I －19

ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸによる最適解探索の基礎検討

（株）地崎工業　技術開発部　　正会員　須藤　敦史
（株）地崎工業　技術開発部　　正会員　藤田　明寛

１．はじめに

組み合わせ最適化問題は、多数の組み合わせの中から特殊な組み合わせを見つけだす問題であり、最適解の探索は極めて難しい。加えて、このような問題では常に局所解における滞留の問題が生じ、提案されている手法の多くは、効率的な組み合わせ問題の解法や局所解からの脱出ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを有する[1),2),3)]。

これら効率的な組み合わせ問題の解法や局所最適化の回避機構を有する手法は、そのｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑに確率的要素を取り入れることにより、この問題をある程度解決していると言える。言い替えれば、これらの手法は、解の探索中において各状態に確率という重みを与えることにより、効率的な探索や局所解へのﾄﾗｯﾌﾟを回避するｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑである。

このように最適化手法の確率化は、局所最適化を回避するための方法として有用であり、かつ組み合わせ最適化問題の構造や特徴を見出すための重要なﾂｰﾙとなる可能性がある。

そこで本研究では、確率的最適化手法や確率化な局所最適化を回避ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑの考察を行い、加えて単純な確率過程であるﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸを用いて局所解回避の基礎検討を試みている。

２．組み合わせ最適化問題の確率化

組み合わせ最適化が実数目的関数$f(x)$を用いて式(1)のように定義できると仮定する。

$$f(x) \rightarrow \min_{(x)} \tag{1}$$

ここで、xは状態変数で状態空間Xは有限集合とする。

このような離散量の組み合わせ最適化問題をﾗﾝﾀﾞﾑｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞ等で定式化を行う場合に、確率を導入することが行われる。いま、対象となる基本空間をΩ,また確率をPとすると、最適化(目的関数の最小化)問題は式(2)に示すように期待値$g(x)$を可能領域($x \in H$)において最大化する問題になる[4)]。

$$g(x) = \int_{\Omega} G(x;\omega) P\{d\omega\} \tag{2}$$

上記の確率的最適化問題では、問題の期待値計算が必要となるが確率が既知でないため、この計算が困難な場合が多い。そこで著者らは、実際のｻﾝﾌﾟﾙ値によりﾏﾙｺﾌ過程における変数の確率分布を最尤法で推定する手法[5)]を提案している。

また、この組み合わせ最適化問題に対して平衡統計力学の概念で確率化を行っている手法[6)]がある。この方法は、式(1)に確率を導入することにより、式(3)に示すような確率的重み目的関数$p(x)$の最小化問題に置き換えている。

$$\sum_{(x)} p(x) f(x) \rightarrow \min_{(p(x))} \tag{3}$$

$$\text{制約条件:}\quad -\sum_{(x)} p(x) \log p(x) = H \quad (const)$$

$$\sum_{(x)} p(x) = 1,\ 0 \le p(x) \le 1,\ \forall x \in X$$

式(3)のような問題で$p(x)$は連続変数であり、もとの問題が離散的であっても確率化を行うことで連続変数の最適化問題になっている。

このように、最適化手法を確率化することの最大の利点は、離散問題あるいは組み合わせ最適化問題を近似的に連続的な最適化問題に置き換えることができると言う点である。

３．局所最適化

3.2 局所最適化回避ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑ

前記したいずれの手法(参考文献 1),2),3),5))は、確率的な局所解回避のｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを有し、この確率的ｱﾙ

A Basic Consideration on Optimization Search of Random Walk
by Atsushi SUTOH and Akihiro FUJITA

ｺﾞﾘｽﾞﾑを大別すると以下に示すようになる。

(1)発見的方法(乱数的)

(2)局所解探索の確率的揺動

(1)Genetic Algorithm:GAは、交叉・突然変異などのｵﾍﾟﾚｰﾀの制御変数に、また修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞでは確率変数の再抽出に発見的方法(乱数)を用いている。
(2)Simulated Annealing:SAは、目的関数値が大きい解候補が生成されも確率的に容認する。また、Dynamic Tunneling Algoriyhm:DTAにおいては、新しい解候補を旧解候補付近で確率的に揺動させることにより局所解からの脱出を期待している。

以上のように局所最適化回避ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑは確率的要素を含んでいるが、乱数的方法は多様な解候補を生成し遠方探索を行うが近傍探索の確率が少ない。また確率的揺動は、近傍探索であり遠方探索を行わない欠点を有する。

