで、 d_{pq} は点 p, q 間の距離を表す。

$\beta = 0$ の時、ベータスケルトンは完全グラフとなる。 β の値が小さい場合ベータスケルトンは密なグラフになり、 β の値が大きくなるにつれ疎なグラフになっていく。 $\beta = 1$ の場合のガブリエルグラフは $\beta = 2$ の場合の相対近傍グラフより密である。

本研究では種分化の際にベータスケルトンを用いる。これは β の値を変更することにより、ガブリエルグラフより密なグラフを作成すること、ガブリエルグラフより疎であり相対近傍グラフよりも密なグラフを作成できること、また相対近傍グラフよりも疎なグラフを作成することができるからである。本研究でのグラフを用いて種分化する DE のアルゴリズムを以下に示す。

- 1) ランダムに個体を生成し集団を形成
- 2) 個体の関数値を計算
- 3) ベータスケルトンを作成
- 4) 種分化
 - 個体の関数値の良い順にソート
 - 関数値の良い順に種の支配者とし、種を形成
 - グラフにしたがって、種の支配者につながっている個体をその種に属させる
- 5) 子個体の生成
- 6) 置換え
- 7) 終了条件を満たしていなければ、3) に戻る

IV. クラスタリングによる種分化

本研究では、クラスタリング手法として k-means 法を用いた種分化を導入した。まず、k-means 法について説明する。

A. k-means 法

k-means 法 (k 平均法) は、非階層的クラスタリング技法の代表的手法である [5]。この方法では、クラスタ数をあらかじめ設定し、個体を k 個のクラスタ分類する。以下に最も単純な k-means 法のアルゴリズムを示す。

- 1) k 個のクラスタの中心あるいは初期分割をランダムに与える

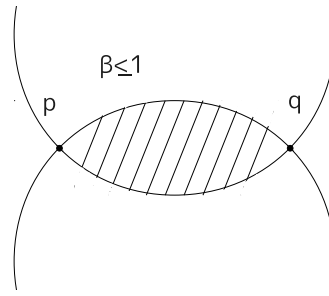


図 2. ベータスケルトン, $\beta \leq 1$

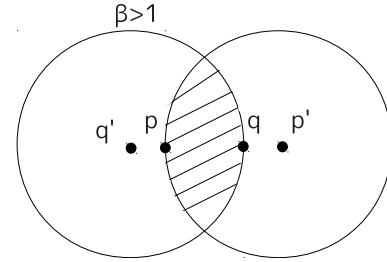


図 3. ベータスケルトン, $\beta > 1$

- 初期分割を与えた場合は、各クラスタの重心を各クラスタの中心とする
- 2) 各対象を最も近いクラスタの中心に割り当てる
- 3) すべての対象の割り当てが一つ前のステップと変化がなければ終了。そうでなければ各クラスタの重心を新しい中心として 2. に戻る

初期値の選び方によっては適切なクラスタが得られないことがある [5]。また本研究では、1) において初期分割をランダムに与える方法を選択した。

B. 世代数による k の値の変化

k-means 法を使用して常に k 個のクラスタに分けたままだと収束が遅くなってしまいうため、 k の値を固定する方法に加え、以下の式により世代によって k の数を減少させる方法を提案する。

$$k_t = k_0 - \left(\lfloor (k_0 - k_{min}) \times \frac{t}{t_{MAX}} + 0.5 \rfloor \right) \quad (3)$$

ここで、 t は現在の世代、 t_{MAX} は最大世代数である。床関数 ($\lfloor \cdot \rfloor$) は整数化を表している。 k_0 は初めに与えられる k の値、つまり 0 世代目での k の値であり、 k_{min} は k を減少させる最小値である。 $k_0 = 20, k_{min} = 1$ のとき、 k_t は 20 から世代が増えるにつれ、1 に向かって減少する。本研究では、 $k_{min}=1$ とした。

C. 種分化に k-means 法を導入した SDE

種分化に k-means 法を導入した SDE のアルゴリズムを示す。

- 1) ランダムに個体を生成し集団を形成
- 2) 個体の関数値を計算
- 3) k-means 法により k 個のクラスタに集団を分類
- 4) 種分化
 - 各クラスタを種とし、クラスタ中の最良個体を種の支配者とする

- 5) 子個体の生成
- 6) 置換え
- 7) 終了条件を満たしていなければ, 3) に戻る

文献 [4] のようにベースベクトルは種の支配者を, 差分ベクトルは全体からランダムに選択する.

V. 実験

A. 実験の設定

実験では, 提案したアルゴリズムを関数最小化問題に対して適用した. 以降の節では実験を行った関数や使用したパラメータ, 実験結果について説明する. パラメータやテスト関数は文献 [6] で使用された設定を一部使用した. なお, 子供の生成の際に用いた交叉方法は II-B 節で述べた exponential crossover である. テストは 13 関数に対して適用した. すべての実験は, スケーリングファクタ $F = 0.5$, 交叉率 $CR = 0.9$, 次元数 30, 個体数 100, 試行回数 30 の条件で実行した.

