A-003

大域的最適化に対する逆正接型トンネリングアルゴリズムの提案

Arctangent-type Tunneling Algorithm for Global Optimization

田邉 雅明† 金川 明弘‡
Masaaki Tanabe Akihiro Kanagawa
小野 孝男‡ 山内 仁‡
Takao Ono Hitoshi Yamauchi

1 はじめに

本論文では，制約がなく，目的関数が連続微分可能な非線形最適化問題を扱う．この種の問題のうち，単峰性の凸計画問題であれば，適当な初期値から，ニュートン法や最急降下法などの手法を用いて逐次的に解を更新することにより大域的な最適解に至ることができる．しかしながら，目的関数が連続多峰性関数であるような場合は初期値により，局所解に陥る場合がある．一方，近年の連続多峰性関数の確定的最適化手法として，Levy ら [1] によるトンネリング・アルゴリズムの研究がある．本研究では，トンネリング・アルゴリズムの性質を調査し，従来法の問題の指摘と改良型のトンネリング・アルゴリズムを提案する．

2 トンネリング・アルゴリズム

非線形連続関数 $f : R^n \to R$ の最小解を求める問題

$$\min f(\mathbf{x})$$

を考える．ただし，$f(\mathbf{x})$ は多峰性であることを許容する．この問題を用いて，トンネリング・アルゴリズムを説明する [2] ．

トンネリング・アルゴリズムは以下の二つのステップによって構成される．

極小化ステップ ： ニュートン法などの最適化手法を用いて，出発点 $\mathbf{x}_k$ の近傍の極小解 $\mathbf{x}_k^*$ を探索する．

トンネルステップ ： 極小化ステップで得た $\mathbf{x}_k^*$ に対して，$f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_k^*) = 0$ を満たす $\mathbf{x}(\neq \mathbf{x}_k^*)$ を見出し，その点を次の極小化ステップの出発点 $\mathbf{x}_{k+1}$ とする．

添字 k を繰り返しのステップ数として，この二つのステップを繰り返すことにより，大域的最適解を探索するものである．また，トンネリング・アルゴリズムの考え方を視覚的に表したものを図 1 に示す．図 1 の A → A' と B → B' は 極小化ステップを，A' → B はトンネルステップを表す．

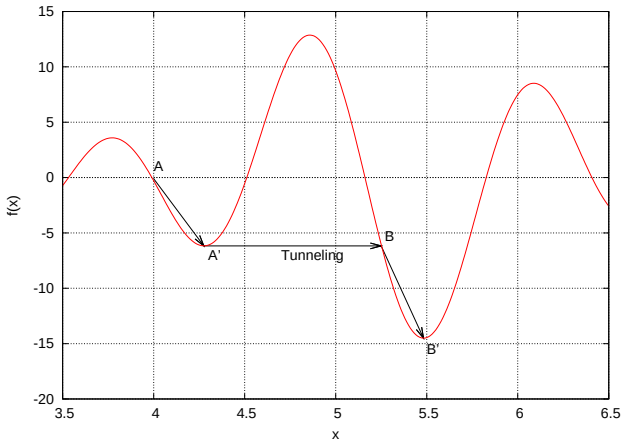

図 1: トンネリング・アルゴリズムの概要

3 Levy らのトンネル関数

Levy ら [1] は，トンネルステップにおいて次のような変換を施すトンネル関数の導入を提案している．

$$T(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*, \lambda) = \frac{f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_*)}{\| \mathbf{x} - \mathbf{x}_* \|^{2\lambda}} \tag{1}$$

$\mathbf{x}_*$ は極小化ステップで得られた局所解をとる値であり，λ は $T(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*, \lambda)$ が極値で特異性を持つためのパラメータである．

トンネル関数への変換の様子を図 2 に示す．図 2 はトンネル関数のパラメータが $x_* = 2.298798, \lambda = 1.1$ のときのグラフである．

