複数の力学系軌道を用いた大域的最適化における 相互作用の効果に関する数値的検討

非会員 森 川 貴 展 (関西大)
正 員 伊 藤 秀 隆 (関西大)
正 員 隈 元 昭 (関西大)

A Numerical Investigation of the Effect of Interaction in Global Optimization
Using Dynamical-System Trajectories

Takanori MORIKAWA, Non-member; Hidetaka ITO, Member, Akira KUMAMOTO, Member (Kansai University)

Recent studies on global optimization using dynamical-system trajectories suggest that interaction among trajectories may lead to better performance than simple parallel search. In this paper, we closely examine and compare two forms of interaction applied to trajectories of second-order differential equations. Our results for various objective functions systematically illustrate the characteristics of individual trajectories as well as the overall performance attained by the best trajectory.

キーワード：大域的最適化，非線形力学系，相互作用

1. ま え が き

近年，多数の局所解を有する非線形最適化問題に対して，カオスの力学系をはじめ，様々な力学系の軌道を用いる手法が提案されている^{(1)~(10)}．ここで要求される局所的探索能力と大域的探索能力のうち，局所的探索能力については，力学系を勾配系に遷移させたり散逸を導入することによって実現できるが，大域的探索能力については，カオスの軌道やトンネリングの特性から必ずしも効率よく最適解を探索するとは限らないという問題が指摘されている^{(4),(6)}．

このような問題点に対して，複数の力学系軌道を用いた並列探索によって探索効率を向上させようという試みがなされており，各軌道を生成する力学系に適当な相互作用をもたせることによって，独立な軌道群による並列探索の場合よりも探索効率が向上し得るとの報告がなされている^{(5)~(7)}．しかし，相互作用の効果の議論においては，意図した効果が目視できる試行例の提示にとどまっており，複数の手法に対する定量的な比較検討もほとんど行われていない．

そこで本論文では，どちらも2階常微分方程式の結合系の軌道を用いており相互作用の形式のみが異なる2つの大域的最適化手法（文献(5)(8)）を取り上げ，相互作用の効果に関して同一の観点から系統的・定量的な比較検討を行った結果について報告する．これら2つの手法は，探索途中での力学系の切り替えやパラメータの変化を用いておらず，

相互作用の効果に的を絞った検討の対象として好適である．検討にあたっては，文献(5)(6)で用いられている最良の軌道による大域的最適化の成功率のみならず，その内訳として軌道群中で大域的最適解に収束した軌道の占める割合にも注目し，また例題とする目的関数の形状にも配慮しながら，各手法の評価と比較を行う．

2. 検討の対象とする手法（力学系）

本論文では，無制約の最適化問題

$$\min_x f(x) \quad x \in R^n \quad \dots\dots\dots (1)$$

を考える．

〈2・1〉 高次元アルゴリズム⁽⁸⁾（手法A） この手法では，目的関数 $f(x)$ の最小値探索を， m 個の軌道の相互作用を含む常微分方程式系

$$\begin{cases} \frac{dx^i}{dt} = \sum_{j=1}^m a_{ij} y^j \\ \frac{dy^i}{dt} = -\nabla f(x^i) - \mu y^i \end{cases} \quad i = 1, \dots, m \quad \cdot (2)$$

を用いて行う．ここで， a_{ij} は i 番目と j 番目の軌道間の運動エネルギーのやりとりを生じさせるための結合係数行列の成分である．本論文では，結合係数行列の対角成分 a_{ii} を1とし，非対角成分 $a_{ij} (i \neq j)$ には均一の値を設定する．ま

