非線形散逸力学系の内部状態モデルを用いた制約条件付大域的最適化手法*

岡本 卓[†]・相吉英太郎[†]

Constrained Global Optimization Methods by Using Inner State Models with Nonlinear Dissipative Dynamics*

Takashi OKAMOTO[†] and Eitaro AIYOSHI[†]

Optimization methods by using chaos dynamics are interesting as a class of global optimization methods by which the global minimum can be obtained without trapping in local minima. The chaos dynamics are classified into discretized gradient models and continuous dissipative models with a nonlinear damping term. In this paper, two types of constrained optimization problems are considered in order to present nonlinear dissipative dynamics embedded in their constraints. One of types of the constraints is upper and lower bounds on each variable, and the other type is a simplex. For the each type of constraints, the inner state model with nonlinear dissipative dynamics w.r.t. inner states is introduced, which is composed of a nonlinear inertial model with the gradient and a nonlinear output function. As the nonlinear dissipative dynamics, Fujita-Yasuda's Model[6] and Tani's Model[7] are adopted. Especially, their revised models are proposed newly for the simplex type. The numerical simulations for a few constrained optimization problems demonstrate effectiveness of presented constrained global optimization methods.

1. はじめに

最適化問題の目的関数が多峰性関数である場合、その局所的最適解に停留せずに、大域的最適解を得る大域的最適化手法の開発が長年の研究テーマとなっており、とくに近年では、カオスニューラルネットワーク [1] をはじめとして、カオス力学系を用いた大域的最適化手法 [2–5] が注目されている。また、現実的な最適化問題を考えた場合、その制約条件を満足しつつ大域の探索が行える手法の開発が望まれる。

本論文では、軌道法と称する連続的最適化手法のうち、確定的な力学モデルである非線形の散逸項をもつ連続時間散逸系モデルによる最適化手法に注目し、このモデルによるカオス軌道を有界な制約領域に閉じ込めることによって、この制約条件を満たしつつ多峰性関数の大域的最適解を探索する制約条件付大域的最適化手法を提案する。具体的には、カオス軌道を閉じ込める比較的単純な制約条件として、上下限制約とシンプレックス制約を考

え、これらの制約条件を有する問題に対して、内部状態変数に関する非線形散逸系モデルとその内部状態を引数とする非線形出力関数とから構成される、いわゆる内部状態表現モデルを提案する。とくに、この非線形散逸系モデルとして、制約条件が課せられていないもとでカオスの軌道を生成するために、藤田ら [6] および谷 [7] によって提案されたモデルを基本的な非線形散逸系モデルとして採用する。なお、上下限制約問題に対しては、これらのモデルを内部状態表現モデルへ直接的に適用することが可能であるのに対して、シンプレックス制約問題への直接的な適用は本質的に困難である。そこで本論文では、シンプレックス上の局所解停留条件を陽に考慮した修正散逸系モデルを提案する。シミュレーションでは、多峰性関数最適化問題のベンチマークである Levy-Montalvo 関数と Rastrigin 関数を採用し、これらの関数の上下限制約条件やシンプレックス制約条件上の大域的最適解に対する探索性能について検証する。

2. 制約条件に束縛された連続時間慣性系モデルとその内部状態表現

一般に、制約条件付最適化問題に対して、慣性系モデルをそのまま適用すると、得られた軌道が直ちに制約条

* 原稿受付 2003 年 3 月 31 日

[†] 慶應義塾大学 理工学研究科 Graduate School of Science and Technology, Keio University; 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa 223-8522, JAPAN
Key Words: global optimization, inertial system model, constraint conditions, simplex, annealing.

件を侵害してしまう．そこでこの章では，2種類のタイプの制約条件を侵害しないような慣性系モデルとその内部状態表現モデルを導出する．なお以下では，特に記さない限り， $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T \in R^n$ ，目的関数 $E: R^n \rightarrow R^1$ は連続微分可能，目的関数の勾配 $\nabla E(\mathbf{x})$ は縦ベクトルとし，また $i = 1, \dots, n$ とする．

2.1 上下限制約に束縛したモデル

上下限制約付最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{x}) \quad (1a)$$

$$\text{subj. to } p_i \leq x_i \leq q_i \quad (1b)$$

を考える．なお，最適解が上下限制約条件 (1b) 式の境界上にある場合には，たとえば

$$W_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{x_i - p_i} + \frac{1}{q_i - x_i} \right), \quad r > 0 \quad (2)$$

のような障壁関数を関数 E に付加することによって，制約条件の内部に最適解を摂動させた代替問題を考えればよいので，一般性を失うことなく，以下の仮定をおくことにする．

