

関数最適化向き探索アルゴリズム集合フェロモンシステムについて

筒井茂義

阪南大学経営情報学部
tsutsui@hannan-u.ac.jp

1. はじめに

生物の行動をモデルとする情報処理方式の一つとして、フェロモンを介したアリの群行動にヒント得たACO (Ant Colony Optimization) は、多くの最適化に応用されている。これらには、巡回セールスマン問題 (TSP) [Dorigo 96, 97] の他、スケジューリング問題 [Forsyth 97]、配送計画問題 [Bullnheimer 99] などがある。しかし、これらACOが適用できる問題は、順序問題などの離散的問題である。

本稿では、昆虫などの集合フェロモン (Aggregation Pheromones) の機能をモデルとする関数最適化問題向きのモデルAPS (Aggregation Pheromone System) の基礎提案を行う。フェロモンは、昆虫などの生物が仲間と協調行動を行う際に、相互に情報交換する際に排出される化学物質である [Law 71]。ACOで使われているフェロモンのモデルは、アリの歩行経路排出されるフェロモン軌跡 (pheromone trail) である。フェロモンには、この他、仲間に餌の場所の通知、攻撃対象の通知、安全な場所の通知などに使われるものがある。これらは、集合フェロモン (Aggregate Pheromones) と呼ばれる [Lorenzo Figueiras 98]。

本稿で提案するAPS (Aggregate Pheromone System) は、この集合フェロモンの機能をモデルとしている。

2. ACOの概要

本稿で提案するAPSは、ACOから多くのヒントを得ているので、ここではACOの初期の代表的な論文である [Dorigo 96] をベースに、ACOの概要を述べる。ACOでは、「アリ」のフェロモン軌跡 (Pheromone Trail) をモデルとする。 [Dorigo 96] では、このアルゴリズムをAS (Ant System) と呼ばれ、TSPへの適用がなされている。アリが各都市を以下のような方法で訪問するものとする。TSPの規則に基づいて各都市を訪問する。このとき、(1) 各アリは、フェロモン軌跡の濃度に依存して確率的に経路を選択する、(2) 一度行った都市は訪問しないという、TSPの規則をまもる、(3) 全都市を終わった段階で、総経路長に基づいて各エッジ (i, j) にフェロモンが排出される。エッジ (i, j) の周期 t におけるフェロモン軌跡の濃度を $\tau_{ij}(t)$ で表す。ここで、全てのアリが各都市を訪問し終えたとき、一つのACOサイクルと数える。このとき、各エッジにおけるフェロモン軌跡濃度は、次式によって更新されると考える。

$$\tau_{ij}(t+1) = \rho \cdot \tau_{ij}(t) + \Delta \tau_{ij} \quad (1)$$

ここで、 ρ は「蒸発係数」である。 $\Delta \tau_{ij}$ は、エッジ (i, j) に新たに排出されるフェロモン軌跡濃度であり、 m 個のアリによるフェロモン総排出量 $\Delta \tau_{ij} = \sum_{k=1}^m \Delta \tau_{ij}^k$ である。 $\Delta \tau_{ij}^k$ は、 k 番目のアリにより放出されるフェロモン濃度である、ツアー長が短いほど大きくなるようにするために、ツアー長の逆数に比例する設定される。

つぎに、 $1/d_{ij}$ で定義される都市間の可視度 (Visibility) η_{ij} も使われる (d_{ij} はエッジ (i, j) の距離) k 番目のアリが、都市 i から都市 j に移動する確率 $p_{ij}^k(t)$ を以下のように定義する。

$$p_{ij}^k(t) = \frac{[\tau_{ij}(t)]^\alpha \cdot [\eta_{ij}]^\beta}{\sum_{j \in \text{allowed}_k} [\tau_{ij}(t)]^\alpha \cdot [\eta_{ij}]^\beta} \quad \text{if } j \in \text{allowed}_k, \quad 0: \text{otherwise} \quad (2)$$

ただし、 allowed_k は、 k 番目のアリが訪問できる都市(まだ訪問していない都市)のリストであり、 α と β は制御パラメータである。このとき、AS は以下のように実行される。 $t=0$ のときには、各エッジのフェロモン軌跡濃度 $\tau_{ij}(0)$ は、全て等しい定数値 C と設定される。各アリは、式2に基づいて、各都市を巡回する。すべてのアリが巡回を終了したとき、式1に基づいて、フェロモンが更新される。以下、 $t \leftarrow t+1$ として、このプロセスを条件が満たされるまで繰り返される。