†岡山県立大学大学院 情報系工学研究科
‡岡山県立大学 情報工学部

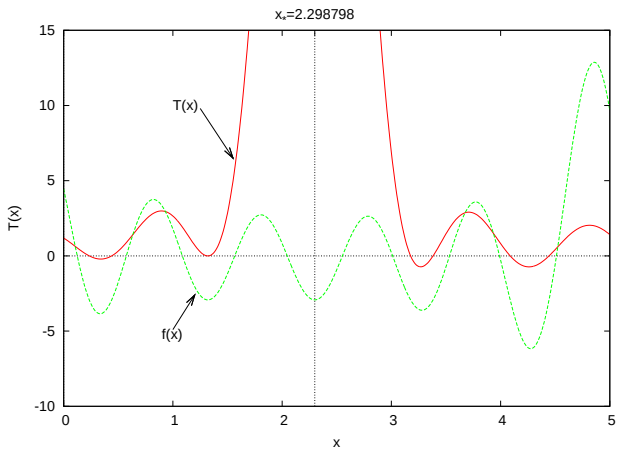

図 2: トンネル関数による変換の様子

このトンネル関数 (式 (1)) は，$\mathbf{x} = \mathbf{x}_*$ において $T(\mathbf{x}) = 0$ となることの無いよう極値において特異性を持たせ，$f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_*)$ なる $\mathbf{x}$ を求める際に極値 $\mathbf{x}_*$ が解として選ばれることをなくし，$f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_*) = 0$ を満たす次の $\mathbf{x}_k^*$ までが探索に必要な降下特性を得るために極の概念を導入したものである．しかし，極の強さを表すパラメータ λ が小さすぎると，$\mathbf{x} = \mathbf{x}_*$ 近傍での十分な降下特性が得られず，大きすぎると特異性が強くなりすぎるので $T(\mathbf{x}) = 0$ を満たす $\mathbf{x}$ を勾配法系の探索法によって探索するのが困難になる．

3.1 ウェーブ特性と極移動

トンネルステップでは，定まった極の強さ λ に対して式 (1) のトンネル関数が

$$T(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*, \lambda) \leq 0$$

となる点を探索する．しかし，$f(\mathbf{x})$ として多峰性を許容するため，現極小解 $\mathbf{x}_*$ とトンネル関数を負とする $\mathbf{x}$ との間に $f(\mathbf{x}_*)$ よりも大きな極小解が存在すると，式 (1) のトンネル変換を施したときに，波打ち現象が生じ，単調な降下特性が期待できなくなる (このような関数の特性を**ウェーブ特性**と呼ぶ)．したがって，このような場合にはトンネル関数をさらに変換して極を移動させ，トンネル関数値が負となる $\mathbf{x}$ を求めやすくする．つまり，トンネル関数の探索でウェーブ特性により $\mathbf{x}_m(T(\mathbf{x}_m) \geq 0)$ が求められた場合は，式 (2) のようなトンネル変換を施してウェーブ特性を消去する．

$$\begin{aligned} T_{move}(\mathbf{x}|T(\mathbf{x}), \mathbf{x}_m, \eta) &= \frac{T(\mathbf{x}|\mathbf{x}_i^*, \lambda)}{\| \mathbf{x} - \mathbf{x}_m \|^{2\eta}} \\ &= \frac{f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_*)}{[\prod_{i=1}^{l} \| \mathbf{x} - \mathbf{x}_i^* \|^{2\eta_i}] \| \mathbf{x} - \mathbf{x}_m \|^{2\eta}} \end{aligned} \tag{2}$$

$\mathbf{x}_m$ は移動極の位置を，η はその強さを表し，$T_{move}(\mathbf{x})$ は $(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}_i^*, \ldots, \mathbf{x}_l^*)$ で特異性を有する．$(\mathbf{x}_i^* \cdots \mathbf{x}_l^*)$ はそれまでの変換で求められた極の位置を表し，$(\eta_i \cdots \eta_l)$ はそのときの極の強さを表す．

3.2 問題点

Levy らの提案したトンネル関数を用いたトンネリング・アルゴリズムには，いくつかの問題点がある [3][4][5]．

- トンネル関数 $T(\mathbf{x})$ は極値から遠ざかるにつれ急激に減衰していくため，終了条件によっては改善点を見つけられないことがある．
- 極の移動が行われるにつれトンネル関数が複雑になり，パラメータの調節が非常に困難となる．