た、 μ は減衰係数であり、手法 B との比較検討を考慮に入れて減衰項の形式を簡略化している。

文献(8)では、力学系を高次元化することによる効果に焦点を当てているが、本論文では並列探索における相互作用の効果^{(5)~(7)}という観点からの検討を行う。

(2.2) 線形バネを用いた多軌道型慣性系⁽⁵⁾ (手法 B)
この手法では、手法 A とは結合形式の異なる常微分方程式系

$$\begin{cases} \frac{dx^i}{dt} = y^i \\ \frac{dy^i}{dt} = \frac{1}{M} \left[-\nabla f(x^i) - \mu y^i + K \left(1 - \frac{t}{T} \right) \right. \\ \quad \left. \times \sum_{j=1, j \neq i}^m \left\{ \frac{x^j - x^i}{\|x^j - x^i\|} (\|x^j - x^i\| - L) \right\} \right] \end{cases} \quad (3)$$

を用いて最適化を行う。ただし、 M, K, L はそれぞれ物理系における質量、バネの強さ、バネの自然長に相当するパラメータであり、 T は探索時間である。その他のパラメータの意味は、手法 A の場合と同じである。

この手法では、各軌道間に線形バネによる斥力および引力を作用させることにより、複数の軌道が同一の解に収束する可能性を薄れさせ、複数の軌道のうち少なくとも1つが最適解に収束することを期待している。

3. 手法 A における力学系軌道

手法 A については、文献(9)において目的関数値を小さくする方向への高次元保存系 ($m \geq 3$) の自律的運動が理論的に詳細に論じられている。しかし、簡単な例題に対する実験データが十分には示されていないので、次節で行う実験への導入として、手法 A における力学系の振る舞いを一例を用いて概観しておく。

(3.1) 力学系が保存的である場合 まず、式(2)の減衰係数を $\mu = 0$ として、力学系を保存系とした場合の軌道の性質を、次の目的関数を用いて調べる。

[例題 I]

$$f(x) = (x + 4.2)(x + 2.2)(x + 1.2) \times (x - 1.7)(x - 2.8)(x - 3.865) \cdots \cdots (4)$$

この関数には、 $x \approx -3.58, 0.22, 3.48$ に、3つの局所解が存在する。対応する関数値は、 $f(x) \approx -510.71, -211.40, -95.15$ であり、 $x \approx -3.58$ が最適解を与える。

結合係数行列の非対角成分 $a_{ij} (i \neq j)$ を 0.25、軌道数を $m = 3$ とした場合の変数 x の滞在頻度 (探索時間 $T = 100$ までの試行を 100 回行った平均) を図 1 の棒グラフで示す。ここでは、 x^i の初期値は -4.5 から 4.5 までの乱数とし、 y^i の初期値は力学的エネルギーの総和が十分大きくなるような乱数とした。本論文を通して、以後断りがない限り y^i の初期値はこのように設定する。また、保存則をなるべく保つために 4 次のシンプレクティック数値解法⁽¹¹⁾ (刻み幅 $\Delta t = 0.001$) を用いた。

図 1 変数 x の滞在頻度 (棒グラフ)
(手法 A, $\mu = 0$, 例題 I)

Fig.1. Visiting frequency of trajectories (Method A without dissipation, Function I).

図 1 の結果から、保存系における力学的軌道を用いた探索では、目的関数値の小さいところに軌道が滞在しやすい傾向がみられる。これが文献(8)(9)で述べられている運動の偏りである。

(3.2) 力学系が散逸的である場合 次に、減衰項を導入した場合の軌道の振る舞いを調べる。先程と同様に例題 I および 3 軌道を用い、 $\mu = 0.1$ とすることで散逸を導入する。この設定のもとで、相互作用がない場合とある場合との簡単な比較を行う。散逸系の数値計算法としては、4 次の Runge-Kutta 法 (刻み幅 Δt) を用いる。

図 2, 3 に相互作用がない場合 ($a_{ij} (i \neq j) = 0$) およびある場合 ($a_{ij} (i \neq j) = 0.4$) の軌道の振る舞いの一例を示す。ただし、 $\Delta t = 0.01$ とした。相互作用がない場合、この例では 3 軌道のうち 2 軌道が最適解でない局所解に収束し、残りの 1 軌道が最適解に収束した。一方、相互作用がある場合には、複雑な軌道を描き局所解から脱出しながら、3 軌道ともすべて最適解に収束した。