3. 集合フェロモンシステムAPS

本章では、本稿で提案する実数値探索向き集合フェロモンシステムAPS (Aggregation Pheromone System) について述べる。集合フェロモンの働きについては、多くの昆虫などで観察されている。例えば、スズメバチなどが餌の在りかを仲間に伝える行動や配偶相手を誘うための行動 [Bell 84]、ゴキブリが安全な隠れ場所の在りかを仲間に伝え、仲間を呼び寄せる行動 [Sakuma 93] などが良く知られている。これらの行動は、いずれも集合フェロモン (Aggregation

Pheromones)が介在している。空中に分泌された集合フェロモンは、周囲の仲間に検出され、仲間を呼び寄せる働きをする。本稿で提案する集合フェロモンシステムAPSでは、集合フェロモンのこの働きを開数最適化問題を解くためのモデルとする。

3.1 集合フェロモン濃度の更新

ACOでは、エッジのフェロモン軌跡濃度を用いたが、APSでは、 n 次元空間の探索空間 Ω に放出された集合フェロモンの濃度を考える。ACOサイクルと同様、集合フェロモンシステムにおける各繰り返しサイクルを、APSサイクルと呼ぶ。各サイクルでは、 M 個の個体が集合フェロモン濃度に基づいて、探索空間の点(場所)に吸引される。

サイクル i における集合フェロモン濃度関数を $r^i(X)$ で表す。このとき、各個体は、 $r^i(X)$ 分布に基づいて各場所に確率的に吸引されると考える。初期サイクル($i=0$)では、集合フェロモンは探索空間に一樣に分布しているとする。すなわち、 $r^0(X)=c$ とする。ここで、 c は定数であり、またフェロモンの総量は定数値 C であるとする。つぎに、集合フェロモン濃度関数 $r^i(X)$ をもとに確率的に探索空間 Ω の各点に吸引される場合に用いる集合フェロモン確率密度関数 $p_r^i(X)$ を以下のように定義する。

$$p_r^i(X) = r^i(X) / \int_{\Omega} r^i(X) dX \quad (3)$$

各個体が放出する集合フェロモンについて考える。探索空間 Ω の点 x に吸引された個体は、 Ω で定義された関数 $f(x)$ に基づいて、集合フェロモンを放出する。すなわち、 $f(x)$ が良い値をもつ場所にいる個体は多くのフェロモンを放出し、 $f(x)$ が悪い値をもつ場所にいる個体は少ないフェロモンを放出する。APSでは、各個体が放出するフェロモン量は、各サイクルにおける M 個の個体のランク r ($r=1, 2, \dots, M$)に基づいて決まるものとする。

サイクル i において、ランク値 r を持つ個体の位置を $x_{i,r}$ で表すと、この個体は、濃度関数 $\Delta r_{x_{i,r}}^i(X)$ で与えられるフェロモンを $x_{i,r}$ の周辺に放出する。したがって、サイクル i において放出される総フェロモンの濃度分布関数は、 M 個の個体が放出するフェロモンの合計として、次式で与えられる。

$$\Delta r^i(X) = \sum_{r=1}^M \Delta r_{x_{i,r}}^i(X) \quad (4)$$

ここで、 M 個の個体により放出される総フェロモン量は各サイクルで常に一定値 C であると仮定する。すなわち、 $\int_{\Omega} \Delta r^i(X) dX = C$ とする。3.3節で述べるサンプリング法は、この仮定を前提にしている。 M 個の個体が集合フェロモンに吸引されてそれぞれの場所が決まったとき、システムにおけるフェロモン濃度関数は、ACOにおける式1と同様、以下のように更新されるものとする。

