

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	実数値進化計算によるノイズを有する関数の期待値最適化
Title(English)	Expectation Optimization of Noisy Functions using Real-Coded Evolutionary Computation
著者(和文)	益富和之
Author(English)	Kazuyuki Masutomi
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第9869号, 授与年月日:2015年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:小野 功,樺島 祥介,寺野 隆雄,山村 雅幸,渡邊 澄夫
Citation(English)	Degree:., Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第9869号, Conferred date:2015/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	要約
Type(English)	Outline

博士（工学）論文（一部要約）

実数値進化計算による
ノイズを有する関数の期待値最適化

Expectation Optimization of Noisy Functions
using Real-Coded Evolutionary Computation

平成 27 年 2 月

指導教員：小野 功 准教授
氏 名：益富 和之

目次

第 1 章	序論	3
1.1	背景と目的	3
1.2	方法と意義	4
1.3	論文の構成	5
第 2 章	問題の所在	6
2.1	はじめに	6
2.2	準備	6
2.3	問題の定義	10
2.4	既存手法とその問題点	11
2.5	本論文での接近法	14
2.6	おわりに	15
第 3 章	ノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化のための自然進化戦略	16
第 4 章	非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値問題のための実数値 GA	17
4.1	はじめに	17
4.2	基本的な考え方	17
4.3	目的関数の期待値と実行可能確率の推定法	20
4.4	近傍個体数のバラツキを抑える観測戦略	20
4.5	一様かつ対称に個体を生成する交叉 HEX	21
4.6	選好順序	21
4.7	アルゴリズム	22
4.8	実験	22
4.9	考察	23
4.10	倒立振子安定化問題における性能評価	25
4.11	おわりに	27
第 5 章	非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化のための自然進化戦略	28
第 6 章	結論	29
6.1	研究成果の取りまとめ	29
6.2	今後の課題	30

公表論文	32
参考文献	34
付録 A 摂動ノイズを有する問題の $\bar{f}^{\text{pert}}(\mathbf{x})$ とその最適解	37
付録 B 倒立振子安定化問題の実装	38
B.1 目的関数値と実行可能性の計算	38
B.2 最適化手法から見た探索空間	38

第 1 章 序論

1.1 背景と目的

実数値ベクトル \mathbf{x} を決定変数とする目的関数 $f(\mathbf{x})$ の値を最小化するような \mathbf{x} を求める問題を、関数最適化とよぶ。関数最適化は、科学や工学において、システムの制御や設計、同定などにおいてあらわれる重要な問題である。これらの実問題には、目的関数に不可制御なパラメータ、すなわちノイズを確率変数として含む場合がしばしばある。このとき、観測される目的関数値が確率的にゆれる困難な問題となる。不可制御なパラメータの、目的関数への加わり方によって、加法的ノイズ (additive noise) と非加法的ノイズ (non-additive noise) に分けることができる。加法的ノイズは、目的関数値に加法的に加わる観測ノイズで、その確率分布が決定変数によらず一定のものである。非加法的ノイズはそれ以外のノイズで、特に決定変数に加わる一定の摂動を扱うことが多い [Tsutsui 97, Beyer 03]。また、最適化問題としての定式化では、目的関数の期待値を最小化する定式化 [Jin 05]、中央値などの分位数を最小化する定式化 [Hansen 09]、目的関数値が一定以下になる累積確率を最大化する定式化 [Beyer 06] などが存在する。本研究では、目的関数の期待値を最小化する問題を扱う。また、自律制御のエージェントやロボットの政策を最適化する Direct Policy Search [Heidrich-Meisner 08, Busoniu 08, Pratihar 03] などの、目的関数値の計算にノイズを含む物理シミュレーションを行う必要のある問題では、目的関数は勾配などの解析的性質がわからないブラックボックス関数となる。

関数最適化には、目的関数とは別に、満たすべき制約を有する問題も多い。解が制約を満たすことを実行可能であるといい、実行可能な解を実行可能解とよぶ。ノイズと制約をともに含む問題では、実行可能性も確率的にゆれ、同一の解であっても、ノイズによって実行可能になったり不可能になったりする。このような問題では、解が実行可能である確率 (実行可能確率) が一定以上であるという機会制約を設け、機会制約を満たすもののうち、実行可能時の目的関数の期待値を最小化する解が求められる [Charnes 60]。制約に関する性質としては、実行可能か不可能かのみが示される非明示制約がある。物理シミュレーションを伴う問題では、意味のある制約違反量を提示する制約関数を作ることが困難で、実行可能か不可能かのみを示すことのできる非明示制約となることがある [Ono 98]。

ノイズを有する関数の期待値最適化への接近法としては、数理計画法、確率近似法 (Stochastic Approximation)、実数値進化計算などがある。数理計画法では、[Charnes 63, Cooper 97] のように、確率変数を含む線形制約を持つ問題を扱えるようにした手法がある。これらの手法は、適用可能な問題を効率的に解くことができるが、目的関数がブラックボックスである問題には適用できない。[Kiefer 52] をはじめとする確率近似法は、2 つの解の目的関数の観測値の差をもとに勾配を推定して探索する直接探索法であり、ブラックボックス問題にも適用することができるが、制約を扱うことはできない。多数の解からなる集団を用いて探索する実数値進化計算は、ノイズを有する問題にもしばしば適用される [Jin 05]。多くの手法 [Aizawa 93, Arnold 00, Branke 01, Fitzpatrick 88, Hansen 09, Pietro 04] は無制約問題を対象としている

が、[Deb 09, Loughlin 99] は、機会制約を有する実問題に実数値進化計算を適用している。[Deb 09] では、制約関数値を用いて実行可能確率を推定することで、実行可能確率が 1 に近い領域でのトレードオフを求めているが、非明示制約を持つ問題には適用できない。[Loughlin 99] は非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化に適用できる手法である。

実数値進化計算をノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化に適用する際の主要な課題は、ノイズを含む目的関数の観測値から、期待値のよい領域を推定することである。最もナイーブな工夫として、大きな集団サイズを用いて「均す」方法 [Fitzpatrick 88, Arnold 00] や、同一個体の目的関数値を繰り返し観測して、そのサンプル平均によって目的関数の期待値を推定する方法 [Aizawa 93, Pietro 04] がある。しかし、精度のよい解を得るためには、膨大な回数の観測を必要とする。これを解決する手法として、過去に観測した点の情報を利用して、ローカルリグレーションによって景観を推定する方法 [Branke 01] がある。しかし、推定量の算出にかかる時間計算量が問題の次元数 n に対して $\mathcal{O}(n^6)$ と大きく、高次元の問題への適用は困難である。Uncertainty Handling CMA-ES (UH-CMA-ES) [Hansen 09] は、再観測に基づく最も有力な手法の一つであり、不確かさの影響の大きさに合わせて一個体あたりの観測数を増減することで観測回数を抑えている。しかし、周囲の点の情報を利用しないことから、ローカルリグレーションを用いる手法に比べると多くの観測を必要とすると考えられる。

非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化のために提案された Loughlin と Ranjithan の手法 [Loughlin 99] は、再観測に基づく手法で、同一個体を繰り返し観測して目的関数の期待値と実行可能確率を推定している。さらに、推定された実行可能確率から、機会制約を違反すると考えられる個体にペナルティを与えることで、機会制約に対処している。しかし、個体あたりの観測回数を適応せず、周囲の点の情報を利用した推定も行わないため、高精度な解を得るために膨大な観測数を必要とする問題点がある。

本論文の目的は 2 つある。1 つ目は、ノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化を、既存手法より小さい観測数とほどほどの計算量で実現することである。2 つ目は、非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化を、既存手法より小さい観測数とほどほどの計算量で実現することである。本論文では、これらを達成するために、それぞれ新たな実数値進化計算手法を提案し、その性能評価を行う。

1.2 方法と意義

本論文では、1 つ目の目的を達成するため、決定的な無制約ブラックボックス関数最適化のための最有力な自然進化戦略である Distance-weighted Exponential Natural Evolution Strategy (DX-NES) [福島 13] を拡張することを考える。DX-NES をノイズ環境に適用した際の問題点について考察し、それを克服することで、既存手法より小さい観測数で良好な解を獲得することを目指す。2 つ目の目的を達成するためには、2 段階のアプローチを行う。まず、観測数の観点で既存手法を凌駕する手法として、実数値 GA を用いた新たな手法を提案する。次に、提案した実数値 GA が計算量に関する問題を抱えていることを指摘し、無制約問題のために提案した自然進化戦略を、機会制約問題に適用できるように変形する。それぞれの手法について、数値実験による性能評価を通じて、目的の達成を確認する。

近年の目覚ましい計算機技術の進歩により、大規模なシステムのシミュレーションを伴うブラックボックス問題の最適化に進化計算が利用されるようになってきた。実世界には、様々な不確かさが伴うことから、ノイズを有する関数の期待値最適化にこの潤沢な計算資源を費やすことは、ますます重要になると考えられる。本論文で提案する手法は、従来得ることの出来なかった、非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化の高精度な解を獲得できる。これにより、多数関節ロボットの制御器設計や、大規模電力システムに関する

るパラメータ最適化など、これまで最適化を諦めざるを得なかった新たな領域にも歩み寄ることができると信じている。

1.3 論文の構成

本論文は「実数値進化計算によるノイズを有する関数の期待値最適化」と題し、6章より構成される。

第1章は「序論」である。

第2章は「問題の所在」である。ここでは、まず、準備として、決定的なブラックボックス関数最適化のための実数値進化計算について述べる。その後、ノイズを有する関数の期待値最適化を、制約の有無について、無制約問題と非明示機会制約問題に分けて定義する。それぞれについて既存の接近法とその問題点を指摘し、本研究における接近法を述べる。

第3章は「ノイズを有する無制約関数の期待値最適化のための自然進化戦略」である。ここでは、決定的な問題で最も有力なDX-NESを拡張したDX-NES-UEを提案する。数値実験により、既存手法より高精度な解を少ない観測回数で獲得できることを示す。

第4章は「機会制約を有する関数の期待値最適化のための実数値GA」である。ここでは、観測履歴を利用して目的関数の期待値と実行可能確率を推定するHDCGAを提案する。数値実験により、既存手法より高精度な解を少ない観測回数で獲得できることを示す。

第5章は「機会制約を有する関数の期待値最適化のための自然進化戦略」である。ここでは、DX-NES-UEの景観推定とHDCGAの選好順序を組合せたDX-NES-CCを提案する。数値実験により、HDCGAより少ない時間・空間計算量で同程度の精度の解を獲得できことを示す。

第6章は「結論」である。ここでは、本論文を取りまとめ、今後の課題について述べる。

第 2 章 問題の所在

2.1 はじめに

本章では、まず、準備として、決定的なブラックボックス関数最適化のための実数値進化計算を紹介する。その後、本論文で取り扱う 2 つの問題の定義を述べ、既存手法とその問題点を明らかにする。最後に、それらを克服するための本論文における接近法について述べる。

以下、2.2 節が準備、2.3 節が問題の定義、2.4 節が既存手法とその問題点、2.5 節が本論文における接近法であり、2.6 節で本章をまとめる。

2.2 準備

本節では、決定的なブラックボックス関数最適化のための実数値進化計算について述べる。関数がブラックボックスであるとは、関数の解析的性質がわからず、数理計画法などの手法で最適化できないことをいう。直接探索法である実数値進化計算は、ブラックボックス関数最適化のための有力な接近法の一つである。実数値進化計算では、実数値 GA (Real-Coded Genetic Algorithms) [Davis 90, 小林 09], 進化戦略 (Evolution Strategies) [Beyer 02], 差分進化 (Differential Evolution; DE) [Storn 97], Particle Swarm Optimization (PSO) [Kennedy 95] などの手法が提案されている。なかでも、進化戦略の一種である Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy (CMA-ES) [Hansen 01, Hansen 04] や Distance-weighted Exponential Natural Evolution Strategy (DX-NES) [Fukushima 11, 福島 13], 実数値 GA の一種である REX/JGG [小林 09] は、悪スケール性、変数間依存性、多峰性などの最適化が困難な景観を有する問題においても良好な性能を示し、決定的な環境において、最も優れた実数値進化計算手法*1に挙げられる。REX/JGG は統計量遺伝 [Kita 99] を考慮した交叉と世代交代モデル Just Generation Gap (JGG) [秋本 10] を組合せた実数値 GA として一般化できる。本論文では、これらの進化戦略と実数値 GA を用いることを考える。以下、本節では、DX-NES と CMA-ES, REX/JGG について詳しく紹介する。

2.2.1 DX-NES

DX-NES は、自然進化戦略 [Wierstra 08] の 1 つとして提案された、決定的な環境を対象とした有力な進化計算手法である。

自然進化戦略では、パラメータ θ をもつ個体生成分布に従う個体を生成して、解空間を探索する。その際、

*1 これらの文献に含まれる実験結果を参照する限り、DX-NES が最も優れている。

Algorithm 2.1 DX-NES

Require: $\theta_0, \lambda, c_\sigma, \mu_{\text{eff}}, \{w_i^{\text{rank}}\}, \{w_i^{\text{dist}}\}, \eta_\sigma^{\text{move}}, \eta_\sigma^{\text{stag}}, \eta_\sigma^{\text{conv}}, \eta_{\mathbf{B}}^{\text{move}}, \eta_{\mathbf{B}}^{\text{stag}}, \eta_{\mathbf{B}}^{\text{conv}}$