また，このような問題点を改善するため，北山らは，一般化ランダム・トンネリング・アルゴリズム [6]，分岐型一般化ランダム・トンネリング・アルゴリズム [7] を提案している．

4 新たなトンネル関数の提案

トンネル関数の目的について考えると

- 局所的最適解に近いほど評価値が大きくなる．
- 局所的最適解から目的関数を改善する点までが減少関数となる．

の 2 点が挙げられる．そこで，この 2 点を踏まえ，かつパラメータのスケジューリングによってウェーブ特性を消去し，トンネルステップでの探索が単純減少関数について行えるよう改良されている新しいトンネル関数を提案する．

4.1 逆正接型トンネル関数の提案

以下の式で与えられる逆正接型トンネル関数を提案する．

$$t(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*, T) = \frac{T}{\alpha + \| \mathbf{x} - \mathbf{x}_* \|^2} + p(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*) \tag{3}$$

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*) = A \cdot \arctan(f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_*)) \tag{4}$$

ここで，α，A は適当な正の実数である．また，スケジューリングには，シミュレーテッドアニーリング (SA) 法の徐冷型スケジューリングの考え方を取り入れ，最初はパラメータ T を大きな値にして極値から遠くの解を探索し，徐々に T を小さくして極値の近傍を探索するよ

うにし，幅広い探索を行うことを可能とした．ただし，分子における T は SA 法になぞらえて温度記号としての表記である．

式 (3) は，極値 $\mathbf{x}_*$ で極大となり，極値から離れるにつれ単純減少となる分布関数に，目的関数を改善する条件を制約条件としたペナルティ項 (4) を付加したものと考えられる．

分布関数はペナルティ項が負にならない限り必ず正となるので，$t(\mathbf{x}) \leq 0$ となる点は目的関数を改善するトンネル関数の解となる．

図 3 に，この T を変化させた時のトンネル関数の形状を示す．パラメータ T の値を変化させることで，ウェーブ特性を消去し，極値からトンネル関数の解までが単純降下関数となっている．また，ペナルティ項に用いている逆正接関数が滑らかな曲線となることにより，探索法による解の見落としを少なくしている．このような場合，探索法を用いて容易に $t(\mathbf{x}) \leq 0$ となる点を見つけられるので，T の値をスケジューリングにより変動させることにより，トンネルステップでの解の探索を簡単な問題へと置き換えることが可能となる．

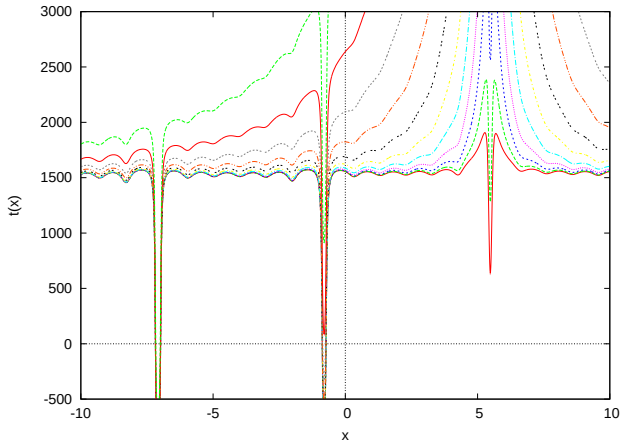

図 3: トンネル関数の形状

4.2 逆正接型トンネル関数を用いたトンネリング・アルゴリズムの流れ

初期値の入力 ：任意の初期点 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_{init}$，最大温度パラメータ $T = T_{MAX}$ を与える．また，終了条件となる最小温度パラメータ T_{min} にも値を与えておく．