$$r^{i+1}(X) = \rho \cdot r^i(X) + \Delta r^i(X) \quad (5)$$

ここで、 ρ は式1と同様、蒸発係数である。フェロモン濃度が更新された後、各個体はリセットされ、つぎのサイクルへと進み、APSサイクルが繰り返される。

3.2 各個体が放出するフェロモンの濃度関数

3.1節で述べたように、各個体は、各サイクルにおけるランク r に基づいて $\Delta r_{x_{i,r}}^i(X)$ で与えられるフェロモンを放出する。本節では、 $\Delta r_{x_{i,r}}^i(X)$ を定義する。まず、(1) $\Delta r_{x_{i,r}}^i(X)$ は、ランク r の個体の位置 $x_{i,r}$ の周辺に放出し、位置 $x_{i,r}$ での濃度が最も高い、また、(2) 高いランク値を持つ個体は、低いランク値をもつ個体よりも多くのフェロモンを放出する、と考えるのは自然である。さらに、以下のような協調行動、すなわち、(3) $\Delta r_{x_{i,r}}^i(X)$ は、サイクル i において個体が分布する「方向」に影響を受けた形状にフェロモンを放出する、ものと仮定する。

本研究では、これらの条件を満たすものとして、式3の $\Delta r_{x_{i,r}}^i(X)$ を以下のように決める。

$$\Delta r_{x_{i,r}}^i(X) = K \times (r)^\alpha \times N(x_{i,r}, \beta^2 \Sigma_i) \quad (6)$$

ここで、 α (>0) は、ランク値の違いを調節するパラメータである。 Σ_i は、個体の分布状況を示す共分散行列である。 β ($\beta > 0$) は、フェロモンの放出の広がり具合を調節するパラメータである。また、 $N(x_{i,r}, \beta^2 \Sigma_i)$ は、多変量正規分布である。各サイクルにおいて放出されるフェロモンの総量は、 C と仮定しているため、式6における K は、 $K = C / \sum_{r=1}^M (r)^\alpha$ である。式3, 6から、サイクル i におけるフェロモン放出 $\Delta r^i(X)$ は、以下のように得られる。

$$\Delta r^i(X) = C \sum_{r=1}^M \frac{(r)^\alpha}{\sum_{j=1}^M (j)^\alpha} N(x_{i,r}, \beta^2 \Sigma_i) \quad (7)$$

3.3 サンプリング法

本節では、サイクル $t+1$ において、式5で得られる集合フェロモン濃度関数 $\tau^{t+1}(X)$ から、各個体が吸引される方法、すなわち、サンプリング法について述べる。3.2節で述べたように、各個体は、フェロモン濃度 $\tau^{t+1}(X)$ に比例して確率的に各場所に吸引される。フェロモン濃度関数 $\tau^{t+1}(X)$ から式3を用いて確率密度関数 $p_r^{t+1}(X)$ を得る。まず、式5の $\tau^{t+1}(X)$ は、以下のように変形できる。

$$\tau^{t+1}(X) = (\rho)^{t+1} \tau^0(X) + \sum_{h=0}^t (\rho)^h \Delta \tau^{t-h}(X) \quad (8)$$

したがって、 $p_r^{t+1}(X)$ は

$$p_r^{t+1}(X) = \frac{(\rho)^{t+1}}{\sum_{r=0}^{t+1} (\rho)^r} \times \frac{\tau^0(X)}{C} + \sum_{h=0}^t \frac{(\rho)^h}{\sum_{r=0}^{t+1} (\rho)^r} \times \frac{\Delta \tau^{t-h}(X)}{C} \quad (9)$$

として得られる。一般に、ある確率密度関数 (PDF) $f(x)$ がサブ確率密度関数 $f_k(x)$ の和として $f(x) = p_1 f_1(x) + p_2 f_2(x) + \dots + p_k f_k(x)$ と分解できるとき、 $f(x)$ のサンプリングは、まず、確率 (p_1, p_2, \dots, p_k) で $f_k(x)$ を選び、つぎに、 $f_k(x)$ をサンプリングすることで行える。ここで、(p_1, p_2, \dots, p_k) は確率分布である。これを使うと、式9のサンプリングは容易に行うことができる。なお、このサンプリングにおいて、多変量正規分布のサンプリングが必要となるが、これには、Cholesky 分解 [Schatzman 02] を用いる。

各サイクルでは、 M 個の個体をサンプリングするのに、式9が用いられるが、個体間の衝突や風などの環境から発生する「外乱」(perturbation)を導入する。外乱は進化的計算における当然変異と同様な役割を果たす。外乱の適用率を P_{rate} で表す。ここでは、エリート戦略を導入している。各サイクルにおいて、ベスト $e (e = m \times E_{rate})$ 個の個体は、次のサイクルに残される。