4. 散逸系を用いた大域的最適化における相互作用の効果

(4.1) 多峰性の非線形最適化問題への適用例 ここでは、図 1 で示したような性質が散逸を導入して収束解を求めた結果に対しても引き続き有効であることを定量的に示すため、例題 I と

[例題 II]⁽¹⁰⁾

$$f(x) = \frac{\pi}{2} \left[10 \sin^2(\pi z_1) + (z_1 - 1)^2 \times \{ 1 + 10 \sin^2(\pi z_2) \} + (z_2 - 1)^2 \right] \cdot (5)$$

$$\text{ただし、} \quad z_k = 1 + 10(x_k - 0.25), \quad k = 1, 2$$

(大域的最適解は $x_1 = x_2 = 0.25$, グラフを図 4 に示す) を取り上げ、手法 A を用いた実験を行う。

以下の実験において、例題 I の場合、 $\mu = 0.1, a_{ij} (i \neq j) = 0.4$ (相互作用がある場合)、 $\Delta t = 0.01, T = 100$ とし、 x^i の初期値には -4.5 から 4.5 までの乱数を用いた。例題 II の場合は、 $\mu = 0.5, a_{ij} (i \neq j) = 0.1$ (相互作用があ

図2 相互作用がない場合の3軌道の振る舞い
(手法 A, 例題 I)

Fig. 2. Three trajectories without interaction
(Method A, Function I).

図3 相互作用がある場合の3軌道の振る舞い
(手法 A, 例題 I)

Fig. 3. Three trajectories with interaction (Method
A, Function I).

図4 例題 II
Fig. 4. Function II.

る場合), $\Delta t = 0.002$, 探索時間 $T = 20$ とし, x^i の初期値には 0 から 1 までの乱数を用い, y^i の初期値は 0 とした. この設定のもとで, 探索終了時刻 $t = T$ の時点で m 軌道のうち 1 つでも最適解に収束していれば (すなわち, 最良の収束値が最適解となっていれば) 最適解の探索 (1 試行) が成功したと評価する実験を行う. 相互作用の有無および軌道数 m を変化させた各場合の成功率 (成功した試行数の全

図5 大域的最適解探索の成功率
(手法 A, 例題 I)

Fig. 5. Success rate of global optimization (Method
A, Function I).

図6 大域的最適解探索の成功率
(手法 A, 例題 II)

Fig. 6. Success rate of global optimization (Method
A, Function II).

試行回数に対する割合) を図 5 (例題 I) と図 6 (例題 II) に示す. 図中, 実線は相互作用がある場合, 破線は相互作用がない場合 ($a_{ij} (i \neq j) = 0$) の成功率を示す. ここで, 軌道数 m の各場合に対して, m に試行回数を乗じた値が概ね 6000 となるように試行回数を定めた. 以後, 試行回数はこのように設定する. なお, 本論文中的各例題に対して, 異なる乱数初期値を用いた結果を比較することによって, 設定した試行回数が妥当であることを確認した. 実験の結果, 例題 I, II のいずれにおいても, 相互作用を持たせることによって, 単なる並列探索よりも成功率が向上していることがわかる.

次に, 軌道数 m に対して大域的最適解に収束した軌道の占める割合 $\tau(m)$ を図 7 (例題 I) と図 8 (例題 II) に示す (m 個の軌道のうち大域的最適解に収束した軌道数の平均 γ を用いて, $\tau(m) = 100 \cdot \gamma / m$ と定義している). なお, 相互作用がない場合には, 大域的最適解に収束した軌道の占める割合は原理的に軌道数にかかわらず一定である. 相互作用がある場合には, 単に最良の軌道が最適解に向かい易くなるだけでなく, より多くの軌道が最適解に向かい易くなっていることがわかる.

