局所探索プロセスを有するカオスダイナミクスを用いた多峰性関数の最適化

大阪大学大学院工学研究科　帯田 敬悟　OBITA Yoshinori
大阪大学大学院工学研究科　山本 洋介　YAMAMOTO Yosuke
01308104　大阪大学大学院工学研究科　*巽 啓司　TATSUMI Keiji
01307844　大阪大学大学院工学研究科　谷野 哲三　TANINO Tetsuzo

1. はじめに

多峰性をもつ非線形関数の最適解を求める大域最適化問題は，厳密解法では現実的な時間内に解くことが難しいため，良質な近似解を求めるヒューリスティックな解法が広く研究されている．本研究では，決定論的カオスの非周期的な挙動を生かした探索法に着目する．これらの方法では，単純な決定論的力学系の生成するランダムな軌道であるカオスを用いて，大域的な解の探索を行っており，その有効性を示す実験結果も報告されている [1,2,3].

従来は，探索の初期の段階でカオスによる大域的な探索を行い，探索の進行とともにカオス的な挙動を引き起こす要素を次第に減衰させ，良質な局所解に収束させる方法など，最終的に求める局所解に収束させることを目指した研究が行われてきた [2,3].

本研究では，それらの方法の問題点を指摘し，その改善のため，カオスダイナミクスを用いた探索を，実行可能領域の全域探索のため減衰させることなく行い，良質な解の存在する領域が見つかった場合に，局所探索プロセスを用いて暫定解を更新していく方法を提案する．

2. カオスを用いた大域的探索法

本発表では，以下のような非線形最適化問題を考えることとする．(制約条件が一般の線形制約などで与えられる場合にも，カオスによる探索法がすでに研究されており [1]，後述の提案法も適用することが可能である．)

$$\min_{y} \ f(y) \quad \text{s.t. } y \in Y$$

ここで，$y \in \Re^n$，$Y := \{y| -l \leq y \leq l\}$，$l > 0$ とし，$f(y) : \Re^n \rightarrow \Re_+$ は正値をとる多峰性の連続微分可能な関数とする．

いま，適当な微分同相写像 $h : \Re^n \rightarrow Y$ をもちいて（例えば，$h_i(u) = l_i(1 - \exp(-u_i))/(1 + \exp(-u_i))$, $i = 1, \ldots, n$ ），変数 $x \in \Re^n$ に関する目的関数 $F(x) := f(h(x))$ の 降下方向への更新：

$$x^{\text{new}} = x^{\text{c}} - \alpha \nabla_x F(x^{\text{c}}) =: g(x^{\text{c}}, \alpha) \tag{1}$$

を行うことを考える．ステップ幅 α が十分に小さいとき，この更新式より生成される点列は初期点に依存して局所解の一つに収束する．また，α が十分に大きいときには，Li-York のカオスを生じることが知られている [2].

式 (1) の生成するカオスを用いた探索法が提案されている．以下に最も単純な大域的探索のアルゴリズムを示す．

アルゴリズム カオス的探索

Step 0 初期値設定
乱数により初期点 $x(0)$ を設定．十分大きな正数 α_0 を用いて $\alpha(0)$ を初期化，$t = 0$ とする．

Step 1 カオスサーチ

$$x(t+1) := g(x(t), \alpha(t))$$

$\alpha(t)$ を適当な単調非減少な関数をもちいて更新

Step 2 終了条件を満たさなければ，Step 1へ.

ステップ幅 α の更新方法としては，徐々に小さくする方法 [1] やある値まで減少させると一気に局所探索に適した値まで小さくする方法，適当な基準値 F を用いて，$F > F(x(t))$ を満たしたときに局所探索を行う方法 (ステップ冷却法) なども知られている [2]. この方法は，探索の初期にはカオスダイナミクスを用いて実行可能領域全体を探索し，アルゴリズムの進行とともに，局所探索を用いた探索に推移していき最終的に良質な局所解が見つかることを期待した方法である．また，求まった局所解に対して初期点依存はほとんど見られない.

一方，カオスの軌道は，空間的に非一様なそのカオスに固有の確率分布測度 (漸近測度) に従うことが知られている [2]. そのため，十分に時間をかけてゆっくりステップ幅を小さくした場合に求まる局所解は，この漸近測度に大きく依存しており，大域的最適解への収束性は保証されない．漸近測度は，カオス的力学系の構成方法および目的関数の構造に依存してきまるため，従来から，大域的最適解や良質な局所解を効率的に探索するような漸近測度を持つカオスを構成する方法について研究が行われてきているが，非常に難しい課題である [3]. また，これらの方法は，しばしば，結果的にカオスの探索領域を良質な解が期待できる一つの領域だけに限定することになりやすく，カオス探索を行う本来的な目的である,「実行可能領域の全域を探索する」という特徴が失われやすい．さらに，そのように調整を行ったカオスに対しては，カオス探索法の孕むほかの大域的な探索に関する問題「カオスが実行可能領域全域には広がっていない状況」「理

論的には（位相的）カオスが生じている状況でも，計算機での数値計算では周期点しか現れない" 窓" とよばれる状況」を避けるための対策を講じることがより困難になる.