4. 実験

4.1 実験方法

本節では、テスト関数として、Ellipsoidal 関数 ($F_{Ellipsoidal}$) [Deb 02], Ridge 関数 (F_{Ridge}), Rosenbrock 関数 ($F_{Rosenbrock}$), および Rastrigin 関数 ($F_{Rastrigin}$) の4つの関数を用いる。 F_{Ridge} は変数間に弱い依存関係を有し、また、 $F_{Rosenbrock}$ には変数間にきわめて強い依存関係を有する。 $F_{Ellipsoidal}$ および $F_{Rastrigin}$ は、変数間の依存関係を有しない。 $F_{Rosenbrock}$, $F_{Ellipsoidal}$ および F_{Ridge} は単峰性関数であり、 $F_{Rastrigin}$ は多峰性関数である。いずれも最小化問題である。これらの関数の定義域は、サンプリングバイアスの影響を避けるために定義域をオリジナルなものから以下のように変更している。変数の次元はいずれも20とした ($n=20$)。APSのデフォルトパラメータ値は以下の通りである：個体数 $M=100$, $\rho=0.92$, $\alpha=4$, $\beta=0.6$, $E_{rate}=0.1$, $H=200$, $P_{rate}=0.0005$ とし、小さな外乱 $N(0.0, 1.0)$ を用いる。実験は20回行い、最適解が得られる回数#OPT, 最適解を得るのに要した関数評価回数の平均 MNE で評価する。最適解が得られたという判定は、最適解の ± 0.0001 の近傍の解が得られたときとする。 $F_{Rastrigin}$ 関数を除いて、最大関数評価回数は500,000とした。 $F_{Rastrigin}$ 関数の最大評価回数は2,000,000とした。

4.2 結果

(1) デフォルトパラメータを用いたときの結果

4.1節で述べたデフォルトパラメータ値を用いた結果を表1に示す。同表には、実数値GAの代表的なオペレータであるSPX[Higuchi 00]の結果も比較として示した。この結果から、 $F_{Ellipsoidal}$ および F_{Ridge} においてAPSは、SPXよりも優れた結果を示している。 $F_{Rosenbrock}$ では、MNEはSPXよりも1/2以下となっている。多峰性関数の $F_{Rastrigin}$ では、APSは、SPXよりも悪い結果を示した。 $F_{Rosenbrock}$ のAPSとSPXとの収束状況の比較を図2に示す。

(2) パラメータに対する感度解析

ここでは、各パラメータの性能に対する影響を見るために、デフォルト値からパラメータ値をふらした場合の性能の変化を見る。まず、蒸発係数 ρ をデフォルト値0.92の周辺区間[0.8, 0.98]において

表1 APSの結果

Function	$F_{Ellipsoidal}$	F_{Ridge}	$F_{Rosenbrock}$	$F_{Rastrigin}$
#OPT	20	20	20	20
APS	MFE 80300.0	101660.0	121760.0	430330.0
STD	1469.7	1765.4	8882.3	97381.6
SPX	#OPT 20	20	20	20
MFE	138900.0	179078.3	265766.3	322198.5
STD	1362.2	2337.1	27152.5	34857.8

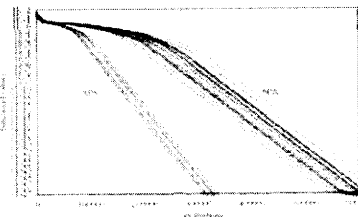


図1 $F_{Rosenbrock}$ における収束状況

0.02間隔で変更した場合の結果を図3に示す。 $F_{\text{Ellipsoidal}}$ および F_{Ridge} では、 ρ が [0.84, 0.86] の範囲で #OPT = 20 を保ちながら、MNEが最も小さくなる。これに対して、変数間に強い依存性を有する $F_{\text{Rosenbrock}}$ では、デフォルト値である $\rho=0.92$ のときに、最も小さいMNEとなっている。この ρ の値は、 $F_{\text{Ellipsoidal}}$ および F_{Ridge} に対する最適な ρ の値よりも大きいことが分かる。パラメータに依存性を有しない $F_{\text{Rastrigin}}$ ではやはり、 ρ の値は0.92よりも小さい [0.8, 0.86] の値で #OPT = 20 を保ちながらMNEが最小となっている。