(仮定 1) 問題 (1) 式の局所的最適解は，制約条件 (1b) 式の内部，すなわち

$$p_i < x_i < q_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (3)$$

を満たす領域に存在する．

(1b) 式を考慮せずに単に E を最小化する畳み込み積分型勾配系モデル

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}(\tau)) d\tau \quad (4)$$

から得られる軌道は，直ちに (1b) 式の上下限制約領域を侵害してしまう．そこで，この軌道を (1b) 式の制約条件に束縛するために，(1b) 式の境界に近づくほど探索点の速度を縮退させるような可変計量行列 [8]

$$M(\mathbf{x}) = \text{diag}[(q_i - p_i)/(x_i - p_i)(q_i - x_i)] \quad (5)$$

の逆行列 $M^{-1}(\mathbf{x})$ を (4) 式の右辺に施したモデル

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -c M^{-1}(\mathbf{x}(t)) \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}(\tau)) d\tau \quad (6)$$

を考える．これを成分表示すると

$$\begin{aligned} \frac{dx_i(t)}{dt} = & -c \frac{(x_i(t) - p_i)(q_i - x_i(t))}{q_i - p_i} \\ & \times \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \frac{\partial E(\mathbf{x}(\tau))}{\partial x_i} d\tau \quad (7) \end{aligned}$$

となる．ここで，(7) 式を無制約空間の変数 $\mathbf{u}$ を導入した内部状態表現に書き換える．変数 $\mathbf{x}$ を出力量，それを与える内部状態量を $\mathbf{u} = [u_1, \dots, u_n]^T$ とし，両者の関係が

$$x_i = f(u_i) \quad (8)$$

で書けるとする． $x_i = x_i(t)$ ， $u_i = u_i(t)$ とおいて，(8) 式の両辺を t で微分すると

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{df(u_i(t))}{du_i} \frac{du_i(t)}{dt} \quad (9)$$

となるので，(7) 式と比較すると

$$\frac{df(u_i)}{du_i} = \frac{dx_i}{du_i} = \frac{(x_i - p_i)(q_i - x_i)}{q_i - p_i} \quad (10a)$$

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \frac{\partial E(\mathbf{x}(\tau))}{\partial x_i} d\tau \quad (10b)$$

となる．微分方程式 (10a) 式の変数分離形から

$$x_i = f(u_i) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i)}{1 + \exp(-u_i)} \quad (11)$$

が，(10b) 式の両辺微分から

$$\frac{d^2 u_i(t)}{dt^2} = -a \frac{du_i(t)}{dt} - c \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (12)$$

すなわち，(7) 式と等価な内部状態表現モデルとして

$$m \frac{d^2 u_i(t)}{dt^2} + \frac{du_i(t)}{dt} = -\epsilon \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (13a)$$

$$x_i(t) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i)}{1 + \exp(-u_i)} \quad (13b)$$

が得られる．ただし， $m = 1/a$ ， $\epsilon = c/a$ とする．本論文では，この (13) 式のモデルを慣性系可変計量モデルの内部状態表現モデルと称する．ここで，すべての i において $p_i = 0$ ， $q_i = 1$ とし，目的関数 $E(\mathbf{x})$ を多変数 2 次関数にとると，メモリー付ニューロンを用いたニューラルネットワークが演算回路として実現される [9]．

2.2 シンプレックス制約問題に束縛したモデル

正規化等式・非負制約条件付最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{x}) \quad (14a)$$

$$\text{subj. to } \sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad (14b)$$

$$x_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (14c)$$

を考える．ここで，制約条件 (14b) 式，(14c) 式を満たす領域はシンプレックスとよばれる．なお，最適解がシンプレックス制約条件 (14c) 式の境界上にある場合には，たとえば

$$W_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^n \frac{1}{x_i}, \quad r > 0 \quad (15)$$

のような障壁関数を関数 E に付加することによって，(14c) 式の制約領域の内部に最適解を摂動させた代替問題を考えればよいので，一般性を失うことなく，以下の仮定をおくことにする．

(仮定 2) 問題 (14) 式の局所的最適解は，制約条件 (14c) 式の内部，すなわち

$$x_i > 0, i = 1, \dots, n \quad (16)$$

を満たす領域に存在する。

この最適化問題を解くために、前節と同様に (4) 式の畳み込み積分型勾配系モデルから得られる軌道をこのシンプレックスに束縛するために、(14c) 式の境界に近づくほど探索点の速度を縮退させるような可変計量行列

$$M_0(\mathbf{x}) = \text{diag}[1/x_i] \quad (17)$$

の逆行列 $M_0^{-1}(\mathbf{x}) = \text{diag}[x_i]$ を (4) 式に施したもとで、(14b) 式の等式の 1 行 n 列係数行列 $A = (1, \dots, 1)$ の零空間に速度方向を射影する、可変計量射影行列 [8]

$$\begin{aligned} P_A^{M_0(\mathbf{x})} &= I - M_0(\mathbf{x})^{-1} A^T (A M_0^{-1}(\mathbf{x}) A^T)^{-1} A \\ &= I - \begin{bmatrix} x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n & \cdots & x_n \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (18)$$

を考え、これを (4) 式に施した慣性系可変計量射影モデル

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} &= \\ &-P_A^{M_0(\mathbf{x}(t))} M_0^{-1}(\mathbf{x}(t)) c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}(\tau)) d\tau \end{aligned} \quad (19)$$