極小化ステップ ：受け取った $\mathbf{x}$ から最小化法を用いて極小解 $\mathbf{x}_*$ を求める．

トンネルステップ ： トンネル関数に $\mathbf{x}_*, T$ を与え，$t(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*, T)$ を生成し，最小化法を用いて $t(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*, T) < 0$ となる $\mathbf{x}(\neq \mathbf{x}_*)$ を求める．このとき，$t(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*, T)$ は $\mathbf{x} = \mathbf{x}_*$ で極値となるので，$\mathbf{x}_*$ をわずかに進めた点 $\mathbf{x}_* + \epsilon$ を探索の出発点とする．

$t(\mathbf{x}|\mathbf{x}_*, T) < 0$ となる $\mathbf{x}$ が見つかった場合は，極小化ステップへ戻る．そうでない場合は，冷却ステップへ行く．

冷却ステップ ：T を式 (5) の冷却スケジューリング式によって減少させる．

$$T \leftarrow \frac{T}{2} \tag{5}$$

冷却により T があらかじめ定めた T_{min} を下回れば探索を終了し，その時点で得られた $\mathbf{x}_*$ を解とする．そうでなければ冷却により減少した T と，そのままの極の位置 $\mathbf{x}_*$ を引数としてトンネルステップへと行く．

5 検証実験 1

本論文で提案したアルゴリズムと既存の手法との間で性能の比較を行う．初期値の入力として，初期点 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_{init}$ は乱数によって 100 個与え，各々の初期点に対して大域的最適解を探索する．最小化法は準ニュートン法を用い，収束条件は 1.0×10^{-3} とする．なお，トンネルステップにおける最大試行回数は 10 回とする．

以上の条件で，Levy らによるアルゴリズム，北山らによるアルゴリズム，提案手法のアルゴリズムで得られた最適解の比較を行う．また，提案手法である逆正接型トンネル関数におけるパラメータには $\alpha = 0.1$, $A = 1024$ を与えることとし，温度パラメータ T は，最大温度 $T_{MAX} = 65536(= 2^{16})$，最小温度 $T_{min} = 2(= 2^1)$ を与えることとする．

5.1 適用問題 1

式 (6) の問題を用い，手法の性能の比較を行う．図 4 に式 (6) で与えられる関数のグラフを示す．なお，図 4 から見て分かる通り，$x = \{-7.083, -0.801, 5.483\}$ の 3 点が大域的最適解である．