- 1: $g \leftarrow 0, \theta^{(0)} \leftarrow \theta_0, \mathbf{p}_\sigma^{(0)} \leftarrow \mathbf{0}, \epsilon \leftarrow \mathbb{E}[\|\mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})\|]$
- 2: **repeat**
- 3: **for** $j = 1, \dots, \lambda/2$ **do**
- 4: generate $\mathbf{z}_{2j-1} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}), \mathbf{z}_{2j} \leftarrow -\mathbf{z}_{2j-1}$
- 5: **end for**
- 6: sort $\{\mathbf{z}_i\}$ with respect to $f(\mathbf{m}^{(g)} + \sigma^{(g)}\mathbf{B}^{(g)}\mathbf{z}_i)$
- 7: $\mathbf{p}_\sigma^{(g+1)} \leftarrow (1 - c_\sigma)\mathbf{p}_\sigma^{(g)} + \sqrt{c_\sigma(2 - c_\sigma)\mu_{\text{eff}} \sum_{i=1}^\lambda w_i^{\text{rank}}\mathbf{z}_i}$
- 8: **if** $\|\mathbf{p}_\sigma^{(g+1)}\| \geq \epsilon$ **then** $\{w_i\} \leftarrow \{w_i^{\text{dist}}\}$ **else** $\{w_i\} \leftarrow \{w_i^{\text{rank}}\}$ **end if**
- 9: **if** $\|\mathbf{p}_\sigma^{(g+1)}\| \geq \epsilon$ **then**
- 10: $\eta_\sigma \leftarrow \eta_\sigma^{\text{move}}, \eta_{\mathbf{B}} \leftarrow \eta_{\mathbf{B}}^{\text{move}}$
- 11: **else if** $\|\mathbf{p}_\sigma^{(g+1)}\| \geq 0.1\epsilon$ **then**
- 12: $\eta_\sigma \leftarrow \eta_\sigma^{\text{stag}}, \eta_{\mathbf{B}} \leftarrow \eta_{\mathbf{B}}^{\text{stag}}$
- 13: **else**
- 14: $\eta_\sigma \leftarrow \eta_\sigma^{\text{conv}}, \eta_{\mathbf{B}} \leftarrow \eta_{\mathbf{B}}^{\text{conv}}$
- 15: **end if**
- 16: $G_\delta \leftarrow \sum_{i=1}^\lambda w_i\mathbf{z}_i, \mathbf{G}_M \leftarrow \sum_{i=1}^\lambda w_i(\mathbf{z}_i\mathbf{z}_i^\top - \mathbf{I})$
- 17: $G_\sigma \leftarrow \text{tr}(\mathbf{G}_M)/n, \mathbf{G}_B \leftarrow \mathbf{G}_M - G_\sigma\mathbf{I}$
- 18: $\mathbf{m}^{(g+1)} \leftarrow \mathbf{m}^{(g)} + \sigma^{(g)}\mathbf{B}^{(g)}\mathbf{G}_\delta$
- 19: $\sigma^{(g+1)} \leftarrow \sigma^{(g)} \exp((\eta_\sigma/2)G_\sigma)$
- 20: $\mathbf{B}^{(g+1)} \leftarrow \mathbf{B}^{(g)} \exp((\eta_{\mathbf{B}}/2)\mathbf{G}_B)$
- 21: $g \leftarrow g + 1$
- 22: **until** termination condition met

個体生成分布に関する目的関数値の期待値

$$J(\boldsymbol{\theta}) = \int f(\mathbf{x})p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\theta})d\mathbf{x} \quad (2.1)$$

を最小化するパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ の発見を目指す。ここで、 $p(\mathbf{x} | \boldsymbol{\theta})$ は個体生成分布の確率密度関数である。 $J(\boldsymbol{\theta})$ の最適化には、自然勾配法 [Amari 98] を利用する。自然勾配法は、

$$\boldsymbol{\theta}^{(g+1)} \leftarrow \boldsymbol{\theta}^{(g)} - \eta \mathcal{I}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^{(g)}) \nabla_{\boldsymbol{\theta}} J(\boldsymbol{\theta}^{(g)}) \quad (2.2)$$

を反復する手法である。ここで、 $\eta > 0$ は学習率、 \mathcal{I} は自然な計量テンソルである。 $\boldsymbol{\theta}$ が確率分布のパラメータなので、ここでは Fisher 情報行列を用いる [Amari 85]。

Algorithm 2.1 に、DX-NES のアルゴリズムを示す。1 行目で初期化し、2~22 行目を繰り返す。ここで、個体生成分布には多変量正規分布 $\mathcal{N}(\mathbf{m}, \mathbf{C})$ を使い、パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ は、平均ベクトル $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^n$ 、ステップサイズ $\sigma > 0$ 、正規化変換行列 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ からなる。ここで、 \mathbf{B} は $\sigma\mathbf{B}(\sigma\mathbf{B})^\top = \mathbf{C}, \det(\mathbf{B}) = 1$ を満たすように正規化された行列である。 \mathbf{p}_σ は進化パスである*2。3~5 行目で、対称変量法を使って個体を生成する。ここで、 $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ は、

$$\mathbf{x} = \mathbf{m} + \sigma\mathbf{B}\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}, \sigma\mathbf{B}(\sigma\mathbf{B})^\top) \quad (2.3)$$

を満たす正規化個体である。6 行目で目的関数値に基づいて個体をソートし、7 行目で進化パスを更新する。ここで c_σ は学習率、 w_i^{rank} は順位に基づく重みである。8 行目で、個体生成分布の更新に用いる、順位と距離に基づく重み w_i^{dist} を計算し、9~15 行目で、探索状況に応じて個々のパラメータの学習率 $\eta_\sigma, \eta_{\mathbf{B}}$ を選択する。

*2 ただし、CMA-ES における進化パス [Hansen 01] と DX-NES における進化パスは、正規化個体 \mathbf{z} の取り方が異なる。

16, 17 行目では、個々のパラメータの自然勾配 \mathbf{G}_δ , G_σ , \mathbf{G}_B をモンテカルロ推定し、18~20 行目で、得られた自然勾配の推定量を用いてパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を更新している。21 行目で世代数を更新し、次の世代に移る。各パラメータの定義等の詳細については [福島 13] を参照されたい。

2.2.2 CMA-ES

CMA-ES は、DX-NES と同様に、正規分布にしたがって子個体を生成し、その目的関数に基づく順位を使って、分布のパラメータを更新してゆく進化戦略の一種である。パラメータは、平均ベクトル $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^n$ 、共分散行列 $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 、ステップサイズ $\sigma > 0$ からなり、世代ごとに、 λ 個の個体 \mathbf{x}_i を、

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{m} + \sigma \mathbf{y}_i, \quad (2.4)$$

$$\mathbf{y}_i \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{C}) \quad (2.5)$$

のように生成し、目的関数値に従ってソートすることで添字を付け直す。

以下では、次のように定義される \mathbf{y}_i の重み付き平均 $\langle \mathbf{y} \rangle$ および Variance Effective Selection Mass とよばれる μ_{eff} を用いて議論する。

$$\langle \mathbf{y} \rangle = \sum_{i=1}^{\mu} w_i \mathbf{y}_i, \quad (2.6)$$

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{\mu} w_i^2}. \quad (2.7)$$

ここで、 μ は親個体数とよばれるユーザパラメータ、 w_i は

$$w_1 \geq w_2 \geq \dots w_\mu > 0, \quad \sum_{i=1}^{\mu} w_i = 1 \quad (2.8)$$

を満たす重みである。このとき、 μ_{eff} は、 $1 \leq \mu_{\text{eff}} \leq \mu$ を満たし、 $w_i = 1/\mu$ のとき、 $\mu_{\text{eff}} = \mu$ である。

平均ベクトル \mathbf{m} は、

$$\mathbf{m} \leftarrow \mathbf{m} + \sigma \langle \mathbf{y} \rangle = \sum_{i=1}^{\mu} w_i \mathbf{x}_i, \quad (2.9)$$

のように更新する。

ステップサイズ σ は、

$$\mathbf{p}_\sigma \leftarrow (1 - c_\sigma) \mathbf{p}_\sigma + \sqrt{c_\sigma(2 - c_\sigma) \mu_{\text{eff}}} \mathbf{V} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{V} \langle \mathbf{y} \rangle, \quad (2.10)$$

$$\sigma \leftarrow \sigma \exp \left(\frac{c_\sigma}{d_\sigma} \left(\frac{\|\mathbf{p}_\sigma\|}{\epsilon} - 1 \right) \right) \quad (2.11)$$

のように更新する。ここで、 $1/c_\sigma > 1$ は学習率、 d_σ は減数係数とよばれるパラメータである。直交行列 \mathbf{V} および対角行列 \mathbf{D} は、固有値分解 $\mathbf{C} = \mathbf{V} \mathbf{D}^2 \mathbf{V}$ によって得られる行列である。 ϵ は χ 分布の期待値で、 $\epsilon = \sqrt{2} \Gamma((n+1)/2) / \Gamma(n/2) \simeq \sqrt{n} (1 - 1/(4n) + 1/(21n^2))$ の近似を用いる。

共分散行列 \mathbf{C} は、

$$\mathbf{p}_c \leftarrow (1 - c_c) \mathbf{p}_c + h_\sigma \sqrt{c_c(2 - c_c) \mu_{\text{eff}}} \langle \mathbf{y} \rangle, \quad (2.12)$$

$$\mathbf{C} \leftarrow (1 - c_{\text{cov}}) \mathbf{C} + \frac{c_{\text{cov}}}{\mu_{\text{cov}}} \mathbf{p}_c \mathbf{p}_c^T + c_{\text{cov}} \left(1 - \frac{1}{\mu_{\text{cov}}} \right) \sum_{i=1}^{\mu} w_i \mathbf{y}_i \mathbf{y}_i^T \quad (2.13)$$

によって更新する．ここで， $1/c_c > 1, c_{cov} \leq 1$ は学習率， $\mu_{cov} \geq 1$ は rank-one update (式 (2.13) 第 2 項) と rank- μ update (同第 3 項) の比率を決めるパラメータである． h_σ は， $\|\mathbf{p}_\sigma\| > (1.5 + 1/(n - 0.5))\epsilon\sqrt{1 - (1 - c_\sigma)^{2(g+1)}}$ のとき 0，それ以外の場合に 1 で， g は世代数である．

平均ベクトルの更新則および共分散行列の rank- μ update による更新則は，自然進化戦略のものと似ていることが [Akimoto 10] によって示されている．CMA-ES と DX-NES の主な違いは，ステップサイズ σ の更新則，共分散行列の rank-one update による更新則，個体に与える重み*3である．

2.2.3 REX/JGG

REX/JGG は，交叉 REX と，世代交代モデル JGG を組合せた実数値 GA である．実数値 GA の全体の流れは，次のようになる．

1. 与えられた初期化領域に N_{pop} 個の個体をランダムに生成し，初期集団とする．必要ならば，初期集団に含まれる個体の目的関数値を評価する．
2. 世代交代モデルの複製選択法にしたがって，集団から N_p 個の親個体を選択する．
3. 親個体集団に交叉を繰り返し適用し， N_c 個の子個体を生成する．
4. 子個体の目的関数値を評価する．
5. 世代交代モデルの生存選択法にしたがって，親個体集団と子個体集団の合併集合から， N_p 個の生存個体を選択肢，親個体と置き換えて次世代の集団とする．
6. 終了条件を満たしていなければ，ステップ 2 に戻る．

JGG の複製選択法は「ランダムに非復元抽出する」ことで，生存選択法は「子個体集団のうち，目的関数値に基づく上位個体 N_p を選択する」ことである．したがって，世代交代モデルとして JGG を採用する実数値 GA の流れは次のようになる．

1. 与えられた初期化領域に N_{pop} 個の個体をランダムに生成し，初期集団とする．
2. 集団からランダムに， N_p 個の親個体を非復元抽出する．
3. 親個体集団に交叉を繰り返し適用し， N_c 個の子個体を生成する．
4. 子個体の目的関数値を評価する．
5. 子個体集団を目的関数値に従ってソートし，上位 N_p 個体を親個体と置き換えて次世代の集団とする．
6. 終了条件を満たしていなければ，ステップ 2 に戻る．

交叉 REX では， N_p 個の親個体 $\mathbf{p}^i \in \mathbb{R}^n$ が与えられたとき，次のように子個体 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ を生成する．

$$\mathbf{x} = \mathbf{p}^g + \sum_{i=1}^{N_p} \zeta_i (\mathbf{p}^i - \mathbf{p}^g), \quad (2.14)$$

$$\mathbf{p}^g = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{p}^i. \quad (2.15)$$

ここで， ζ_i は平均 0，分散 σ^2 の任意の確率分布に従う乱数である． $\sigma^2 = 1/(N_p - 1)$ とすると，不偏分散の意味で統計量を保存することが知られる．不偏分散の意味で統計量を保存するとは，次を満たすことを意味

*3 2.2.1 節で示したように，DX-NES では，順位と距離に基づく重み w_i^{dist} を利用する．

する。

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}] = \mathbf{p}^g, \quad (2.16)$$

$$\text{Cov}[\mathbf{x}] = \frac{1}{N_p - 1} \sum_{i=1}^{N_p} (\mathbf{p}^i - \mathbf{p}^g)(\mathbf{p}^i - \mathbf{p}^g)^T. \quad (2.17)$$

親個体の不偏分散共分散行列 (式 (2.17) の右辺) のランクが最大で $\min(N_p - 1, n)$ となる^{*4}ことから, REX では $N_p \geq n + 1$ とすることが推奨されている. ζ_i が従う確率分布としては, 一様分布 $\mathcal{U}(-\sqrt{3/(N_p - 1)}, \sqrt{3/(N_p - 1)})$ や正規分布 $\mathcal{N}(0, 1/(N_p - 1))$ が用いられることが多い.