3. 局所探索プロセスを有するカオスサーチ

本研究では，従来の研究で主に行われてきたカオスダイナミクスそのものを大域的最適解に収束させるようカオスを構成することを目指すのではなく，カオスによる探索を，全探索過程を通じて全域的な探索に用いる方法を提案する. (1) 式において $\alpha(t)$ の値をカオス軌道を生成する領域に値に保持して探索を行い，現在得られている暫定解 $F(x(t))$ が条件 $F(x(t)) < \beta F_{\min}$ を満たしたときに局所探索プロセスを開始する. ここで，β は，$1 \geq \beta$ を満たす適当な正数である. この値を大きくすると局所探索プロセスが行われる回数が増加する. 但し，基準を満たしても局所探索プロセスにかける時間の短縮のため，目的関数が改悪する点までは，カオスサーチを行う.

この方法の実装として，カオス探索と（複数個の）局所探索プロセスを並行して行うような方法も考えられるが，ここでは，最も単純な各々の探索を逐次的に行うアルゴリズムを以下に示す. また，カオスサーチに用いるステップサイズ α は充分に大きな定数を用いるものとし，局所探索プロセスは (1) 式で α を十分小さく定めた更新式を用いて更新を行い有限回で終了するような適当な終了条件を用いるものとする.

アルゴリズム 提案法

Step 0 初期値設定

乱数により定めた x_0 を初期点として局所探索を行い局所解 $x(0)$ を求める. 基準値を $F_{\min} := F(x(0))$ とし，$\alpha > 0$，$\beta > 1$，$\bar{t} > 0$ を設定する.

Step 1 カオスサーチ

$$F_{\text{past}} := F(x(t)),\ x_{\text{past}} := x(t)$$
$$x(t+1) := g(x(t), \alpha)$$

$flag < 0$ ならば $flag := flag + 1$,
$flag = 0$ ならば **Step 2** へ,
$flag = 1$ ならば **Step 3** へ.

Step 2 基準値の比較

$flag := 1$. $F(x(t)) \geq \beta\, F_{\min}$ ならば，**Step 1** へ.

Step 3 $F_{\text{past}} \geq F(x(t))$ ならば **Step 1** へ.

Step 4 局所探索プロセス

x_{past} を初期点とした局所探索により局所解（の近似解）$x^*(t)$ を求める. $F_{min} := \min\{F_{\min}, F(x^*(t))\}$, $flag := -\bar{t}$ とし **Step 1** へ.

Step 5 終了条件

反復回数の上限に達する ($T_{\max} \leq t$) か終了条件を満たせば終了.

ここで $\bar{t}$ は，同じ領域を続けて局所探索しないために，局所探索プロセス (Step 4) 終了後は，続けて $\bar{t}+1$ 回カオスサーチを行うための定数である.

なお，この逐次型提案法において $\beta = 1$ とし，Step 3 と $flag$ による制御を省いたものは，文献 [2] で提案されている方法とみなすことができる (反復スイッチ冷却法). しかし，この方法は，カオス探索を最終的な収束のための局所探索法に切り替える基準値 F を適切に設定するため反復を行う方法であり，提案法のような，カオス探索に全域的な探索を任せるために，局所探索法を別のプロセスとして立ち上げる方法とはなっていない.

提案法の特徴は，トレードオフの関係にある大域的な探索と局所的な探索に用いる反復回数や計算時間を明示的に調整することが可能になっている点にある.

4. 数値実験

3. で示したアルゴリズムに基づいた探索法を，最適解が既知の Wood-Colville 関数などいくつかの 2 次元の問題に適用し，探索過程を分析することで効率的な求解法であることを確認した. 結果の詳細な結果およびより高次の問題に適用した結果については，発表時に紹介する.

5. おわりに

本論文では，多峰性を有する非線形関数の大域的最適問題に対する近似解法として，局所探索プロセスを有するカオスダイナミクスによる最適化手法を提案した. さらに，この方法では，トレードオフの関係にある大域的な探索と局所的な探索を明示的に調整することが可能であることを示し，数値実験により従来法に比べより効率的で汎用性のある手法であることを確認した.

参考文献

[1] R. Horie and E. Aiyoshi : "Variable Metric Gradient Projection Method and Replicator Equation," *IEEE Intl. Conf. on System, Man, and Cybernetics*, pp. 515–520 (1999).

[2] 徳田功, 小野寺浩二, 徳永隆治, 相原一幸, 長島知正："最適化問題を解くカオス的力学系の大域的分岐のシナリオとその最適化手法の検証," 電子情報通信学会論文誌, vol. J80-A, no. 6, pp. 936–948 (1997).

[3] 徳田功, 田村亜紀, 徳永隆治, 相原一幸, 長島知正：" 最適化問題を解くカオス的力学系の学習," 電子情報通信学会論文誌, vol. J81-A, no. 3, pp. 377–388 (1998).