そこで、ﾏﾙｺﾌ過程におけるﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸを用いて、局所解の脱出とともに解空間において近傍と遠方の中間の探索を行う方法の基礎検討を行っている。

3.2 ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸ

ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸは離散的な時系列の中で最も簡単なﾓﾃﾞﾙであり、離散時間$\{x_t, t=0,1,\cdots\}$において式(4)のように示される。

$$x_t = \sum_{i=1}^{t} w_i \;, \quad x_0 = 0 \tag{4}$$

また、式(4)よりx_tは式(5)のように差分式で表される。

$$x_t = x_{t-1} + w_t \;, \quad x_0 = 0 \tag{5}$$

ここでw_tは白色雑音である。またﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸは、w_tが時間に関係なく確率的に現れる過程であり、現在の位置は一つ前の位置により決定されるﾏﾙｺﾌ過程である。

4．数値解析

ここで、式(6)に示すような簡単な式を用いて最小解を探索する問題を検討する。この問題において前記した確率的最適化手法(修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞ)により得られた準最適解を初期解析点とし、局所最適解脱出ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑの基礎検討を行う。

$$\begin{aligned} Z(x,y,v,w) = \frac{3}{2}\{ &(x^4 - 24x^3 + 193x^2 - 570x + 400) \\ &+(y^4 - 21y^3 + 151y^2 - 411y + 280) \\ &+(v^4 - 22v^3 + 161v^2 - 428v + 288) \\ &+(w^4 - 22w^3 + 167w^2 - 506w + 504)\} \end{aligned} \tag{6}$$

制約条件: $0.00 < x < 12.00$ ， $0.00 < y < 12.00$ ， $0.00 < v < 12.00$ ， $0.00 < w < 12.00$

ただし、(x,y,v,w)は連続変数であるが組み合わせ最適化を検討するため、数値解析では少数点以下2桁までの離散変数としている。

また、式(6)の解が示す曲面は多峰性を有しており、局小値は次式に示すように極めて近い目的関数値を有している。

$$Z(2.43, 2.31, 2.16, 2.81) = -538.889 \tag{7.a}$$
$$Z(2.43, 2.31, 2.16, 8.19) = -538.888 \tag{7.b}$$

ここで、修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞにより求められた目的関数の値の上位(準最適)解の数%に、このﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸを適用する。

ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸの基本的な行動規則は図-1に示すように、2変数(x,y), (v,w)の上下左右とその中間方向を加えた8方向をﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸにおける2次元平面の行動方向とする。この移動方向をﾗﾝﾀﾞﾑに決定し、移動後の目的関数を求めて、最適解の探索を行う。

これは、良い解候補の付近により良い解の存在を期待するものであり、かつ局所解からの脱出や中間探索のする目的である。また、個々のﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸ探索に探索ｴﾈﾙｷﾞｰを定義し、目的関数値が大きい解候補が生成さ

れる場合でも探索の継続を容認する。

X(+) Y(−)	X(+)	X(+) Y(+)
Y(−)		Y(+)
X(−) Y(−)	X(−)	X(−) Y(+)

図-1(a) ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸの行動規則(x,y)

V(+) W(−)	V(+)	V(+) W(+)
W(−)		W(+)
V(−) W(−)	V(−)	V(−) W(+)

図-1(b) ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸの行動規則(v,w)

探索ｴﾈﾙｷﾞｰは最初に個々のﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸ探索に一定量与え、目的関数値が小さくなる場合には減少させ、ｴﾈﾙｷﾞｰ量が0になった場合には探索を終了する。

以下に解析手順の詳細を示す。

(1)修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞにおいて、解候補を式(7)のどちらかに限定する。
(2)(1)により得られた解候補の上位5%をﾗﾝﾀﾞﾑに選択し、個々のﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸの過程に初期探索ｴﾈﾙｷﾞｰ量として[50]を与える。
(3)選定した個々の解候補を初期値として、ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸを前記した規則により行う。また、1歩移動することにより探索ｴﾈﾙｷﾞｰ量を[10]ずつ減少させる。
(4)ここでﾗﾝﾀﾞﾑな探索(移動)により、目的関数値が向上した(小さくなった)場合には、探索ｴﾈﾙｷﾞｰ量に[20]を与える。
(5)探索過程において、個々のｴﾈﾙｷﾞｰ量が初期ｴﾈﾙｷﾞｰ量の2倍になった場合には探索過程を分岐させる。
(6)手順(1)〜(5)を全ての探索過程においてｴﾈﾙｷﾞｰを[0]になるまで行う。