2.3 問題の定義

2.3.1 ノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化

本問題は, 次のように定義される.

$$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} : \bar{f}(\mathbf{x}), \\ & \bar{f}(\mathbf{x}) := \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}[f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi})] \end{aligned} \quad (2.18)$$

ここで, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ は決定変数, n は問題の次元数, $\boldsymbol{\xi}$ は不可制御な確率パラメータ, $\mathbb{E}[\cdot]$ は期待値である. 本論文では, $\boldsymbol{\xi}$ は観測ごとに独立同一分布に従うことを仮定する.

ここで, ノイズ

$$\nu(\boldsymbol{\xi}; \mathbf{x}) := f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) - \bar{f}(\mathbf{x}) \quad (2.19)$$

が \mathbf{x} に依存しない, すなわち $\nu(\boldsymbol{\xi}; \mathbf{x}) = \nu(\boldsymbol{\xi})$ であるとき, 加法的ノイズ環境であるという. 本論文では, 加法的ノイズに加え, 非加法的ノイズの代表例として, 決定変数の摂動を扱う. 加法的ノイズを有する問題と, 決定変数の摂動ノイズを有する問題は, それぞれ

$$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) = F(\mathbf{x}) + \nu(\boldsymbol{\xi}), \quad (2.20)$$

$$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) = F(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) \quad (2.21)$$

のようにかける.

2.3.2 非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化

本問題は, 次のように定義される.

$$\begin{aligned} & \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} : \tilde{f}(\mathbf{x}) := \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}[f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) \mid s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) = 1], \\ & \text{subject to} : r(\mathbf{x}) := \Pr(s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) = 1) \geq \alpha. \end{aligned} \quad (2.22)$$

ここで, $\mathbb{E}[\cdot \mid \cdot]$ は条件付き期待値, $\Pr(\cdot)$ は確率, $s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi})$ は実行可能性の指示関数, α は目標実行可能確率を表す. $s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi})$ は次のように表される.

$$s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) := \begin{cases} 1 & (\text{実行可能}), \\ 0 & (\text{実行不可能}), \end{cases} \quad (2.23)$$

^{*4} 親個体が n 次元空間に散らばっている場合, ランクは通常はこの最大値をとる. しかし, 親個体集団が 1 点に収束しているなどすると, ランクはこれより小さくなる場合がある.

なお、本問題が冠する「非明示」とは、実行可能性として $s(\mathbf{x}; \xi)$ のみが観測でき、制約関数値に基づいて制約境界との距離に関する情報を得ることができないことを意味する。

2.4 既存手法とその問題点

ノイズを有する関数の期待値最適化として、本論文では、前節で示したように、制約の有無による2つの問題を考えるが、いずれの問題もノイズを有する目的関数の期待値の最小化を目標としている点で共通している。したがって、まず無制約問題について論じた後、機会制約問題を扱う際の差分について述べる。

2.4.1 ノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化のための既存手法とその問題点

本問題は、ノイズを有する関数の最適化の中でも特によく扱われる手法である [Jin 05]。2.2 節で見たように、実数値進化計算は目的関数値に基づく順位を利用する手法が多い。そのため、ノイズによって揺らぐ目的関数値を使って、目的関数の期待値に基づく順位を正しく推定することが重要となる。

実数値進化計算を本問題に適用するための工夫としては、集団サイズを大きくとる方法 [Fitzpatrick 88, Arnold 00] や、同一個体の目的関数値を繰り返し観測する方法 [Aizawa 93, Pietro 04] がある。前者は、目的関数の観測値に基づく順位の良い子個体の分布を、目的関数の期待値に基づく順位の良い子個体の分布に近づけるための工夫である。後者は、目的関数の期待値を直接推定することで、順位を正しく見積もるための工夫である。しかし、これらの手法は、いずれも観測回数が膨大になるという問題がある。観測回数を抑えるための工夫として、過去に観測した点の情報を利用して、ローカルリグレーションによって景観を推定する方法 [Branke 01] がある。しかし、過去の観測を保存するために空間計算量が必要であり、また過去の観測を利用したローカルリグレーションには問題の次元数 n に対して $\mathcal{O}(n^6)$ 以上の時間計算量を必要とする、そのため、高次元の問題へ適用し、高精度な解を得ることは困難である。本問題に対する最も有力な手法の一つに Uncertainty Handling CMA-ES (UH-CMA-ES) [Hansen 09] が挙げられる。以下、本節では UH-CMA-ES について詳しく紹介した後、その問題点をまとめる。

UH-CMA-ES

UH-CMA-ES は、2.2.2 で紹介した CMA-ES を、Uncertainty-Handling (UH) によって拡張したものである。UH は、不確かさの定量化と、不確かさへの対処からなる。

不確かさの定量化では、CMA-ES が順位に基づく手法であることに着目し、ノイズによる順位の変動量を定量化するものである。集団中の一部の個体の目的関数値を再度観測し、順位の変化を見ることで順位の変動量を測定し、それがしきい値よりも大きいかどうかによって、相対的にノイズの影響が大きいかどうかを判定する指標 s を計算する。 s が正ならばしきい値に比べてノイズの影響が相対的に大きく、負ならば相対的に小さいことを意味する。

不確かさへの対処では、指標 s に基づいて、ノイズを低減するか、信号である目的関数値の差を大きくすることでノイズに対処する。ノイズの低減として、目的関数値をそのまま使う代わりに、同一個体の目的関数値を $[t_{\text{eval}}]$ 回繰り返し観測し、そのサンプル平均を評価値として用いる。 s の正負に基づいて、 t_{eval} を増減することで、性能とコストのバランスをとる。また、世代あたりのコストを抑えるために、 t_{eval} に上限を与える。 t_{eval} が上限に到達し、かつ s が正であるならば、個体生成分布の広がりを決めるステップサイズ σ を大きく

することで、信号の増幅を図る。

以下に、不確かさの定量化と不確かさへの対処の具体的なアルゴリズムを示す。

■不確かさの定量化 不確かさの定量化は、次のようなアルゴリズムである。

1. すべての子個体について目的関数値を $\lceil t_{\text{eval}} \rceil$ 回ずつ観測し、 $f_i^{\text{new}} = f_i^{\text{old}} = (1/\lceil t_{\text{eval}} \rceil) \sum_{t=1}^{\lceil t_{\text{eval}} \rceil} f(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\xi}_{i,t})$ とし、 $\mathcal{F} = \{f_i^{\text{new}}, f_i^{\text{old}} \mid i = 1, \dots, \lambda\}$ とする。
2. パラメータ $r_\lambda \leq 1$ を使って、再観測数 λ_{reev} を計算する； $\lambda_{\text{reev}} = f_{\text{pr}}(r_\lambda \lambda)$ 。ここで、 $f_{\text{pr}}(x)$ は、確率 $x - \lfloor x \rfloor$ で $\lfloor x \rfloor + 1$ 、確率 $1 - (x - \lfloor x \rfloor)$ で $\lfloor x \rfloor$ を返す。 $2/(r_\lambda \lambda)$ 世代連続で $\lambda_{\text{reev}} = 0$ の場合、強制的に $\lambda_{\text{reev}} = 1$ とする。
3. λ_{reev} 個の子個体をランダムに選び、次の手続きに従って再観測を行う（子個体同士が独立同一分布に従うことから、一般性を失わずに、 $i = 1, \dots, \lambda_{\text{reev}}$ について再観測を行うこととする）。
 - (a) 小さな摂動を与え、 $\mathbf{x}_i^{\text{new}} = \mathbf{x}_i + \varepsilon \sigma \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{C})$ とする。
 - (b) 再観測を行い、 $f_i^{\text{new}} = (1/\lceil t_{\text{eval}} \rceil) \sum_{t=1}^{\lceil t_{\text{eval}} \rceil} f(\mathbf{x}_i^{\text{new}}; \boldsymbol{\xi}_{i,t})$ のように置き換える。
4. 再観測を行った $i = 1, \dots, \lambda_{\text{reev}}$ について、順位変動 Δ_i を計算する：

$$\Delta_i = \text{rank}(f_i^{\text{new}}) - \text{rank}(f_i^{\text{old}}) - \text{sign}(\text{rank}(f_i^{\text{new}}) - \text{rank}(f_i^{\text{old}})).$$

ここで、 $\text{rank}(f_i)$ は、 \mathcal{F} における f_i の順位である。

5. 不確かさレベル s を計算する：

$$s = \frac{1}{\lambda_{\text{reev}}} \sum_{i=1}^{\lambda_{\text{reev}}} \left(2|\Delta_i| - \Delta_\theta^{\text{lim}} \left(\text{rank}(f_i^{\text{new}}) - \chi_{\text{rank}(f_i^{\text{new}}) > \text{rank}(f_i^{\text{old}})} \right) - \Delta_\theta^{\text{lim}} \left(\text{rank}(f_i^{\text{old}}) - \chi_{\text{rank}(f_i^{\text{old}}) > \text{rank}(f_i^{\text{new}})} \right) \right)$$

ここで、 $\Delta_\theta^{\text{lim}}(R)$ は集合 $\{|1 - R|, |2 - R|, \dots, |2\lambda - 1 - R|\}$ の 50θ パーセンタイルである。この集合^{*5}は、順位 R が与えられたとき、起こりうるすべての順位変動の絶対値を集めたものである。 $\chi_{\text{条件}}$ は、条件を満たすときに 1、満たさないときに 0 を返すものである。

6. 順位和 $\text{rank}(f_i^{\text{new}}) + \text{rank}(f_i^{\text{old}})$ を使って集団をソートする。同率ならば次に、 $|\Delta_i|$ によってソートする。ここで、再観測を行っていないものについては平均 $(1/\lambda_{\text{reev}}) \sum_{j=1}^{\lambda_{\text{reev}}} |\Delta_j|$ を用いる。それでも同率ならば、(平均した) 目的関数値を用いる。

パラメータは、 $r_\lambda = \max(0.1, 2/\lambda)$, $\varepsilon = 10^{-7}$, $\theta = 0.2$ を用いる。

■不確かさへの対処 毎世代、次の手続きに従って、個体あたりの観測回数 t_{eval} の増減または個体生成分布の拡大を行う。

$$\bar{s} \leftarrow (1 - c_s)\bar{s} + c_s s$$

if $\bar{s} > 0$ **then**

if $t_{\text{eval}} < t_{\text{max}}$ **then**

$$t_{\text{eval}} \leftarrow \min(\alpha_t t_{\text{eval}}, t_{\text{max}})$$

else

$$\sigma \leftarrow \alpha_\sigma \sigma$$

end if

*5 同じ要素を複数含む場合があるため、厳密には数学的な意味での集合ではない。

```

else
  if  $\bar{s} < 0$  then
     $t_{\text{eval}} \leftarrow \max(t_{\text{eval}}/\alpha_t, t_{\text{min}})$ 
  end if
end if

```

ここで, $t_{\text{eval}} = t_{\text{min}}, \bar{s} = 0$ で初期化し, $c_s = 1, \alpha_\sigma = 1 + 2/(n + 10), \alpha_t = 1.5, t_{\text{min}} = 1, t_{\text{max}} = 10$ を用いる*6.

UH-CMA-ES の問題点

UH-CMA-ES は, 個体あたりの観測数を, ノイズの影響の大きさに対応して適応することで, 精度と速度のバランスを図った手法である. しかし, 目的関数値の推定に自身の観測値しか使わないため, 周囲の点の情報を利用するローカルリグレーションなどを用いる手法に比べて非効率であると考えられる. ローカルリグレーション自体は計算量の問題があるため, ローカルリグレーションより少ない計算量で, 自身の観測値のみを用いる手法より効率よく目的関数の期待値を推定し, これを利用する進化計算手法が求められる.

2.4.2 非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化のための既存手法とその問題点

本問題に対する研究は限定的であるが, 既存手法として, Loughlin と Ranjithan の手法 (LR 法) [Loughlin 99] が存在する. LR 法は, 実数値 GA に機会制約への対処を施した手法である. 以下, 本節では, LR 法を詳しく紹介した後, その問題点を述べる.

LR 法

LR 法では, ある解 \mathbf{x} の目的関数値と実行可能性を E_s 回繰り返し観測し, 次の $\hat{f}_{\mathbf{x}}^{\text{single}}$ と $\hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{single}}$ によって目的関数の期待値と実行可能確率を推定する.

$$\hat{f}_{\mathbf{x}}^{\text{single}} := \begin{cases} \frac{\sum_{t=1}^{E_s} f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}_t) s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}_t)}{\sum_{t=1}^{E_s} s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}_t)} & \exists t, s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}_t) = 1, \\ M & \forall t, s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}_t) = 0, \end{cases} \quad (2.24)$$

$$\hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{single}} := \frac{\sum_{t=1}^{E_s} s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}_t)}{E_s}. \quad (2.25)$$

ここで, $\boldsymbol{\xi}_t$ は $\boldsymbol{\xi}$ の t 回目の実現値で, M は実行可能な観測が得られなかったときの代替定数である. $\hat{f}_{\mathbf{x}}^{\text{single}}$ と $\hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{single}}$ は最尤推定量であり, 観測数が十分大きければ良好な推定量となる.

機会制約への対処としては, 実行可能確率の推定量 $\hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{single}}$ を用いたペナルティ関数法を採用している. ペナルティ関数法は, 機会制約の違反量を目的関数値に組み込んだ,

$$F_{\mathbf{x}} := \hat{f}_{\mathbf{x}}^{\text{single}} + \begin{cases} 0 & \hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{single}} \geq \alpha, \\ \beta m(\alpha - \hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{single}}) & \hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{single}} < \alpha. \end{cases} \quad (2.26)$$

のような $F_{\mathbf{x}}$ によって個体の優劣を判定する方法である. ここで, 関数 $m(\cdot)$ には $x > 0$ に対して $m(x) > 0$

*6 本論文では, $t_{\text{max}} = \infty$ についても実験する.