〈4・2〉 相互作用の効果の一般性に関する検討 次に, 例題 I, II に対する実験結果の一般性を調べる試みとして,

図7 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 A, 例題 I)

Fig.7. Rate of trajectories converging to the global optimum (Method A, Function I).

図10 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 A, 例題 III - a)

Fig.10. Rate of trajectories converging to the global optimum (Method A, Function III - a).

図8 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 A, 例題 II)

Fig.8. Rate of trajectories converging to the global optimum (Method A, Function II).

図11 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 A, 例題 III - b)

Fig.11. Rate of trajectories converging to the global optimum (Method A, Function III - b).

図9 例題 III

Fig.9. Function III.

図12 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 A, 例題 III - c)

Fig.12. Rate of trajectories converging to the global optimum (Method A, Function III - c).

まず、局所解を2つしか持たない単純な例題
[例題 III]

$$f(x) = \frac{1}{2}(x^4 - 16x^2 + \alpha x) \dots\dots\dots (6)$$

(図9)を用いて検討を進める。なお、式(6)において、 $\alpha = 0$ のときを例題 III - a、 $\alpha = 5$ のときを例題 III - b、 $\alpha = 15$ のときを例題 III - c とする。例題 III - a では、局所解の両方が最適解であるが、便宜的にその一方のみを最適解とみなす。また、例題 III - b、III - c では、 α の値を大きくするにつれて、最適解と局所解の目的関数値の差が大きくなる。

実験にあたっては、 $\mu = 0.1$ 、 $\Delta t = 0.01$ 、 $T = 100$ とし、 x^i の初期値には -5.0 から 5.0 までの乱数を用いた。また、 a_{ij} ($i \neq j$) の値は、 0 から 0.6 の範囲で変化させた。各例題に対して、大域的最適解に収束した軌道の占める割合を求めた結果を図10から図12に示す。

例題 III - a の場合には、軌道数や結合係数行列の非対角成分の値が変化しても、関数の対称性から原理的に50%の軌道が大域的最適解に収束する。このことは、図10で示した結果から確認することができ、設定した試行回数が妥

図 13 例題 IV
Fig. 13. Function IV.

図 14 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 A, 例題 IV - a)

Fig. 14. Rate of trajectories converging to the global optimum (Method A, Function IV - a).

当であることがわかる。例題 III - b では、相互作用がない場合よりも相互作用がある場合の方が、最適解に収束する軌道の占める割合が大きくなっていることから、相互作用による最適値探索能力の向上が見られる。例題 III - c についても、例題 III - b と同様な傾向が見られるが、例題 III - b の場合よりも、相互作用がない場合とある場合との差が顕著になっている。これは、最適解と局所解における目的関数値の差が大きくなったことを反映しているものと考えられる。

次に、例題 III の狭い探索領域の両端で目的関数値が急増していることの影響を取り除く目的で、周期的な関数 [例題 IV]

$$f(x) = -30\{(1 + \cos(\omega z))\alpha \dots\dots\dots (7)$$

$$\text{ただし, } z = \left\{ \left(x + \frac{\pi}{\omega} \right) \bmod \frac{4\pi}{\omega} \right\} - \frac{\pi}{\omega}$$

($\omega = 1.25$, グラフを図 13 に示す) を導入する。なお、式 (7) において、 $\alpha = 1$ のときを例題 IV - a, $\alpha = \exp(-z^2/50)$ のときを例題 IV - b, $\alpha = \exp(-z^2/20)$ のときを例題 IV - c とする。

実験にあたっては、例題 III の場合と同様に、 $\mu = 0.1$, $\Delta t = 0.01$, $T = 100$ とし、 x^i の初期値には -0.8π から 2.4π までの乱数を用いた。各例題に対して、大域的最適解に収束した軌道の占める割合を求めた結果を図 14 から図 16 に示す。

図 15 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 A, 例題 IV - b)

Fig. 15. Rate of trajectories converging to the global optimum (Method A, Function IV - b).