VI. 結果と考察

関数値の良い順に順位をつけた平均を表 I に, 実験に使用した 13 関数の中から単峰性関数である Sphere の結果を図 4 に, 多峰性関数である RASTRIGIN の結果を図 5 に示す. 図の縦軸は発見した最良解の 30 試行の平均, 横軸は世代数である. 性能を比較した手法は, ベースベクトルのとり方を rand, best とした手法, ベータスケルトンを種分化に用いて $\beta = 1.9$ ($\beta=1.9$) とした手法, 種分化に k-means 法を用いて k を 5 で固定した手法 ($k = 5$), 世代によって 5, 10 から 1 に減少させた手法 ($k_0 = 5, k_0 = 10$) である. 単峰性関数, 多峰性関数ともに, 種分化に k-means 法を用いて k の値を世代数に応じて減少させていく方法が有効であることがわかった. 単峰性関数に関しては, 種分化を導入することで best には及ばないが rand よりも速い収束速度を得ることができ, また多峰性関数に関しては rand, best よりも良い値を探索することができた. 種分化して空間を分け探索することで, 局所解に陥りにくくなり, またベースベクトルを種の支配者, つまり部分空間で最も関数値が良い個体を選ぶため rand よりも収束が速くなったと考えられる.

表 I
平均順位比較

平均順位	rand	best	$\beta = 1.9$	$k = 5$	$k_0 = 5$	$k_0 = 10$
f_1-f_7	4.1	4.5	3.0	2.6	2.3	2.9
f_8-f_{13}	4.6	3.3	3.1	3.0	2.4	3.1
$f_{14}-f_{26}$	3.8	5.4	2.9	2.3	2.1	2.9

VII. おわりに

本研究では, Differential Evolution に種分化を導入することにより探索空間を分けることで探索の効率化を図った. 種分化手法として新たにグラフとしてベータスケルトンを導入する方法, クラスタリング手法である k-means 法を導入する方法, k-means 法を用いて世代数により k の値を制御する方法を提案した.

この結果, k-means 法の k を世代によって減少させることが有効であることが分かった. しかし, 関数によっては k の値を固定したまま, つまり種の数をもくしたままの方が

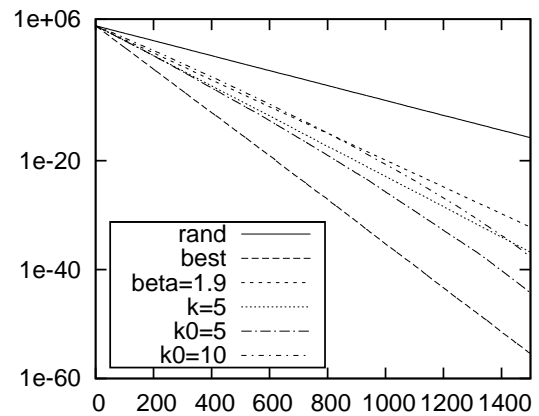


図 4. f_1 における世代による最適値の変化

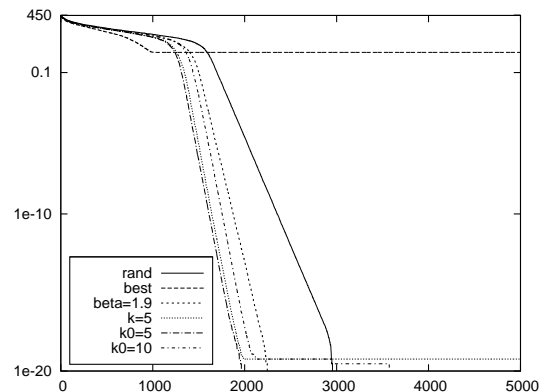


図 5. f_9 における世代による最適値の変化

良い場合もあるので適応的にパラメータを変化させる方法を考える必要がある.

参考文献

- [1] R. Storn and K. Price, "Differential Evolution - A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces," Technical Report TR-95-012, International Computer Science Institute, Berkeley, 1995.
- [2] X. Li, "Efficient differential evolution using speciation for multimodal function optimization," Proceedings of the 2005 conference on Genetic and evolutionary computation, pp.873-880, Washington DC, June 2005.
- [3] 木村孝作, 柴坂勲, 原章, 市村匠, 高濱徹行, "近傍グラフに基づく種分化を導入した Differential Evolution による複数解の探索," 第 26 回フuzzyシステムシンポジウム, pp.566-571, 広島, 2010.
- [4] 柴坂美祐喜, 原章, 市村匠, 高濱徹行, "種分化を導入した Differential Evolution による複数解を持つ多峰性関数の最適化," 電子情報通信学会論文誌, D, Vol.J92-D, No.7, pp.1003-1014, 2009.
- [5] 宮本定明, "クラスター分析入門," 森北出版, 1999.
- [6] J. Zhang and A. C. Sanderson, "JADE: Adaptive Differential Evolution with Optional External Archive," IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol.13, No.5, pp.945-958, October 2009.

問い合わせ先

〒731-3194

広島市安佐南区大塚東三丁目 4 番 1 号

広島市立大学大学院情報科学研究科知能システム研究室

中村 圭佑

Email: knakamura@ints.info.hiroshima-cu.ac.jp