であるような任意の単調増加関数を利用できるが、機会制約充足を重視するために β を十分大きくとる限り、 $m(\cdot)$ は探索性能には大きな影響を与えない。

JGG を使った実数値 GA を用いた LR 法の全体の流れは次のようになる。

1. 与えられた初期化領域に N_{pop} 個の個体をランダムに生成し、初期集団とする。
2. 集団から N_p 個の親個体を非復元抽出する。
3. 親個体集団に交叉を繰り返し適用し、 N_c 個の子個体を生成する。
4. 子個体の目的関数値と実行可能性を E_s 回ずつ繰り返し観測し、 $\hat{f}_x^{\text{single}}$ および $\hat{g}_x^{\text{single}}$ を求める。
5. 子個体集団を F_x に従ってソートし、上位 N_p 個体を親個体と置き換えて次世代の集団とする。
6. 終了条件を満たしていなければ、ステップ 2 に戻る。

LR 法の問題点

LR 法は、個体あたりの観測数 E_s を固定した、再観測に基づく手法である。そのため、高精度な解を得るために膨大な観測を必要とする。また、機会制約への対処としてペナルティ関数法を用いるので、 β , $m(\cdot)$ を問題に応じて適切に設定する必要がある。

2.5 本論文での接近法

2.5.1 ノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化への接近法

本論文では、第 3 章において、決定的な無制約ブラックボックス関数の最適化において最も有力な手法の 1 つである DX-NES を期待値最適化のために拡張した DX-NES-UE を提案する。DX-NES をベースとすることで、目的関数の期待値に基づく順位が正しく推定できたときの探索効率が、既存手法に比べて向上すると期待できる。DX-NES-UE では、目的関数の期待値を二次多項式で近似する。これは、問題の連続性を利用することから、同一個体の目的関数値を繰り返し観測する手法に比べて、観測数の観点で効率のよい推定が実現できると期待できる。また、観測を保存してローカルリグレーションを行う手法に比べて、空間・時間計算量を削減できると期待できる。

2.5.2 非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化への接近法

本論文では、第 4 章において、観測を保存して目的関数の期待値と実行可能確率を推定する実数値 GA である HDCGA を提案する。問題の連続性を利用することから、同一個体の目的関数値を繰り返し観測する LR 法に比べて、観測数の観点で効率のよい推定が実現できると期待できる。また、機会制約への対処としては、パラメータを必要としない選好順序を用いる。

第 5 章において、DX-NES-UE の二次多項式による景観近似を実行可能確率の推定にも利用し、HDCGA と同じ選好によるランキングを採用した手法である DX-NES-CC を提案する。DX-NES-CC は、観測を保存する HDCGA に比べて、空間・時間計算量を削減できると期待できる。

2.6 おわりに

本章では，決定的なブラックボックス関数最適化のための実数値進化計算を紹介した後，論文で取り扱う2つの問題の定義を述べ，既存手法とその問題点を示した．いずれの問題でも少ない観測数と計算量で目的関数値の期待値や実行可能確率を正しく推定することが求められる．これらの推定量を使って，無制約問題では目的関数の期待値に基づく順位を，機会制約問題では機会制約充足を考慮した順位を推定し，実数値進化計算によって解を探索する．最後に，本論文での接近法について述べ，既存手法に比べて少ない観測数と空間・時間計算量で目的関数値の期待値や実行可能確率を良好に近似することが期待できることを述べた．

第3章 ノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化のための自然進化戦略

(要約)

本章では、2.3.1節で示した問題のための手法として、2.2.1節で紹介したDX-NES [福島 13] を不確かな環境のために拡張した、DX-NES for Uncertain Environments (DX-NES-UE) を提案する。DX-NES-UE は、探索効率と精度のバランスを実現するため、現在探索中の領域における目的関数の変化量に対するノイズの相対的な大きさに基づいて探索状況を「低ノイズ期」と「高ノイズ期」に分類し、「低ノイズ期」では観測値を、「高ノイズ期」では十分精度がよくなるまで学習した2次多項式の値を用いて探索を行う。ベンチマーク問題を用いた数値実験により、DX-NES-UE が2.4.1節で紹介したUH-CMA-ES より少ない観測数で高精度な解を獲得できることを示す。ベンチマーク問題として、5つの目的関数と2つのノイズを組み合わせた10の問題を用いる。目的関数として、単峰性の Sphere 関数、多峰性の Rastrigin 関数、非 C^2 級の Hypercube 関数、悪スケールの Ellipsoid 関数、悪スケールで変数間依存性をもつ Rosenbrock 関数を扱う。ノイズとして、正規分布に従う加法的ノイズと、非加法的ノイズである決定変数への多変量正規分布に従う摂動を扱う。考察では、「低ノイズ期」において観測値を用いて個体生成分布を更新することにより、探索を高速化していることの示唆を得る。また、確率降下法を用いた近似関数のパラメータ推定により、計算量を削減していることを確かめる。本章で提案したDX-NES-UE は、そのままでは機会制約を扱うことができない。この問題の解決は、第5章で行う。

第4章 非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値問題のための実数値GA

4.1 はじめに

本章では、2.3.2節で定義した問題において、2.4.2節で紹介したLR法より少ない観測回数で高精度な解を獲得できる新たな実数値GA (History Distribution Controlling Genetic Algorithm; HDCGA) を提案する。HDCGAは観測した目的関数値と実行可能性を履歴として保存し、これを利用して目的関数の期待値と実行可能確率を推定する。探索領域における目的関数の期待値と実行可能確率を良好に推定するために、履歴中の個体が探索領域において一様に分布するような観測戦略を導入する。

以下、本章では、4.2節でHDCGAの基本的な考え方を述べたあと、4.3節~4.6節でHDCGAのコンポーネントについてそれぞれ詳細を示し、4.7節でアルゴリズムをまとめる。4.8節でベンチマーク問題を用いた数値実験を行い、4.9節で考察、4.10節でより実問題に近い倒立振子安定化問題への適用を行う。4.11節は本章のまとめである。

4.2 基本的な考え方

本章では、2.2.3で紹介したJGGを使った実数値GAを用いることを考える。交叉は、REXではなく、本章で新たに提案するHEXを用いる。ただし、親個体数はREXにおける推奨値の下限である $n+1$ であり、統計量の遺伝 [Kita 99] を考慮したものである。以下、本節では交叉によって生成された子個体の目的関数の期待値と実行可能確率を推定するための基本的な考え方について述べる。

4.2.1 目的関数の期待値と実行可能確率の推定

目的関数の期待値と実行可能確率が連続で、決定変数空間において近い複数の解は、目的関数の期待値と実行可能確率においても近い問題を仮定する [Boese 95, Branke 98, Sano 00, Branke 01]。この仮定のもと、過去に観測した近傍の個体の目的関数値と実行可能性を利用して、同一個体を繰り返し観測せずに推定精度を向上することを考える。そのために、過去に観測した個体とその目的関数値、実行可能性を観測履歴 H にすべて保存する。本章では、 H に含まれる個体を履歴個体とよぶ。図 4.1 に示すように、子個体からのマハラノビス距離がユーザパラメータ d^{\max} 以下である履歴個体を利用して、目的関数の期待値と実行可能確率を推定する。マハラノビス距離は、子個体を生成するために集団から選ばれた $n+1$ 個の親個体の不偏分散共分散行

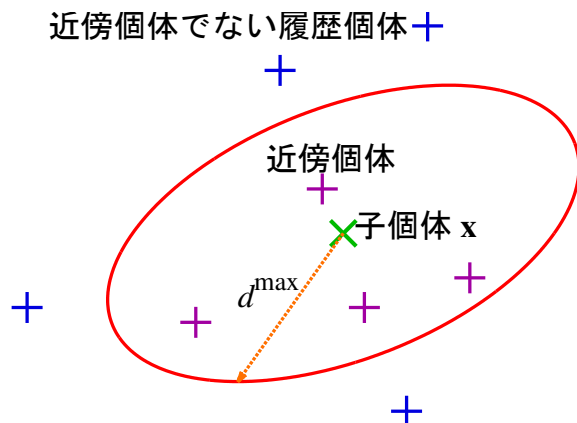


図 4.1 目的関数の期待値と実行可能確率の推定：十字の点は過去に観測した履歴個体，緑のバツは目的関数の期待値と実行可能確率を推定しようとしている子個体，楕円はこの子個体の近傍領域の境界である．紫色の十字は近傍領域に含まれる近傍個体であり，近傍領域外にある青の十字はこの子個体の目的関数の期待値と実行可能確率の推定には利用されない．

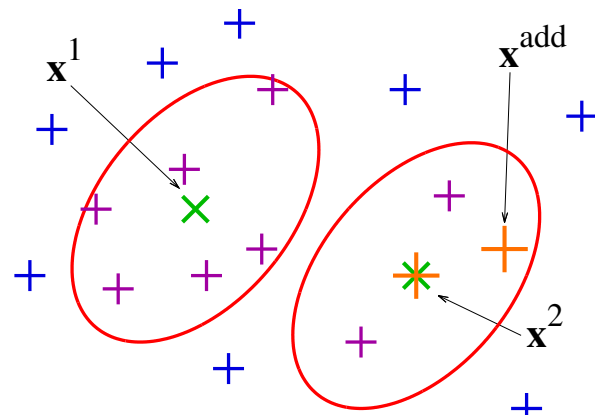


図 4.2 推定精度のバラツキの抑制：緑のバツ x^1 と x^2 が目的関数の期待値と実行可能確率を推定しようとしている子個体，紫の十字が，各子個体の近傍個体である．提案する観測戦略は， x^2 を観測し，追加個体 x^{add} を生成，観測する．この 2 つのオレンジの十字が新たに観測し，履歴に追加される個体である．

列である．本章では，個体 x からのマハラノビス距離が d^{max} 以下の履歴個体を x の近傍個体とよぶ．

4.2.2 推定精度のバラツキの抑制

$x^k (k = 1, \dots, N_c)$ を目的関数の期待値と実行可能確率を推定したい子個体とする．ここで， N_c はユーザパラメータである．もし x^i と x^j の近傍個体数が大きく異なると，推定精度が大きく異なり，近傍個体数の大きい個体の推定精度が無駄になると考えられる．そこで，図 4.2 のような観測戦略で近傍個体数のバラツキを抑制する．まず，近傍個体数の小さい個体を観測し，大きい個体は観測しない．次に，近傍個体数の小さい個体の周りに追加個体を生成し，その目的関数値と実行可能性を観測する．ここで，追加個体は目的関数の期待値と実行可能確率の推定にのみ利用され，生存選択には参加しない．

4.2.3 個体の生成法

子個体および追加個体は，一様かつ対象に分布していることが望ましいと考えられる．しかし，2.2.3 で紹介した交叉 REX では， ζ の分布をどのようにしても，子個体の分布は一様にはならない．そこで，新たに提案する図 4.3 のような交叉 HEX (Hyper-Ellipsoid Crossover) によって個体を生成することを考える．HEX は 2 つのシステムパラメータがあり，1 つは生成個体の重心で，もう 1 つは生成個体分布の広がりである．子個体を生成するときは，親個体分布の二次以下の統計量を遺伝するように設定する．追加個体を生成するときは，個体生成領域が近傍領域と一致するように設定する．すなわち，重心は近傍個体数を増やしたい子個体で，広がりの子個体と追加個体のマハラノビス距離の最大値が d^{max} となるように設定する．

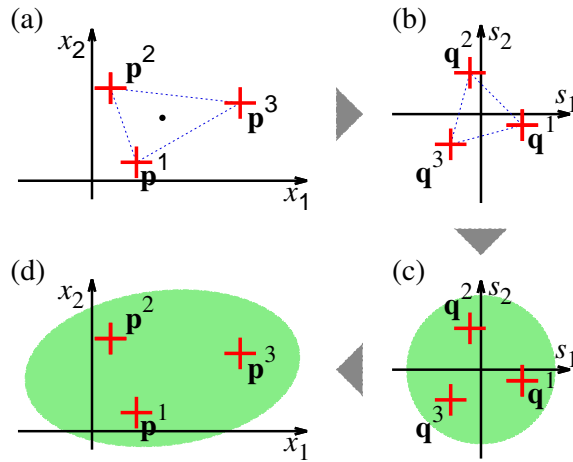


図 4.3 一様かつ対象な個体生成法：次元数 n が 2 のとき，交叉 HEX は次のように個体を生成する．(a) $n + 1 (= 3)$ 個の親個体 \mathbf{p}^i が与えられる．(b) \mathbf{p}^i を座標変換し，正規化ベクトル \mathbf{q}^i を得る．ここで， \mathbf{q}^i の重心は原点で，分散共分散行列は単位行列である．(c) 正規化空間において，超球(緑の円)の内部に一樣に分布する子個体を生成する．(d) 生成された個体を，もとの決定変数空間に座標変換する．

4.2.4 生存選択

生存選択では，機会制約充足を重視した選好順序を用いる．この選好順序では，目的関数の期待値と実行可能確率の推定量を用いて，次のように優劣を決定する．

- 機会制約を満たす個体は，満たさない個体より上位とする．
- 機会制約を満たす個体同士では，目的関数の期待値がよい方を上位とする．
- 期待制約を満たさない個体同士では，実行可能確率が大きい方を上位とする．