図 16 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 A, 例題 IV - c)

Fig. 16. Rate of trajectories converging to the global optimum (Method A, Function IV - c).

図 15, 16 より、周期的な関数を用いても局所解と最適解との目的関数値の差を反映した結果が得られた。例題 III, IV に対する結果は、例題 I, II で観測された性質の一般性を支持する結果となっている。

〈4・3〉手法 B における相互作用の効果 文献 (5) では、相互作用によって期待される力学的振る舞いを実際に各軌道が行っているかどうかの定量的な検討はなされていない。そこで、手法 B における各軌道の性質に関する検討を行い、手法 A との比較を行う。

まず例題 II を用い、文献 (5) のとおりに、 $M = 1$, $K = 100$, $L = 0.1$, $\mu = 0.5$, $\Delta t = 0.002$, $T = 20$ とし、 x^i の初期値には 0 から 1 までの乱数を用い、 y^i の初期値は 0 とした。これまでと同じ基準での大域的最適解探索の成功率を図 17 に、大域的最適解に収束した軌道の占める割合を図 18 に示す。図 17 では、文献 (5) の結果が概ね再現されている。

図 18 より、軌道数が増えるにしたがって、各軌道が最適解に集まりやすくなっていることがわかる。これは、手法 B で期待している効果ではないように考えられるが、結果的には単なる並列探索よりも成功率が向上している。この場合、手法 A について観測された、より多くの軌道が最適解に向かい易くなる効果が混在し、それが手法 B で期待し

図 17 大域的最適解探索の成功率
(手法 B, 例題 II)
Fig.17. Success rate of global optimization
(Method B, Function II).

図 19 大域的最適解探索の成功率
(手法 B, 例題 IV - c)
Fig.19. Success rate of global optimization
(Method B, Function IV - c).

図 18 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 B, 例題 II)
Fig.18. Rate of trajectories converging to the
global optimum (Method B, Function II).

図 20 大域的最適解に収束した軌道の占める割合
(手法 B, 例題 IV - c)
Fig.20. Rate of trajectories converging to the
global optimum (Method B, Function IV - c).

ている線形バネの効果よりも優越している可能性がある。
図 6 と図 17 を比べた場合、相互作用がない場合の成功率は原理的に等しいが、相互作用がある場合においては、手法 B の方が若干成功率が低くなっている。ここでは、線形バネによる相互作用の効果が期待通りに機能していないことが影響している可能性がある。

次に、例題 IV - c を用いる。実験にあたっては、 $M = 1$ 、 $K = 0.30$ 、 $L = 8$ 、 $\mu = 0.1$ 、 $\Delta t = 0.01$ 、 $T = 100$ とし、 x^i の初期値には -0.8π から 2.4π までの乱数を用いた。この場合の大域的最適解探索の成功率を図 19 に、大域的最適解に収束した軌道の占める割合を図 20 に示す。

ここで取り上げた例題が簡単であるため図 19 では顕著に表れていないが、相互作用の一定の効果が認められる。大域的最適解に収束した軌道の占める割合に関しては、これまでの結果と異なり、線形バネの働きにより同一の解に収束する可能性を低くするという、手法 B で本来期待している効果が認められる。なお、詳細な結果は割愛するが例題 III に対しても同様の効果が認められた。

5. む す び

本論文では、2 階常微分方程式の結合系の軌道を用いる 2 つの大域的最適化手法を取り上げ、系統的・定量的な比較検討に基づいて、各手法における相互作用の効果の特徴

を解析した。
手法 A では、軌道群中のより多くの軌道が大域的最適解に向かわせる効果を期待して相互作用を導入しており、その効果は散逸を導入して収束解を求めた結果に対しても引き続き有効であることを定量的に示した。一方手法 B では、軌道を分散させることによって最良の軌道が大域的最適解に向かわせることを期待して相互作用を導入しており、そのような効果が確認された問題もあったが、問題やパラメータの設定によっては手法 A の相互作用のような効果の混在を示唆する結果も得られた。そのような場合における各効果の分離は今後の検討課題である。