$$f(x) = -\sum_{t=1}^{5} i \cos\{(i+1)x + i\} \tag{6}$$
$$(-10 \leq x \leq 10)$$

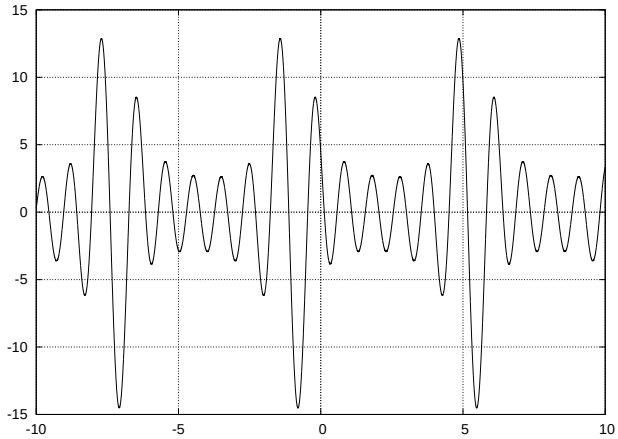

図 4: 式 (6) の形状

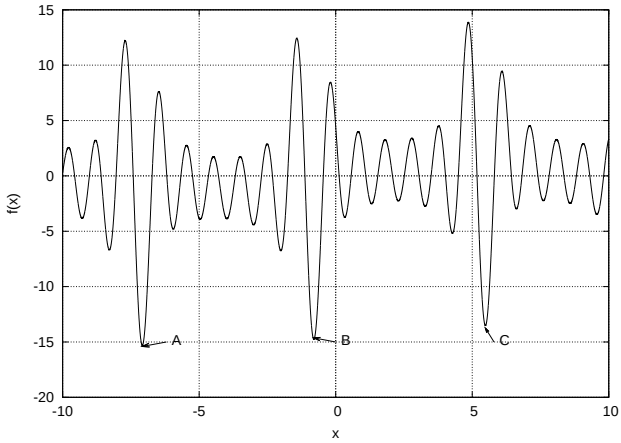

図 5: 式 (7) の形状

5.1.1 結果

初期点 100 個についてそれぞれのアルゴリズムで大域的最適解の探索結果は表 1 の通りである．表 1 は最終的に得た解の個数を表している．

表 1: 式 (6) の最適化の結果

	最適解	他
Levy らの関数	96	4
北山らのランダム法 [6]	100	0
提案法	100	0

表 1 を見ると分かるように，Levy らのアルゴリズム以外は 100 個すべてにおいて最適解へと到達できている．Levy らのアルゴリズムは，探索がうまく行えなくなるウェーブ現象や，トンネル関数や極移動のパラメータの調節がうまくいっていないことが考えられる．

5.2 適用問題 2

図 4 を見ると，大域的最適解が複数存在するため到達しやすそうにとれる．よって，手法の性能の比較になるような問題とは言えないため，式 (7) を用いて比較することとする．

$$f(x) = -\sum_{t=1}^{5} i\cos\{(i+1)x+i\} + \sin(\pi x/20) \qquad (7)$$
$$(-10 \le x \le 10)$$

式 (7) は，式 (6) の周期関数になだらかな正弦波を加えたもので，従来のトンネリング・アルゴリズムでは大域的最適解への到達が難しいものと予想される．式 (7) で与えられる関数のグラフを図 5 に示す．

5.2.1 結果

初期点 100 個についてそれぞれのアルゴリズムで大域的最適解の探索結果は表 2 の通りである．A，B，C は図 5 の局所解に対応しており，数字はその局所解を最終的な解として得た個数を表す．なお，図 5 を見ると分かるように A が最適解である．

表 2: 式 (7) の最適化の結果

	A	B	C	他
Levy のオリジナル関数	44	25	27	4
北山らのランダム法	75	17	8	0
提案法	92	7	1	0

表 2 を見て分かる通り，Levy らのアルゴリズムでは，うまく探索に成功していない．式 (7) のような問題は適用しづらい問題ということが見て取れる．

北山らのランダム法については，トンネルステップにおける試行回数 10 回という少なさが原因と言える．試行回数 100 回というように多くした場合は，初期点 100 個すべてにおいて最適解である A に到達している．これは，探索をランダムに頼っている部分が大きいため，探索結果は試行回数に依存しているとも言える，

提案手法である逆正接型トンネル関数を用いたトンネリング・アルゴリズムでは，与えた初期点 100 個のうち 92 個が最適解へと到達している．これは，既存手法のトンネリング・アルゴリズムからしてみれば十分な精度と言えよう．また，少ない試行回数で効率良く最適化を行うこともできていると言える．

6 検証実験 2

多次元関数への適用を行う．多次元関数への適用にあたり，探索方向を変数 1 つに対して，プラスマイナスの 2 方向ずつとする．また，トンネルステップにおける試行回数は 50 回，提案手法のパラメータは $A = 1024$, $\alpha = 1000$ とし，その他は検証実験 1 と同条件で行う．以上の条件で，北山らによるアルゴリズム，提案手法のアルゴリズムで得られた最適解の比較を行う．

6.1 Shubert 関数

Shubert 関数とは，式 (8) で表される n 次元関数のことである．これは，$n \times 3^n$ 個の大域的最適解を持つ多峰性関数となる．

$$f(\mathbf{x}) = \prod_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{5} i\cos\Big((i+1)x_j + i\Big)\right) \quad (8)$$
$$(-10 \le x_j \le 10,\ j = 1, \ldots, n)$$

2 次元 Shubert 関数は，式 (9) で表され，図 6 のような形状の関数となる．これは，18 個の大域的最適解 ($f(\mathbf{x}^*) = -186.7309$) を含む，760 個の局所最適解を持つ．

$$f(x_1, x_2) = \left(\sum_{i=1}^{5} i\cos\Big((i+1)x_1 + i\Big)\right)\left(\sum_{i=1}^{5} i\cos\Big((i+1)x_2 + i\Big)\right) \quad (9)$$
$$(-10 \le x_j \le 10,\ j = 1, 2)$$