これは，LR 法の選好において，パラメータ β を無限大に近づけたときの極限*1と同値である．

以下では，目的関数の期待値と実行可能確率の推定法，近傍個体数のバラツキを抑制する観測戦略，交叉 HEX，生存選択のための選好順序について詳しく述べ，全体のアルゴリズムをまとめる．

*1 このとき，選好は $m(\cdot)$ に依存しなくなる．

4.3 目的関数の期待値と実行可能確率の推定法

次の $\hat{f}_{\mathbf{x}}^{\text{multi}}$, $\hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{multi}}$ によって目的関数の期待値と実行可能確率を推定する.

$$\hat{f}_{\mathbf{x}}^{\text{multi}} := \begin{cases} \frac{\sum_{\mathbf{y} \in H} w(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{C}) f_{\mathbf{y}} s_{\mathbf{y}}}{\sum_{\mathbf{y} \in H} w(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{C}) s_{\mathbf{y}}} & \exists \mathbf{y} \in H w(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{C}) s_{\mathbf{y}} > 0, \\ M & \forall \mathbf{y} \in H, w(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{C}) s_{\mathbf{y}} = 0, \end{cases} \quad (4.1)$$

$$\hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{multi}} := \frac{\sum_{\mathbf{y} \in H} w(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{C}) s_{\mathbf{y}}}{\sum_{\mathbf{y} \in H} w(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{C})} \quad (4.2)$$

$$w(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{C}) := \max(d^{\text{max}} - d(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{C}), 0). \quad (4.3)$$

ここで, H は観測履歴, \mathbf{C} は親個体の分散共分散行列, d^{max} は近傍領域の大きさを決めるユーザパラメータ, $f_{\mathbf{y}}$, $s_{\mathbf{y}}$ は履歴個体 \mathbf{y} の目的関数と実行可能性の観測値, $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{C})$ は \mathbf{x} と \mathbf{y} の間の \mathbf{C} に関するマハラノビス距離である. M は推定に利用できる情報が全くなかったときの値である. このとき, $\hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{multi}}$ は必ず 0 となり, 4.6 節の選好順序を使う限り, M の値は挙動に影響しない.

4.4 近傍個体数のバラツキを抑える観測戦略

本節では, 子個体同士の近傍個体数のバラツキを抑えるための観測戦略 (Variance-Reducing Strategy; VRS) を提案する. \mathbf{p}^i ($i = 1, \dots, n+1$) を親個体, \mathbf{x}^j ($j = 1, \dots, N_c$) を子個体, C を子個体の配列とする. 添字 j は C 中の並び順を意味する. ここで, C に含まれるすべての子個体の目的関数値と実行可能性はまだ観測されていないものとする. $N(\mathbf{x}^j) = \{\mathbf{y} \in H \mid d(\mathbf{x}^j, \mathbf{y}; \mathbf{C}) \leq d^{\text{max}}\}$ を $N(\mathbf{x}^j)$ の近傍個体集合, $|N(\mathbf{x}^j)|$ をそのサイズとする. ここで, $d(\mathbf{x}^j, \mathbf{y}; \mathbf{C})$ は \mathbf{p}^i の不偏分散共分散行列 \mathbf{C} に基づくマハラノビス距離である. VRS では, 次のような手続きで, 必要に応じて, 子個体の目的関数値と実行可能確率を観測し, 追加個体の生成と観測を行う. 観測した個体はすべて履歴 H に追加される.

1. C を $|N(\mathbf{x}^j)|$ について昇順にソート*2し, $|N(\mathbf{x}^j)|$ の中央値 k_m を求める.
2. $j = 1, 2, \dots, N_c$ について, $|N(\mathbf{x}^j)| < k_m$ ならば, \mathbf{x}^j の目的関数値と実行可能確率を推定し, 履歴 H に追加する.
3. $\min_{\mathbf{x}^j \in C} |N(\mathbf{x}^j)| < c_t k_m$ であるかぎり, 次の手続きを繰り返す. ここで,
 - (a) $|N(\mathbf{x}_m)|$ が最小となるような \mathbf{x}_m を C から選ぶ*3.
 - (b) 近傍領域 $\{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \mid d(\mathbf{y}, \mathbf{x}_m; \mathbf{C}) < d^{\text{max}}\}$ 内の一様分布に従う追加個体を 1 つ生成する.
 - (c) 生成した追加個体の目的関数値と実行可能確率を観測し, 履歴 H に追加する.

*2 同率ならば, 親個体集団の重心からの距離が遠い方を上位とする.

*3 同率ならば, C 中で最も前にあるものを選ぶ.

4.5 一様かつ対称に個体を生成する交叉 HEX

まず、交叉オペレータが用いる正規化空間を定義する。交叉を適用する $n+1$ 個の親個体 \mathbf{p}^i が集団から選ばれたとする。このとき、決定変数空間ベクトル \mathbf{x} と正規化空間ベクトル \mathbf{s} の変換は次のように与えられる。

$$\mathbf{x} = \mathbf{P}\mathbf{S}\mathbf{s} + \mathbf{p}^g, \quad (4.4)$$

$$\mathbf{s} = (\mathbf{P}\mathbf{S})^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{p}^g), \quad (4.5)$$

$$\mathbf{p}^g = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} \mathbf{p}^i, \quad (4.6)$$

$$\mathbf{P} = [\mathbf{p}^1 - \mathbf{p}^g, \mathbf{p}^2 - \mathbf{p}^g, \dots, \mathbf{p}^{n+1} - \mathbf{p}^g], \quad (4.7)$$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \frac{-1 + 1/\sqrt{n+1}}{n\sqrt{n}} \mathbf{J}_n + \frac{1}{\sqrt{n}} \mathbf{I}_n \\ -\frac{1}{\sqrt{n}\sqrt{n+1}} \mathbf{1}_n^T \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

ここで、 \mathbf{J}_n はすべての要素が 1 の n 次元正方行列、 $\mathbf{1}_n$ はすべての要素が 1 の n 次元縦ベクトルである。

対称かつ一様に個体を生成するため、中心 \mathbf{m} 半径 b の超球内に一様に分布する正規化個体 \mathbf{s} を次のように生成する。

$$\mathbf{s} = \mathbf{m} + \frac{bt^{1/n}\mathbf{z}}{\|\mathbf{z}\|}, \quad (4.9)$$

$$\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}_n, \mathbf{I}_n), \quad (4.10)$$

$$t \sim \mathcal{U}(0, 1). \quad (4.11)$$

その後、式 4.4 にしたがって決定変数空間に座標変換する。

HEX を子個体生成に用いるときは、パラメータを

$$\mathbf{m} = \mathbf{0}_n, \quad (4.12)$$

$$\mathbf{b} = \sqrt{n+2} \quad (4.13)$$

とする。このようにすると、親個体の統計量*4が遺伝される。

HEX を追加個体生成に用いるときは、パラメータを

$$\mathbf{m} = (\mathbf{P}\mathbf{S})^{-1}(\mathbf{x}_m - \mathbf{p}^g), \quad (4.14)$$

$$\mathbf{b} = d^{\max} \quad (4.15)$$

とする。

4.6 選好順序

次の $\mathbf{x}^i \succ \mathbf{x}^j$ を満たすとき、 \mathbf{x}^i を \mathbf{x}^j より優先して生存させる。

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^i \succ \mathbf{x}^j \text{ iff } & (\hat{r}_{\mathbf{x}^i}^{\text{multi}} \geq \alpha \wedge \hat{r}_{\mathbf{x}^j}^{\text{multi}} < \alpha) \vee \left(\hat{r}_{\mathbf{x}^i}^{\text{multi}} \geq \alpha \wedge \hat{r}_{\mathbf{x}^j}^{\text{multi}} \geq \alpha \wedge \hat{f}_{\mathbf{x}^i}^{\text{multi}} < \hat{f}_{\mathbf{x}^j}^{\text{multi}} \right) \\ & \vee \left(\hat{r}_{\mathbf{x}^i}^{\text{multi}} < \alpha \wedge \hat{r}_{\mathbf{x}^j}^{\text{multi}} < \alpha \wedge \hat{r}_{\mathbf{x}^i}^{\text{multi}} > \hat{r}_{\mathbf{x}^j}^{\text{multi}} \right). \end{aligned} \quad (4.16)$$

*4 分散共分散行列については、[Someya 08] に従い、親個体の不偏分散共分散行列と子個体分布の分散共分散行列が一致するようにする。

4.7 アルゴリズム

HDCGA のアルゴリズムは次のとおりである。

1. N_{pop} 個の個体からなる初期集団を，初期化領域内にランダムに生成する．ここで， N_{pop} はユーザパラメータである．
2. $n + 1$ 個の親を集団からランダムに選び，集団から取り除く．
3. 選ばれた親個体に交叉 HEX を適用し， N_c 個の子個体を生成し，それらを並べた配列を C とする．
4. VRS を実行し，観測と H への追加を行う．
5. C 中の各個体について， $\hat{f}_{\mathbf{x}}^{\text{multi}}$ と $\hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{multi}}$ を計算する．
6. 4.4.5 節の選好順序にしたがって C をソートし，上位 $n + 1$ 個体を集団に追加する．
7. 終了条件を満たしていれば終了し，そうでなければステップ 2 に戻る．

4.8 実験

提案手法 HDCGA の有効性を検証するため，既存手法 LR 法との性能比較実験を行う．以下，本節では，ベンチマーク問題，実験設定について述べ，結果を示す．

4.8.1 ベンチマーク問題

本章では，以下のように定義される超円錐状の境界を有する機会制約を用いる．

$$s(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} 1 & h(\mathbf{x}) \geq \xi_2, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (4.17)$$

$$h(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp\left(-a\|\mathbf{x} - \mathbf{v}\| \sin\left(\theta - \cos^{-1}\left(\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{v})^T \mathbf{d}}{\|\mathbf{x} - \mathbf{v}\|}\right)\right)\right)}, \quad (4.18)$$

$$\xi_2 \sim \mathcal{U}(0, 1). \quad (4.19)$$

ここで， $\mathbf{v} = [\ln(1/\alpha - 1)/\sin(\theta) + 10.24, 0, \dots, 0]^T$ ， $\mathbf{d} = [1, 0, \dots, 0]^T$ ， $\theta = \pi/6$ ， $a = 1$ である．目標実行可能確率は $\alpha = 0.7$ ，初期化領域は $[2.56, 12.8] \times [-5.12, 5.12]^{n-1}$ とする．

目的関数として，加法的ノイズを有する単峰性の Sphere 関数 f^{sph} と，加法的ノイズを有する多峰性の Rastrigin 関数 f^{mr} を用いる．

$$f^{\text{sph}}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) = \|\mathbf{x}\|^2 + \xi_1^{\text{sph}}, \quad \xi_1^{\text{sph}} \sim \mathcal{N}(0, 31.457282^2), \quad (4.20)$$

$$f^{\text{mr}}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^n (x_i^2 + 10(1 - \cos(2\pi x_i))) + \xi_1^{\text{rast}}, \quad \xi_1^{\text{rast}} \sim \mathcal{N}(0, 34.268908441412066^2). \quad (4.21)$$

いずれの問題でも最適解は $[10.24, 0, \dots, 0]$ であり，制約境界を構成する超円錐の頂点にあたる．ノイズの標準偏差は最適解における目的関数の期待値の 0.3 倍とした．図 4.4 に 1 次元 Sphere 問題の景観を示す．本節では，問題の次元数は $n = 2$ とする．

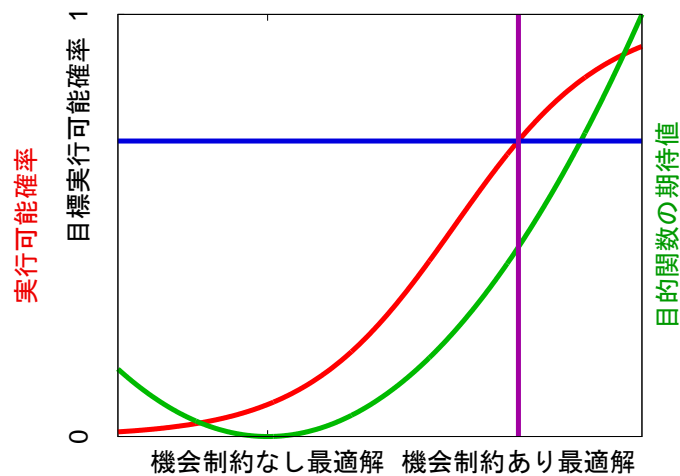


図 4.4 1次元 Sphere 問題：緑の線が目的関数の期待値，赤の線が実行可能確率を表す．グラフ中の大部分で目的関数値と実行可能確率のトレードオフが存在し，目的関数値がよくなるほど実行可能確率は小さくなっている．紫の線がそれより右側が機会制約を満たす領域で，紫の線が最適解となっている．

4.8.2 実験設定

生成子個体数は $N_c = 10(n + 1)$ ，集団サイズは $N_{\text{pop}} = 100(n + 1)$ ，終了条件は観測数が 10^6 に到達することとする．HDCGA 固有のユーザパラメータは $d^{\text{max}} = n/2$ ， $c_t = 0.5$ とする．LR 法では，個体あたりの観測数は $E_s = 10, 100$ とする．提案手法の選好順序は，LR 法の選好順序の β を無限大に近づけた時の極限と等価であることから，本節の実験では，LR 法でも提案手法と同じ選好順序を用いる．また，交叉としては HDCGA と同じ HEX を用いる．

4.8.3 結果

図 4.5～4.8 に，集団重心における目的関数の期待値と実行可能確率の推移を示す．横軸は観測数を対数スケールで，縦軸はそれぞれ目的関数値と実行可能確率を線形スケールでプロットしてある．赤の線が提案手法 HDCGA，緑と青の線が $E_s = 10, 100$ とした既存手法 LR 法の結果で，紫の線が最適解における値である．HDCGA は，LR 法に比べてはるかに少ない観測数で良好な解を獲得できていることがわかる．

4.9 考察

4.9.1 集団の挙動

図 4.5, 4.7 では，HDCGA の集団重心における目的関数の期待値は，最初是最適解における値より大きくなり，その後最適解における値に近づいてゆく挙動を示している．これは，初期化領域の重心が機会制約を満たさない領域であるため，最初に機会制約を満たすが，目的関数値は悪い領域に移動し，その後最適解に向かって集団が収束するためであると考えられる．このような挙動は，4.4.5 節の選好順序によって引き起こされると考えられる．

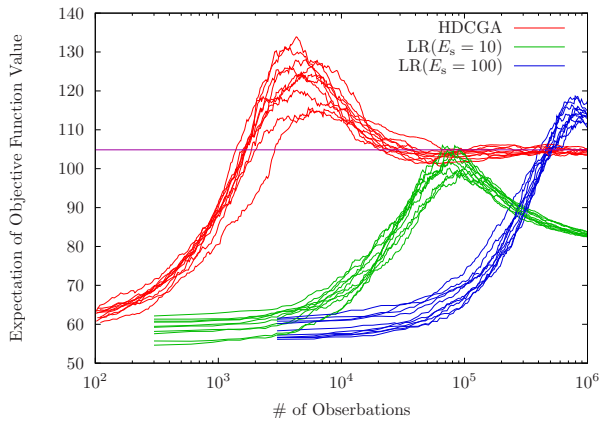


図 4.5 Sphere 問題における集団重心の $\tilde{f}(\mathbf{x})$ の推移, 各 10 試行.