このように単に相互作用を導入することで最適化能力が向上するといっても、その力学系の振る舞いは様々であり、目的にあった力学系を設計するために相互作用を導入する際には、その効果に対する検討が十分に必要である。また、本論文で取り上げた手法以外にも、軌道間の相互作用によって性能が向上する最適化手法が報告されており⁽⁶⁾⁽⁷⁾、今後本論文の観点、およびさらに広い観点から統一的な検討を行うことは、個々の最適化手法の特性をよく理解し改良していく上で重要である。

(平成 12 年 2 月 28 日受付, 同 12 年 8 月 14 日再受付)

文 献

- (1) 藤田 得光, 安田 恵一郎, 横山 隆一: “散逸系カオスを用いた大域的最適化手法,” 電子情報通信学会論文誌, Vol.J77-A, No.6, pp.881-889 (1994)
- (2) 菅田 裕之, 志水 清孝: “疑似最急降下法におけるカオスを用いた大域的最適化手法,” 電子情報通信学会論文誌, Vol.J79-A, No.3, pp.658-668 (1996)
- (3) 太田 正哉, 西村 将典, 安田 光一: “カオスを用いた最小値探索手法の実験的考察,” 電子情報通信学会技術研究報告, NLP96-135, NC96-89, pp.87-93 (1997)
- (4) 徳田 功, 小野寺 浩二, 徳永 隆治, 合原 一幸, 長島 知正: “最適化問題を解くカオスの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)
- (5) 菅田 裕之, 萩野 卓朗, 志水 清孝: “多軌道型慣性系におけるカオスを用いた大域的最適化手法,” 電子情報通信学会論文誌, Vol.J79-A, No.10, pp.1700-1707 (1996)
- (6) 村野 貴広, 藤田 得光, 渡辺 隆男, 安田 恵一郎: “多軌道型ダイナミック・トンネリング・アルゴリズムの構成,” 電気学会論文誌, Vol.118-C, No.4, pp.578-584 (1998)
- (7) 中村 英也, 太田 正哉: “2組のカオスの最小値探索法の並列結合手法,” 平成10年電気関係学会関西支部連合大会, G14-20 (1998)
- (8) 水上 雅人, 平野 元久, 新上 和正: “ハミルトニアンアルゴリズムを用いた多自由度光軸調整法,” 計測自動制御学会論文集, Vol.33, No.7, pp.709-715 (1997)
- (9) 新上 和正: “高次元アルゴリズム — 最適化問題を解く1つの方法 —,” 日本ファジィ学会誌, Vol.11, No.3, pp.382-395 (1999)
- (10) A.V. Levy and A. Montalvo: “The tunneling algorithm for the global minimization of functions,” SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol.6, No.1, pp.15-29 (1985)
- (11) 吉田 春夫: “シンプレクティック数値解法,” 数理科学, No.384, pp.37-46 (1995)

森 川 貴 展 (非会員) 1975 年生. 1998 年 3 月 関西大学工学部電気工学科卒業. 2000 年 3 月 同大学大学院工学研究科博士課程前期課程修了. 在学中, 力学系軌道を用いた最適化手法に関する研究に従事. 現在, 松下電器産業(株)勤務.

伊 藤 秀 隆 (正員) 1994 年京都大学大学院博士後期課程修了. 同年, 関西大学工学部助手. 現在, 同専任講師. 京都大学博士(工学). 非線形力学現象, 知識情報処理, 画像処理などに関する研究に従事. 電子情報通信学会, 人工知能学会, 計測自動制御学会各会員.

隈 元 昭 (正員) 1971 年京都大学大学院修士課程修了. 同年, 関西大学工学部助手. 現在, 同教授. 京都大学工学博士. 知識情報処理, ネットワーク情報処理, 画像処理などに関する研究に従事. 電子情報通信学会, システム制御情報学会, 計測自動制御学会各会員.