つぎに、ランク制御係数 α の値の影響を見るために、 α の値を区間 [2, 8] で変化させた場合の結果を図4に示す。ここでは、関数 $F_{\text{Ellipsoidal}}$ および $F_{\text{Rosenbrock}}$ を用いた。 $F_{\text{Ellipsoidal}}$ での結果から分かるように α の値が大きくなるに従って、MNEは小さくなり、探索効率が上がっている。しかしながら、 $F_{\text{Rosenbrock}}$ での結果から分かるように、変数間の依存関係が強い場合には、大きな α は、逆効果となっている。

5. むすび

以上本稿では、集合フェロモンの働きをモデルとする関数最適化アルゴリズムとして、集合フェロモンシステムAPS(Aggregation Pheromone System)を提案し、テスト関数を用いて評価を行った。実験の結果、APSは、関数最適化アルゴリズムとして、好ましい探索性能を有することが明らかになった。本研究に関してはAPSサイクルモデルの改良など多くの課題が残されている。

参考文献

- [Bell 84] Bell, W. J.: Chemo-orientation in Walking Insects, *Chemical Ecology of Insects*, Bell, W. J. and Carde, R. T. Eds. 93-109 (1984).
- [Bullnheimer 99] Bullnheimer, B., Hartl, R. F., and Strauss, C.: Applying the Ant System to the Vehicle Routing Problem, *Meta-Heuristics: Advances and Trends in Local Search Paradigms for Optimization*, Voss, S., et al (Eds.), Kluwer (1999).
- [Deb 02] Deb, K., Anand, A., and Joshi, D.: A Computationally Efficient Evolutionary Algorithm for Real-Parameter Optimization, *Evolutionary Computation*, 10(4):371-395 (2002).
- [Dorigo 96] Dorigo M., Maniezzo, V., and Colomi, A.: The Ant System: Optimization by a Colony of Cooperating Agents, *IEEE Trans. on SMC-Part B*, 26(1):29-41(1996).
- [Dorigo 97] Dorigo M. & L.M. Gambardella (1997). Ant Colony System: A Cooperative Learning Approach to the Traveling Salesman Problem. *IEEE TEC*, 1(1):53-66 (1997).
- [Forsyth 97] Forsyth P. and Wren, A.: An Ant System for Bus Driver Scheduling. *Proc. of the 7th Int. Workshop on Computer-Aided Scheduling of Public Transport* (1997).
- [Higuchi 00] Higuchi, T., Tsutsui, S., and Yamamura, M.: Theoretical analysis of simplex crossover for real-coded Genetic Algorithms, *Proc. of the PPSN VI*, 365-374 (2000).
- [Law 71] Law, J. H. and Regnier, F. E.: *Annual Review of Biochemistry*, 40:533-548 (1971).
- [Lorenzo Figueiras 98] Lorenzo Figueiras, A.N. and Lazzari, C. R.: Aggregation behavior and interspecific responses in three species of Triatomine, *Memórias do Instituto Oswaldo Cruz* . 93(1):133-137 (1998).
- [Sakuma 93] Sakuma, M. and Fukami, H.: Aggregation arrestant pheromone of the German cockroach, *Blattella germanica* (L.) (Dictyoptera: Blattellidae): isolation and structure elucidation of blastellastanoside-A and -B, *Journal of Chem. Ecol.* 19:2521-2541 (1993).
- [Schatzman 02] Schatzman, M., Taylor, J., and Schatzman, M.: *Numerical Analysis: A Mathematical Introduction*, Oxford Univ Press (2002).

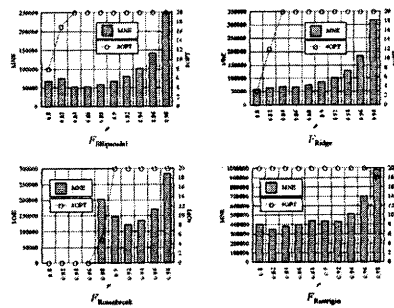


図2 ρ の性能への影響

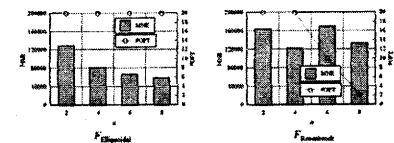


図3 α の性能への影響