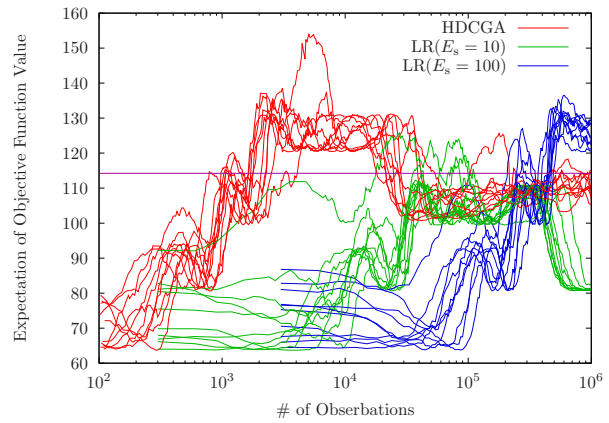


図 4.7 Rastrigin 問題における集団重心の $\tilde{f}(\mathbf{x})$ の推移, 各 10 試行.

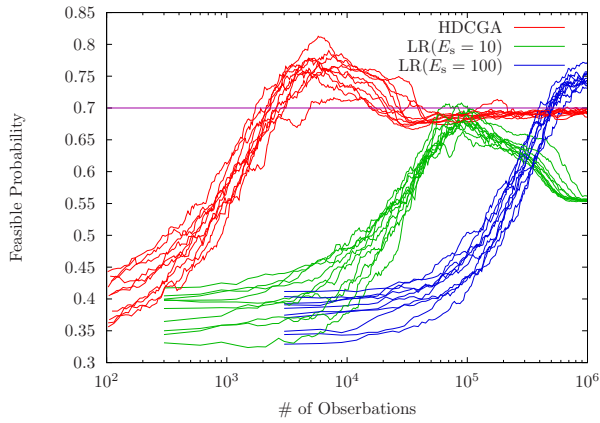


図 4.6 Sphere 問題における集団重心の $r(\mathbf{x})$ の推移, 各 10 試行.

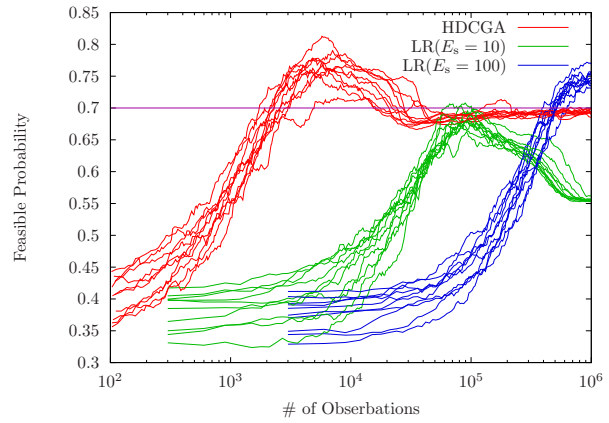


図 4.8 Rastrigin 問題における集団重心の $r(\mathbf{x})$ の推移, 各 10 試行.

LR 法の挙動も、上述と同様であるが、 $E_s = 10$ のときの収束先は機会制約を違反するものとなっていることがわかる。選好が同じため、集団の挙動は同様となるが、推定精度が悪いため、機会制約を大きく違反している個体も、観測の揺らぎによって機会制約を満たしているように見えてしまっているためであると考えられる。

4.9.2 VRS の効果

VRS の効果を検証するため、HDCGA と、HDCGA から VRS を取り除いた比較手法の挙動を比較する。比較手法では、VRS を実行する代わりに、子個体配列 C 中のすべての個体を 1 回ずつ観測し、履歴 H に加える。ベンチマーク問題は、実験に使用した 2 次元 Sphere 問題とする。

図 4.9 に集団の分散共分散行列の最大固有値の推移を示す。HCCGA では安定的に収束しているのに対して、提案手法では、観測数が 10^5 に到達すると収束は停滞し、最大固有値が大きく振動していることがわかる。このことから、VRS によって推定精度のバラツキを抑えることで、履歴密度が低く、真の期待値のもとでは選好されない領域に、集団が広がることを抑制していることが示唆される。

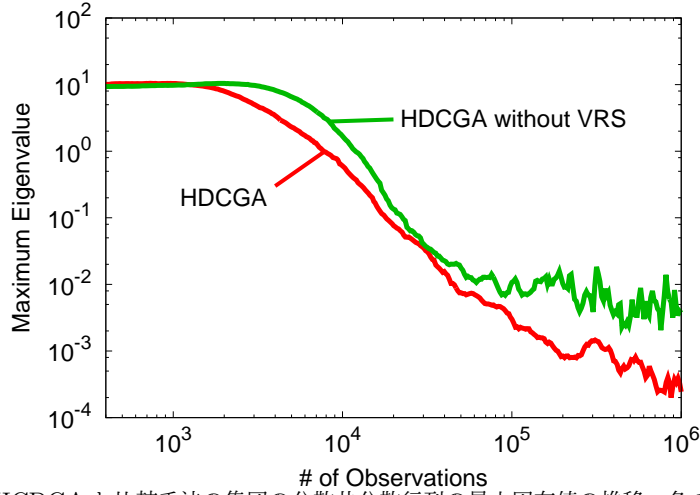


図 4.9 HDCGA と比較手法の集団の分散共分散行列の最大固有値の推移, 各 10 試行平均.

4.9.3 計算量

HDCGA は, 総観測数の増加とともに, 履歴 H のサイズが増加していくため, 大きな空間計算量を必要とする. 履歴の各要素は (個体, 目的関数の観測値, 実行可能性) の 3 つの要素を持つタプルであるから, 少なくとも $(n+1)$ 個の実数値と 1 つのブール値を保存するメモリが必要である. \hat{f}_x^{multi} と \hat{r}_x^{multi} による推定精度 $1/\sqrt{|H|}$ で制限されるため, 高精度な解を得るためには, 膨大な空間計算量が必要となる.

空間計算量としては, H から近傍個体を抽出するための距離計算が問題となる. マハラノビス距離を計算するために $O(n^3)$ の乗除算が必要であり, 毎世代, $|H|N_c$ 回の距離計算を行うことから, 高精度な解を得るための時間計算量は膨大である.

4.10 倒立振り子安定化問題における性能評価

本節では, 倒立振り子 [Franklin 10] の制御器であるニューラルネットワーク*5 [Rooij 96] を最適化する Direct Policy Search への HDCGA の適用を通じ, 実問題に近い問題における HDCGA の性能を評価する.

4.10.1 問題の定義

図 4.10 左に示すような倒立振り子系を考える. 質量 M の台車は水平方向に移動可能であり, その上部に質量 m , 長さ l の倒立振り子が乗っている. 状態変数として, 台車の位置座標 z , 振り子の角度 θ と, それらの一階時間微分を有する. これらを並べたベクトルを $\zeta = [z, \theta, \dot{z}, \dot{\theta}]^T$ とする. 制御対象である倒立振り子系は, 台車に与えられる外力 $u(t)$ を入力とし, 状態変数 $\zeta(t)$ を出力とする. ここで, 付録 B.1 に示すように, $\dot{\zeta}(t)$ に正規乱数 $\delta(t)$ をシステムノイズとして加えるものとする.

制御器は, 図 4.10 右上段に示すように, ζ を入力として受け取り, u を出力するニューラルネットワークで

*5 本節では, 単純パーセプトロンを用いる.

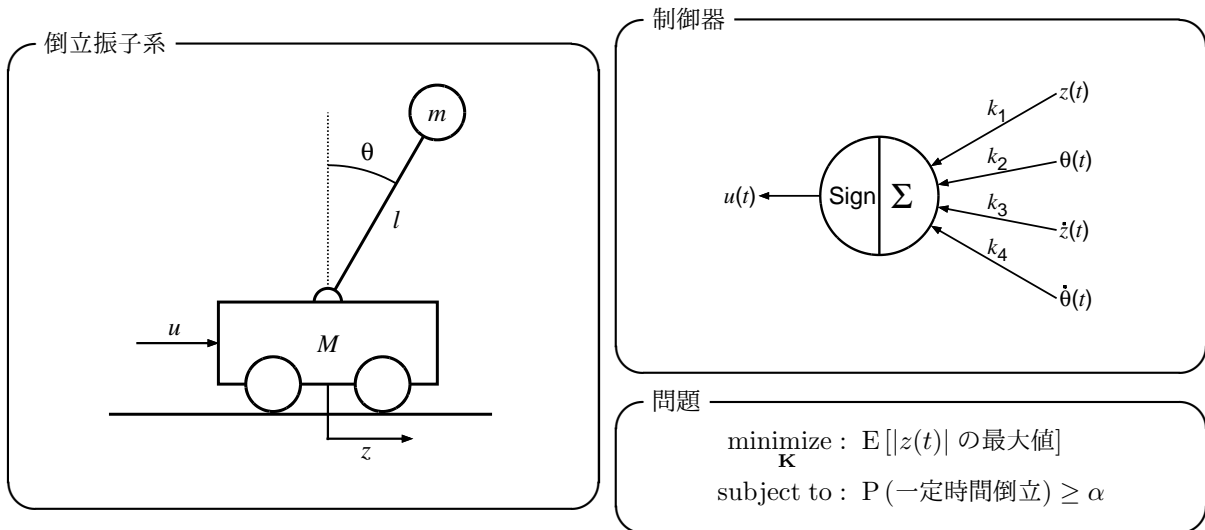


図 4.10 倒立振り子安定化問題

ある.

$$u(t) = -10 \operatorname{sign}(\mathbf{K}\zeta(t)), \quad (4.22)$$

$$\mathbf{K} = [k_1, k_2, k_3, k_4], \quad (4.23)$$

$$\zeta(t) = [z(t), \theta(t), \dot{z}(t), \dot{\theta}(t)]^T. \quad (4.24)$$

ここで, $\operatorname{sign}(\cdot)$ は符号関数である.

本節では, 振子を傾けた初期状態 $\zeta(0)$ から出発し, できるだけ小さい台車移動量で振子の倒立状態を維持できるようなニューラルネットワークの重み \mathbf{K} を見つけることを目的とする. ここで, 付録 B.1 に示すように, 初期状態 $\zeta(0)$ にも正規乱数 $\boldsymbol{\eta}$ をノイズとして加えていることに注意されたい. 一定時間倒立状態を維持 ($\max_t |\theta(t)| < \pi/2$) できれば実行可能とし, そのときの最大の台車移動量 ($\max_t |z(t)|$) を目的関数とする.

$$\begin{aligned} \underset{\mathbf{K}}{\text{minimize}} : & \quad E \left[\max_t |z(t; \boldsymbol{\delta}(t), \boldsymbol{\eta})| \right], \\ \text{subject to} : & \quad P \left(\max_t |\theta(t; \boldsymbol{\delta}(t), \boldsymbol{\eta})| < \pi/2 \right) \geq \alpha. \end{aligned} \quad (4.25)$$

目的関数と実行可能性の計算方法の詳細については付録 B.1 を参照されたい. また, 式 (4.25) では決定変数を \mathbf{K} としたが, 実際には座標変換により得られた変数を決定変数としている. 座標変換の詳細は付録 B.2 を参照されたい.

4.10.2 実験設定

実験では, 問題のパラメータは, $M = 2[\text{kg}]$, $m = 0.4[\text{kg}]$, $l = 0.5[\text{m}]$, $h = 0.01[\text{s}]$, $T = 4[\text{s}]$, $\theta_0 = 0.36[\text{rad}]$, $\sigma_i = 1[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}, \text{rad} \cdot \text{s}^{-1}, \text{m} \cdot \text{s}^{-2}, \text{rad} \cdot \text{s}^{-2}]$, $\alpha = 0.7$, 初期化領域は $\{\mathbf{v}_i\}$ が張る単体の内部 (付録 B.2 参照) とした.