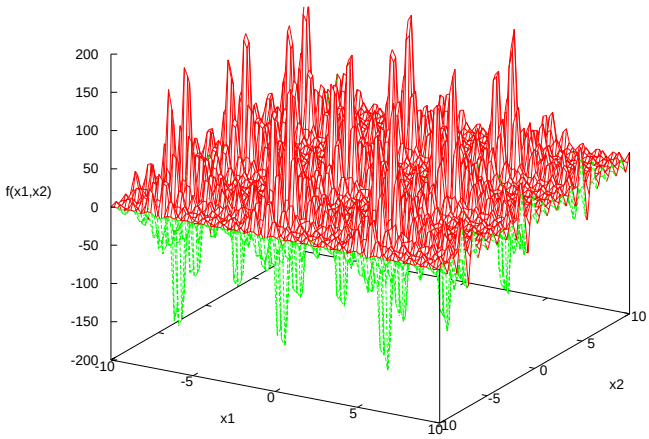

図 6: 2 次元 Shubert 関数の形状

この 2 次元 Shubert 関数 (式 (9)) に対して，大域的最適解を探索する．

6.2 結果

初期点 100 個についてそれぞれのアルゴリズムで大域的最適解の探索結果は表 3 の通りである．

表 3: 式 (9) の最適化の結果

	最適解	他
北山らのランダム法 [7]	93	7
提案法	100	0

北山らのランダム法については，ほぼ良い結果が得られているが，やはりトンネルステップにおける試行回数の少なさが原因と言える結果となっている．

提案手法では，少ない試行回数においても与えた初期点 100 個すべてから最適解へと到達しており，効率的に最適化が行えることがわかる．

7 結論

トンネリング・アルゴリズムは，その探索方向において目的関数を改悪する点を候補とせず，改善する方向においてのみ探索を行うことから効率的で優れた探索アルゴリズムであるが，その扱いの難しさや，未だ手法が確立されていないことなどもあり，今日ではあまり研究がなされていなかった．

本論文では，トンネリング・アルゴリズムの扱いづらい原因であるウェーブ特性を消去し，パラメータの設定も比較的簡単なものとなるような新しいトンネル関数の提案を行い，既存手法との性能を比較し，その有用性を示した．しかし，精度向上のための理想的なパラメータの決定，他の問題への適用などの課題も残った．

今後は，本論文で提案した手法が効率的に大域的最適解を求められることを示したように，トンネリング・アルゴリズムの考え方を取り入れたハイブリッドな手法など，ますます有用な解法に発展することが期待される．

参考文献

[1] A. V. Levy and A. Montalvo: “The Tunneling Algorithm for the Global Minimization of Functions”, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, Vol. 6, No. 1, pp. 15-29, 1985.

[2] 山崎光悦: 工学問題を解決する 適応化・知能化・最適化法，技報堂出版，第 5 章，1996.

[3] Y. Yao: “Dynamic Tunneling Algorithm for Global Optimization”, IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Vol. 19, No. 5, pp. 1222-1230, 1989.

[4] 呂敏, 志水清孝: “ϵ-近似手法による多変数関数の大域的最適化”, 電子情報通信学会論文誌 A, Vol. J75-A, No. 4, pp. 769-777, 1992.

[5] 島孝司: “徐冷型ランダム・トンネリング・アルゴリズムによる大域的最適化”, 計測自動制御学会論文集, Vol. 29, No. 11, pp. 1342-1351, 1993.

[6] 北山哲士, 山崎光悦: “一般化ランダム・トンネリング・アルゴリズムによる大域的最適化:第 1 報, アルゴリズムの提示と数値計算例”, 日本機械学会論文集.A 編, Vol. 69, No. 684, pp. 1250-1256, 2003.

[7] 北山哲士, 山崎光悦: “分岐型一般化ランダム・トンネリング・アルゴリズムの提案”, 第 6 回最適化シンポジウム講演論文集, pp. 25-30, 2004.