ここで、上記手順によりﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸさせた中から、抽出した5ｻﾝﾌﾟﾙの目的関数値を図-2に示す。

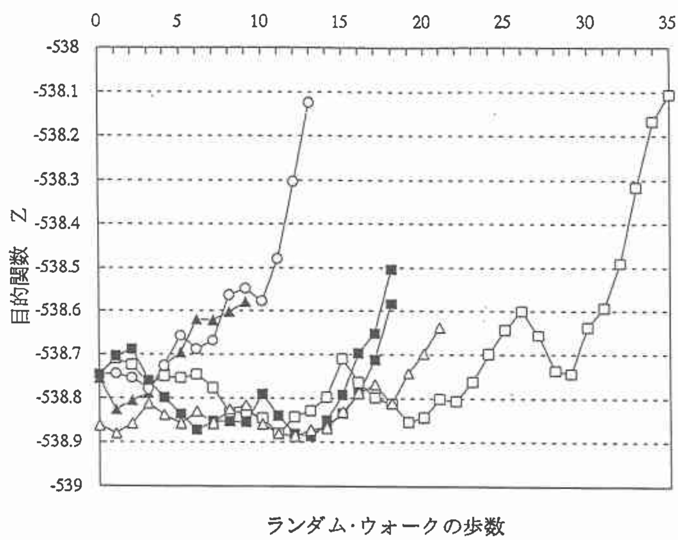

図-2 目的関数の軌跡

図より、目的関数値の山を乗り越え局所最適解から脱出する過程が見られる。加えて局所解から脱出し、小さい目的関数を探索した過程は探索ｴﾚﾙｷﾞｰの増加にともない探索過程を分岐している。　また、探索ｴﾈﾙｷﾞｰを有するものは比較的遠方の探索を行っているが、本過程は簡単な規則を用いているため探索を目的関数の曲面を登りながら終了している。

次に、式(7)の極小値の一方を初期解として、ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸにより探索した解を式(8)に示す。式(8)より本過程は局所解から脱出するｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを有している。

$$Z(2.43, 2.32, 2.16, 2.81) = -538.887 \tag{8.a}$$

$$Z(2.43, 2.32, 2.16, 8.19) = -538.887 \tag{8.b}$$

5．結　論

組み合わせ最適化問題は、多数の組み合わせの中から特殊な組み合わせを見つけだす問題であり、かつ局所解における滞留の問題が生じ、最適解の探索は極めて難しい。ここで、効率的な組み合わせ問題の解法や局所解からの脱出ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを有する手法は、そのｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑに確率的要素を取り入れることにより問題をある解決している。

そこで本研究は、確率的最適化手法と局所最適化回避ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑの考察を行った。加えて、ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸを用いて局所解回避の基礎検討を試みた結果を以下に示す。

(1)確率的最適化手法は、確率化することにより離散問題あるいは組み合わせ最適化問題を近似的に連続的な最適化問題に置き換えている。
(2)局所解回避のｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑは、確率的な要素を有し1)発見的方法(乱数的)と2)局所解探索の確率的揺動に分けることができる。
(3)ﾗﾝﾀﾞﾑｳｫｰｸによる探索過程は局所解から脱出するｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを有している。
(4)本手法において、効率的な局所解から脱出するｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑや遠方探索を行うためには、関数の勾配等の情報を有効に活用する規則を用いる必要が生じる。

参考 文献

1)J.H.Holland: Adaptation in Natural and Artificial Systems, Ann Arbor, The Univ. of Michigan Press. 1975.
2)E.Aarts and J.Korst: Simulated Annealing and Boltzmann Machines - A Stochastic Approach to Combinatiorial Optimization and Neural Computing, John Wiley, 1989.
3)Y.Yao: Dynamic Tunneling Algorithm for Global Optimization, IEEE Trans. SMC-19-5, pp.1222-1230, 1989
4)I.M.Stanch-Minasian and M.J.Wets: A Research Bibliograpy in Stochastic Programming, Oper. Res., 24, pp.1078-1119, 1976.
5)須藤敦史・星谷 勝・宮沢和樹:遺伝的要素を考慮したｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞによる離散型変数を有するｼｽﾃﾑの最適化, 土木学会論文集, No.519/Ⅰ-32, pp.223-232, 1995.
6)深尾 毅:最適化問題の確率化と熱力学, 計測と制御, Vol.29, No.12, pp.11-17, 1990.