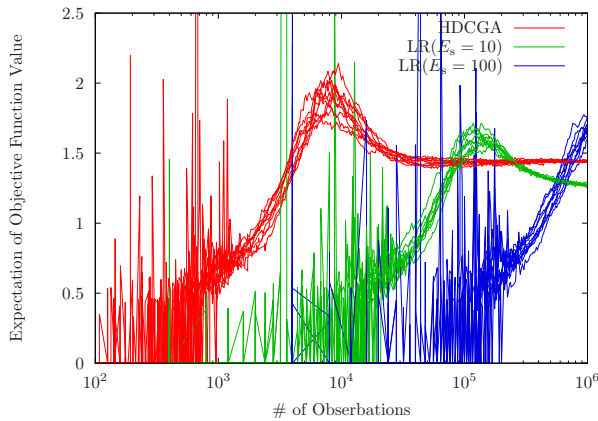


図 4.11 倒立振り安定化問題における集団重心の $\tilde{f}(\mathbf{x})$ の推移, 各 10 試行.

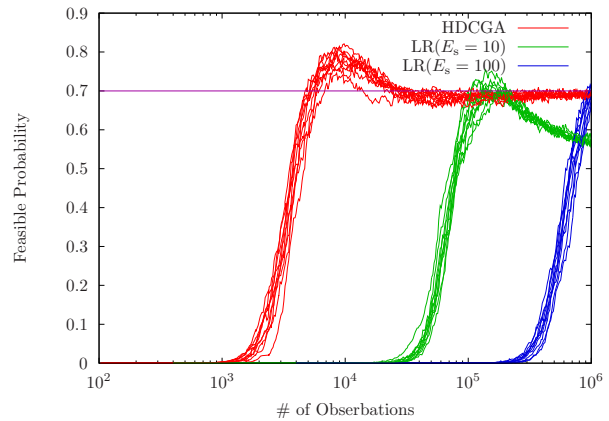


図 4.12 倒立振り安定化問題における集団重心の $r(\mathbf{x})$ の推移, 各 10 試行.

4.10.3 結果

図 4.11, 4.12 に, 集団重心における目的関数の期待値と実行可能確率の推移を示す. ただし, 真の目的関数の期待値と実行可能確率は計算出来ないため, 代わりに $E_s = 10^4$ とした $\hat{f}_{\mathbf{x}}^{\text{single}}$ と $\hat{r}_{\mathbf{x}}^{\text{single}}$ をプロットした. HDCGA は, LR 法よりも実行可能確率が目標実行可能確率に近い解を少ない観測数で獲得できていることがわかる. 観測数が少ないときは, $\hat{f}_{\mathbf{x}}^{\text{single}}$ の値が振動的になっているが, これは実行可能確率が低く, 1 回や 2 回といった非常に少ない実行可能な観測のサンプル平均値*6となっているためである.

4.11 おわりに

本章では, 非明示機会制約を有するブラックボックス関数最適化のための新たな実数値 GA である HDCGA を提案した. HDCGA は, 過去の観測をすべて履歴に保存し, 履歴中の近傍個体を利用して目的関数の期待値と実行可能確率を推定する. 履歴が, 探索領域において一様かつ対称に分布するような交叉と観測戦略を採用した. 機会制約への対処として, 機会制約充足を重視した選好順序を用いた. 実験により, ベンチマーク問題および倒立振り安定化問題において, HDCGA は, LR 法よりも少ない観測数でより最適解に近い解を獲得できることを確認した.

重要な今後の課題として, 4.9.3 節で指摘した計算量の削減が挙げられる. 次章では, この問題の解決を試みる.

*6 実行可能な観測が得られなかった場合は $M = 0$ がプロットされている.

第5章 非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化のための自然進化戦略

(要約)

本章では、前章に引き続き、2.3.2節で定義した非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化を扱う。前章では、実数値GAをベースとした手法であるHDCGAを提案し、既存手法であるLR法より少ない観測数で良好な解を獲得できることを実験的に確認した。しかし、観測履歴を利用することから、空間・時間計算量が膨大になるという問題点を指摘した。本章では、第3章で提案したDX-NES-UEが用いている二次多項式による景観近似を利用して、HDCGAより少ない空間・時間計算量、かつ、HDCGAと同程度の観測回数で良好な解を得られる手法として、DX-NES for Chance Constraints (DX-NES-CC)を提案することを目的とする。機会制約への対処として、HDCGAが採用する選好順序を用いる。実験により、DX-NES-CCはHDCGAに比べて時間計算量を大きく削減し、観測数で見た性能は同程度であることを確認する。空間計算量については、観測履歴の有無から、理論的に大幅に削減できることを示す。

第 6 章 結論

6.1 研究成果の取りまとめ

本論文では、ノイズを有するブラックボックス関数の期待値最適化を、制約の有無によって「ノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化」と「非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化」に分類した。それぞれの対象問題に対して、既存手法の問題点を克服し、観測数および計算量の観点から効率よく問題を解くことを目的として、新たな実数値進化計算手法を提案し、その性能評価を行った。

ノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化では、最も優れた自然進化戦略の一種である DX-NES を拡張した DX-NES-UE を提案し、既存手法 UH-CMA-ES に比べて、小さい観測数で高精度な解を得ることを可能にした。非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化では、まず、観測履歴を使って目的関数の期待値と実行可能確率を推定する実数値 GA である HDCGA を提案し、既存手法 LR 法に比べて、小さい観測数で高精度な解を得ることを可能にした。次に、DX-NES-UE を変形し、HDCGA の機会制約対処法を組み込んだ DX-NES-CC を提案し、HDCGA の、観測数で見た探索性能を維持しながら、空間・時間計算量を大幅に削減した。以下では、それぞれの手法の貢献について、順に詳しく述べる。

6.1.1 DX-NES-UE

ノイズを有する無制約ブラックボックス関数の期待値最適化を、観測数および計算量の観点から効率よく解くことを目的として、DX-NES を拡張した DX-NES-UE を提案した。DX-NES-UE は、目的関数の期待値の推定のため、二次多項式による目的関数景観の近似を行い、観測数と計算量の両観点で、高い効率を得た。計算量を削減するために、二次多項式のパラメータ推定に確率降下法を採用した。また、個体生成分布が存在する領域における目的関数の期待値の変化量と、ノイズの大きさの比に着目して、動作の変更を行うことで、相対的なノイズの大きさに対応した探索精度と探索速度のバランスを実現した。ベンチマーク問題を用いた数値実験を通じて、DX-NES および UH-CMA-ES よりも小さい観測数で高精度な解を得ることを確認した。ベンチマーク問題は、目的関数の期待値として、単峰性の Sphere 関数、多峰性の Rastrigin 関数、二次多項式による良好な近似ができない非 C^2 級関数である Hypercube 関数、悪スケール性の Ellipsoid 関数、悪スケールで曲がった稜構造を持つ Rosenbrock 関数を用いた。ノイズとして、目的関数値に加法的に加わる正規分布に従うノイズと、決定変数に加わる正規分布に従う摂動を扱った。UH-CMA-ES との比較では、良スケールな問題において、同じ精度の解を得るのに必要な観測数を $1/100$ とし、悪スケールな問題においては、さらに大きな差を見せた。考察では、二次多項式のパラメータ推定法およびノイズの相対的な大きさに基づく動作変更について、想定した挙動を示すことの実験的な確認、および理論的な妥当性の検討を行い、肯定的な結果を得た。また、ノイズの大きさ、問題の次元数、ノイズの分布形状などを変えた問題に対して DX-NES-UE を適用し、いずれの問題に対しても良好な性能を示すことを確認した。

6.1.2 HDCGA

非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化を、観測数の観点で効率よく解くことを目的として、実数値 GA に基づく HDCGA を提案した。HDCGA は、目的関数値と実行可能性の観測結果をすべて観測履歴として保存し、目的関数の期待値と実行可能確率の推定に利用する。目的関数の期待値と実行可能確率の推定量を使った辞書的な選好順序を用いて、機会制約充足を重視した子個体のランキングを行う。このランキングを、少ない観測数で精度よく行うため、観測履歴が、探索領域において一様かつ対称に分布するようにするための交叉および観測戦略を採用した。ベンチマーク問題を用いた数値実験を通じて、HDCGA が、既存手法 LR 法よりも少ない観測数で良好な解を得られることを確認した。ベンチマーク問題は、目的関数として、単峰性の Sphere 関数および多峰性の Rastrigin 関数に、正規分布に従う加法的ノイズを加えたものを用いた。実行可能確率として、円錐状の等高線を有する関数を用いた。機会制約境界は円錐状となり、その頂点に最適解が存在するような問題である。考察では、観測履歴を利用することから、空間計算量および時間計算量の両観点から、HDCGA が非効率であることを確認した。実問題に近い問題として、倒立振子の安定化問題を取り扱い、HDCGA を適用し、良好な性能を示すことを確認した。

6.1.3 DX-NES-CC

非明示機会制約を有するブラックボックス関数の期待値最適化において、HDCGA の抱える計算量の問題を克服することを目的として、DX-NES-UE を変形した DX-NES-CC を提案した。DX-NES-CC は、DX-NES-UE と同様に、二次多項式によって目的関数の期待値および実行可能確率を推定し、HDCGA が採用した選好順序によって、機会制約を考慮したランキングを実現する。理論的に空間計算量および時間計算量を削減できることを確認し、時間計算量の削減量について、ベンチマーク問題を用いた実験的な確認を行った。ベンチマーク問題は、目的関数として、単峰性の Sphere 関数および多峰性の Modified-Rastrigin 関数に、正規分布に従う加法的ノイズを加えたものを用い、実行可能確率として、円錐状の等高線を有する関数を用いた。また、実験では、観測数の観点からの性能を比較し、DX-NES-CC が HDCGA と同程度の性能を示すことを確認した。

6.2 今後の課題

(要約)

前節でまとめた本論文の研究成果に関して、残された課題として、DX-NES-UE の理論的な分析、DX-NES-CC の探索序盤の性能改善、分位数の最適化を扱うことなどが挙げられることを示す。

謝辞

本研究を行うにあたり，終始多大なるご指導をいただきました小野功准教授に心より感謝の意を表します．本論文に関して適切なお指摘，ご意見をいただきました樺島祥介教授，寺野隆雄教授，山村雅幸教授，渡邊澄夫教授に厚く御礼申し上げます．また，本研究を進める上で貴重なご助言をいただきました小林重信名誉教授，宮崎和光准教授，永田裕一准教授，および小野研究室の皆様へ深く感謝いたします．

公表論文

<学術論文>

1. Kazuyuki Masutomi, Yuichi Nagata, Isao Ono, “An Evolutionary Algorithm for Black-Box Chance-Constrained Function Optimization,” *Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics*, Vol.17, No.2, pp.272–282, Mar. 2013

<国際会議>

1. Kazuyuki Masutomi, Yuichi Nagata, Isao Ono, “Extending Distance-weighted Exponential Natural Evolution Strategy for Function Optimization in Uncertain Environments,” In *Proceedings of 2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2013)*, Cancun, Mexico, June 20–23, pp.2122–2129, 2013
2. Kazuyuki Masutomi, Yuichi Nagata, Isao Ono, “An Evolutionary Algorithm for Chance-Constrained Function Optimization with Implicit Constraints,” *International Symposium on Soft Computing sponsored by ASPIRE LEAGUE*, Kanagawa, Japan, November 8–9, 6 pages (in CD-ROM), 2012

<国内の学会>

1. 益富和之, 小野功, “非明示機会制約付きブラックボックス関数最適化のための自然進化戦略,” *電気学会システム/産業計測制御合同研究会*, pp.11–16, 茨城, Dec. 2013
2. 益富和之, 小野功, “期待値最適化のための実数値進化計算における単調増加変換に対する不変性に関する考察,” *電気学会 C 部門大会*, pp.562–567, 島根, Sep. 2014
3. 益富和之, 永田裕一, 小野功, “非ガウス性及び非加法的ノイズを有する関数最適化における DX-NES-UE の性能評価,” *進化計算シンポジウム 2013*, pp.106–111, 鹿児島, Dec. 2013
4. 益富和之, 永田裕一, 小野功, “DX-NES-UE における近似関数の精度指標に関する考察,” *第 5 回進化計算学会研究会*, pp.106–111, 北海道, Sep. 2013
5. 益富和之, 永田裕一, 小野功, “不確かな環境下での関数最適化のための進化アルゴリズムの提案,” *第 4 回進化計算学会研究会*, pp.131–141, 神奈川, Mar. 2013
6. 益富和之, 永田裕一, 小野功, “ブラックボックス機会制約関数最適化のための進化アルゴリズムの提案と性能評価,” *進化計算シンポジウム 2012*, pp.332–339, 長野, Dec. 2012

7. 益富和之, 永田裕一, 小林重信, 小野功, “制約関数が明示的に示されない機会制約を有する関数最適化のための進化アルゴリズムの提案,” 第2回進化計算学会研究会/第8回進化計算フロンティア研究会 合同研究会, pp.141-146, 大阪, Mar. 2012

参考文献

- [Aizawa 93] A.N. Aizawa and B.W. Wah: Dynamic Control of Genetic Algorithms in a Noisy Environment, *Proc. Conf. Genetic Algorithms*, pp.48–55 (1993).
- [Akimoto 10] Y. Akimoto, Y. Nagata, I. Ono, and S. Kobayashi: Bidirectional Relation Between CMA Evolution Strategies and Natural Evolution Strategies, *Proc. 11th Int'l Conf. Paral. Prob. Solv. Nat.*, pp. 154–163 (2010).
- [秋本 10] 秋本洋平, 永田裕一, 小野功, 小林重信: 実数値 GA における生存選択モデルとしての MGG と JGG の挙動解析, *人工知能学会論文誌*, 25(2), pp.281–289 (2010).
- [Akimoto 12] Y. Akimoto, A. Auger, N. Hansen: Linear Convergence Proof for Adaptive-ES Algorithm via Continuous Time Approximation, *進化計算シンポジウム 2012*, pp.213–220 (2012).
- [Amari 85] S. Amari: *Differential Geometrical Methods in Statistics*, Springer New York (1985).
- [Amari 98] S. Amari: Natural Gradient Works Efficiently in Learning, *Neural Comput.*, 10(2), pp.251–276 (1998).
- [天谷 08] 天谷賢治: *工学のための最適化手法入門*, 数理工学社 (2008).
- [The Apache Software Foundation] Apache Commons Math, <http://commons.apache.org/proper/commons-math/>.
- [Arnold 00] D.V. Arnold and H.-G. Beyer: Local Performance of the $(\mu/\mu_i, \lambda)$ -ES in a Noisy Environment, *Foundations on Genetic Algorithms*, pp.127–142, Morgan Kaufmann, (2000).
- [Beyer 02] H.-G. Beyer and H.-P. Schwefel: Evolution Strategies: A Comprehensive Introduction, *Natural Comput.*, 1(1), pp.3–52 (2002).
- [Beyer 03] H.-G. Beyer, M. Olhofer and B. Sendhoff: On the Behavior of $(\mu/\mu_I, \lambda)$ -ES Optimizing Functions Disturbed by Generalized Noise, *Foundations of Genetic Algorithms*, 7, pp.307–3028 (2003).
- [Beyer 06] H.-G. Beyer and B. Sendhoff: Functions with Noise-Induced Multimodality: A Test for Evolutionary Robust Optimization — Properties and Performance Analysis, *IEEE Trans. Evol. Comput.*, 10(5), pp.507–526 (2006).
- [Boese 95] K. Boese: Cost Versus Distance in the Traveling Salesman Problem, *Tech. Rep. TR-950018, UCLA CS Depart.* (1995).
- [Bottou 98] L. Bottou: Online Algorithms and Stochastic Approximations, *Online Learn. and Neural Networks*, Cambridge Univ. Press (1998).
- [Branke 98] J. Branke: Creating Robust Solutions by Means of an Evolutionary Algorithm, *Proc. Int'l Conf. Paral. Prob. Solv. Nat.*, pp.119–128 (1998).
- [Branke 01] J. Branke, C. Schomidt and H. Schmeck: Efficient Fitness Estimation in Noisy Environ-

- ments, *Proc. Genetic Evol. Comput. Conf.*, pp.243–250 (2001).
- [Busoniu 08] L. Busoniu, R. Babuska and B. De Schutter: A Comprehensive Survey of Multi-Agent Reinforcement Learning, *IEEE Trans. Sys., Man, Cyber.* 38(2), pp.156-172 (2008).
- [Charnes 60] A. Charnes and W.W. Cooper: Chance-constrained Programming, *Manag. Sci.*, 6(1), pp.73–79 (1960).
- [Charnes 63] A. Charnes and W.W. Cooper: Deterministic Equivalents for Optimizing and Satisficing under Chance Constraints, *Oper. Res.*, 11, pp.18–39 (1963).
- [Cooper 97] W.W. Cooper, H. Hemphill and D. Sullivan: Survey of Mathematical Programming Models in Air Pollution Management, *Euro. J. Oper. Res.*, 96 (1997).
- [Cramér 46] H. Cramér: *Mathematical Methods of Statistics*, Princeton Univ. Press (1946).
- [Davis 90] L. Davis: *The Handbook of Genetic Algorithms*, Van Nostrand Reinhold, New York (1990).
- [Deb 09] K. Deb, S. Gupta and Daum D.: Reliability-Based Optimization Using Evolutionary Algorithms, *IEEE Trans. Evol. Comput.*, 13(5), pp.1054–1074 (2009).
- [Fitzpatrick 88] J.M. Fitzpatrick and J.I. Grefenstette: Genetic Algorithms in Noisy Environments, *Mach. Learn.*, 3, pp.101–120, (1988).
- [Franklin 10] G.F. Franklin, J.D. Powell and A. Emami-Naeini: *Feedback Control of Dynamic Systems*, Pearson Prentice Hall, 6th ed. (2010).
- [Fukushima 11] N. Fukushima, Y. Nagata, S. Kobayashi and I. Ono: Proposal of Distance-weighted Exponential Natural Evolution Strategies, *Proc. IEEE Cong. Evol. Comput.*, pp.164–171 (2011).
- [福島 13] 福島信純, 永田裕一, 小野功: Distance-weighted Exponential Natural Evolution Strategy の提案と性能評価, *進化計算学会論文誌*, 4(2), pp.57–73 (2013).
- [Hansen 01] N. Hansen and A. Ostermeier: Completely Derandomized Self-adaptation in Evolution Strategies, *Evol. Comput.*, 9(2), pp.159–195 (2001).
- [Hansen 04] N. Hansen and S. Kern: Evaluating the CMA Evolution Strategy on Multimodal Test Functions, *PPSN VIII, LNCS 3242*, pp.282–291 (2004).
- [Hansen 09] N. Hansen, A.S.P. Niederberger, L. Guzzella and P. Koumoutsakos: A Method for Handling Uncertainty in Evolutionary Optimization With an Application to Feedback Control of Combustion, *IEEE Trans. on Evol. Comput.*, 13(1), pp.180–197, (2009).
- [Heidrich-Meisner 08] V. Heidrich-Meisner and C. Igel: Uncertainty Handling in Evolutionary Direct Policy Search, *NIPS-08 Workshop on Model Uncert. and Risk in RL* (2008).
- [樋口 01] 樋口隆英, 筒井茂義, 山村雅幸: 実数値 GA におけるシンプレクス交叉の提案, *人工知能学会論文誌*, 16(1), pp.147–155 (2001).
- [Jin 05] Y. Jin and J. Branke: Evolutionary Optimization in Uncertain Environments—A Survey, *IEEE Trans. on Evol. Comput.*, 9(3), pp.303–317, (2005).
- [Kiefer 52] J. Kiefer and J. Wolfowitz: Stochastic Estimation of the Maximum of a Regression Function, *The Annals of Math. Stat.*, 23(3), pp.462–466 (1952).
- [Kennedy 95] J. Kennedy and R.C. Eberhart: Particle Swarm Optimization, *Proc. 2005 IEEE Int. Joint Conf. on Neural Networks*, pp.1942–1948 (1995).
- [Kita 99] H. Kita and M. Yamamura: A Functional Specialization Hypothesis for Designing Genetic Algorithms, *Proc. IEEE SMC '99 Conf.*, pp.579–584 (1999).

- [小林 09] 小林重信 : 実数値 GA のフロンティア, *人工知能学会誌*, 24(1), pp.128–143 (2009).
- [Loughlin 99] D. H. Loughlin and S. Ranjithan: Chance-constrained Genetic Algorithms, *Proc. Genetic Evol. Comput. Conf.*, pp.369–376 (1999).
- [Ono 98] I. Ono, S. Kobayashi and K. Yoshida: Global and Multi-objective Optimization for Lens Design by Real-coded Genetic Algorithms, *SPIE Proc. Int'l Optical Design Conf.*, 3482, pp.110–121 (1998).
- [Pietro 04] A.D. Pietro, L. While and L. Barone: Applying Evolutionary Algorithms to Problems with Noisy, Time-consuming Fitness Functions, *Proc. IEEE Cong. Evol. Comput.* pp.1254–1261 (2004).
- [Pratihar 03] D.K. Pratihar: Evolutionary Robotics — A Review, *Sadhana*, 28(6), pp.999–1009 (2003).
- [Rooij 96] A.J.F. van Rooij, L.C. Jain and R.P. Johnson: Neural Network Training Using Genetic Algorithms, *World Scientific* (1996).
- [Someya 08] H. Someya: Theoretical Parameter Value for Appropriate Population Variance of the Distribution of Children in Real-coded GA, *Proc. IEEE Cong. Evol. Comput.*, pp.2722–2729 (2008).
- [Sano 00] Y. Sano and H. Kita: Optimization of Noisy Fitness Functions by Means of Genetic Algorithms using History of Search, *Proc. Int'l Conf. Paral. Prob. Solv. Nat.*, pp.571–580 (2000).
- [Storn 97] R. Storn and K. Price: Differential Evolution — A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization Over Continuous Spaces, *J. Global Optim.*, 11, pp.341–359 (1997).
- [Tsutsui 97] S. Tsutsui and A. Ghosh: Genetic Algorithms with a Robust Solution Searching Scheme, *Proc. Int. Conf. Evolvable Syst.*, 1(3) pp.201–208 (1997).
- [Tsutsui 99] S. Tsutsui, S. Yamamura and T. Higuchi: Multi-parent Recombination with Simplex Crossover in Real-coded Genetic Algorithms, *Proc. Genetic Evol. Comput. Conf.*, pp.657–664 (1999).
- [渡辺 01] 渡辺澄夫: データ学習アルゴリズム, 共立出版 (2001).
- [Wierstra 08] D. Wierstra, T. Schaul, J. Peters and J. Schmidhuber: Natural Evolution Strategies, *IEEE Cong. Evol. Comput.*, pp.3381–3387. (2008)
- [Wolfram] Mathematica, <http://www.wolfram.com/mathematica/index.ja.html>.

付録 A 摂動ノイズを有する問題の $\bar{f}^{\text{pert}}(\mathbf{x})$ とその最適解

(要約)

本章では、第 3 章で扱う等方的正規分布に従う摂動ノイズを有する問題の $\bar{f}^{\text{pert}}(\mathbf{x})$ とその最適解を記述する。

付録 B 倒立振り子安定化問題の実装

B.1 目的関数値と実行可能性の計算

本問題を計算機上で実現するために、まずシミュレーションによって $\zeta(t)$ の離散近似列を得る。具体的には、

$$\zeta(T) = \int_0^T [\mathbf{F}(\zeta(t), u(t)) + \delta(t)] dt, \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbf{F}(\zeta, u) = \begin{bmatrix} \dot{z} \\ \dot{\theta} \\ \frac{ml\dot{\theta}^2 \sin \theta - mg \sin \theta \cos \theta + u}{m \sin^2 \theta + M} \\ \frac{-ml\dot{\theta}^2 \sin \theta \cos \theta + (M + m)g \sin \theta + u \cos \theta}{ml \sin^2 \theta + Ml} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

$$\delta(t) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \sigma_3^2, \sigma_4^2)) \quad (\text{B.3})$$

を、初期条件

$$t = 0, \quad (\text{B.4})$$

$$\zeta(0) = [0, \theta_0, 0, 0]^T + h\boldsymbol{\eta}, \quad (\text{B.5})$$

$$\boldsymbol{\eta} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \sigma_3^2, \sigma_4^2)) \quad (\text{B.6})$$

のもとで、刻み幅 h 、3 次のルンゲクッタ法によって数値積分する。ここで、 $\text{diag}(\cdot)$ は引数を各対角要素とする対角行列である。数値積分の各ステップで得られた状態 ζ が関数 $\zeta(t)$ の離散近似列となる。この近似列に対して \max オペレータを適用することで、目的関数値と実行可能性を得られる。

B.2 最適化手法から見た探索空間

本問題は、制御器の性質上、重み \mathbf{K} とそのスカラー倍 $c\mathbf{K} (c > 0)$ は等価となるため、 $\sum_{i=1}^4 k_i = 1$ とした部分空間のみを探索できるように変換したベクトル \mathbf{x} を決定変数とすることができる*1。本節で以下に述べるように変換を定めることで、 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ によって、同値類を廃した重み空間 $\{\mathbf{K} \in \mathbb{R}^4 \mid \sum_{i=1}^4 k_i = 1\}$ 全体を探索できる。

*1 倒立振り子の安定化にはネガティブフィードバックが必要であるから、 $\sum_{i=1}^4 k_i \leq 0$ となる領域は無視しても良い。

重み \mathbf{K} と決定変数 \mathbf{x} の変換は次のように定める.

$$\mathbf{K}^T = \mathbf{G}\mathbf{x} + \mathbf{h}, \quad (\text{B.7})$$

$$n = 3, \quad (\text{B.8})$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} \left(\mathbf{I}_n - \frac{1 + \sqrt{1+n}}{n\sqrt{1+n}} \mathbf{J}_n \right) \\ \sqrt{\frac{2}{1+n}} \mathbf{1}_n^T \end{bmatrix}, \quad (\text{B.9})$$

$$\mathbf{h} = \begin{bmatrix} \frac{1 + \sqrt{1+n}}{n\sqrt{1+n}} \mathbf{1}_n \\ 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{1+n}} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.10})$$

このとき, \mathbf{x} が以下の \mathbf{v}_i を各頂点に持つ単体の内部にあることと, $k_i > 0 \forall i$ は同値となる.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{n+1}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{I}_n \\ \frac{1 + \sqrt{1+n}}{\sqrt{2}n} \mathbf{1}_n^T \end{bmatrix}. \quad (\text{B.11})$$

したがって, $\{\mathbf{v}_i\}$ を親, 拡張率を $\varepsilon = 1$ とした SPX [樋口 01] を用いることで, $\sum_{i=1}^4 k_i = 1$ かつ $k_i \geq 0 \forall i$ なる領域に一様に分布するように初期集団を生成することができる.