を考える。これを成分表現すると

$$\begin{aligned} \frac{dx_i(t)}{dt} &= - \left\{ x_i(t)(1-x_i(t))c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \frac{\partial E(\mathbf{x}(\tau))}{\partial x_i} d\tau \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (-x_i(t)x_j(t))c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \frac{\partial E(\mathbf{x}(\tau))}{\partial x_j} d\tau \right\} \end{aligned} \quad (20)$$

となる。ここで、前節と同様に (20) 式を内部状態表現へ書き換えることを考える。変数 $\mathbf{x}$ を出力量、それを与える内部状態量を $\mathbf{u} = [u_1, \dots, u_n]^T$ とし、両者の関係が

$$x_i = f_i(\mathbf{u}) = f_i(u_1, \dots, u_n) \quad (21)$$

で書けるとする。(8) 式と異なり f_i の変換は u_i のみではないことに注意されたい。ここで、 $x_i = x_i(t)$, $u_i = u_i(t)$ において、(21) 式の両辺を t で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{dx_i(t)}{dt} &= \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(\mathbf{u}(t))}{\partial u_j} \frac{du_j(t)}{dt} \\ &= \frac{\partial f_i(\mathbf{u}(t))}{\partial u_i} \frac{du_i(t)}{dt} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{\partial f_i(\mathbf{u}(t))}{\partial u_j} \frac{du_j(t)}{dt} \end{aligned} \quad (22)$$

であるから、これを (20) 式と比較して、

$$\frac{\partial x_i}{\partial u_j} = \frac{\partial f_i(\mathbf{u})}{\partial u_j} = \begin{cases} x_i(1-x_i) & i=j \\ -x_i x_j & i \neq j \end{cases} \quad (23a)$$

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \frac{\partial E(\mathbf{x}(\tau))}{\partial x_i} d\tau \quad (23b)$$

を得る。(23a) 式を満たしかつ (14b) 式を満たす x_i を与える関数 f_i は

$$x_i = f_i(\mathbf{u}) = \exp u_i / \sum_{j=1}^n \exp u_j \quad (24)$$

で与えられる [10]。前節と同様に (23b) 式から (12) 式を得るので、(12) 式と (24) 式より、(23) 式の内部状態表現モデルとして、

$$m \frac{d^2 u_i(t)}{dt^2} + \frac{du_i(t)}{dt} = -\epsilon \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (25a)$$

$$x_i(t) = \exp u_i(t) / \sum_{j=1}^n \exp u_j(t) \quad (25b)$$

が得られる。ただし、 $m = 1/a$, $\epsilon = c/a$ とする。すなわち (25) 式のような内部状態表現とその非線形変換により、慣性系の軌道をシンプレックスに閉じ込めることができる。このモデルを慣性系可変計量射影モデルの内部状態表現モデルと称する。

3. 非線形連続散逸系モデルを用いた制約条件付大域的最適化手法

3.1 非線形連続散逸系モデル

前章で導出した慣性系モデルは、勾配法に慣性項を加えることで、「勾配法で局所最適解に停留するような初期点からでも、適切な初速度を与えることで勢いをつけて局所解を脱出する」というアイデアによって考え出された手法であり、大域的最適解を得る自由度を勾配法より増やしたモデルであるが、依然として、初速度も含めた初期状態依存性という問題が残っている [11]。そこで、単に初速度を利用して局所解を脱出するのではなく、慣性系モデル

$$m \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} + \frac{dx_i(t)}{dt} = -\epsilon \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (26)$$

の散逸項 $dx_i(t)/dt$ を非線形化することで連続散逸系カオス軌道を発生させ、初期条件に依存することなく能動的に局所解を脱出させる非線形振動モデルが、無制約条件問題に対して藤田ら [6] と谷 [7] によって別々に提案された。

藤田ら [6] は、(26) 式の散逸項を、探索点の速度 $\dot{\mathbf{x}}(t)$ とパラメータ d_0 に依存した非線形抵抗

$$\xi(\dot{\mathbf{x}}(t), d_0) = d_1 \left\{ \dot{x}_i(t) - d_0 \dot{x}_i(t) \exp \left(-\frac{\|\dot{\mathbf{x}}(t)\|}{d_2 d_0} \right) \right\} \quad (27)$$

に置き換えた非線形モデルを提案している。以降本論文では、このモデルを藤田・安田モデルと称する。非線形抵抗 (27) 式は、探索点の速度ノルム $\|\dot{\mathbf{x}}(t)\|$ が、極小点に漸近して小さくなると、負抵抗になってエネルギーを

受け取ることで速度が増して極小点への収束構造を崩すように働き、速度が速いときには正抵抗として働く。また、その非線形性は、 d_0 が大きいほど (27) 式が負抵抗として働くための $\|\dot{\mathbf{x}}(t)\|$ の範囲が大きくなる。よって藤田・安田モデルでは、 d_0 の初期値として十分大きな $d_0(0) = d_{0\max}$ をとり、 d_0 を探索終了時間 $t_{\max}$ と現在時刻 t で決まる時変パラメータ

$$d_0(t) = d_{0\max} \left(1 - \frac{t}{t_{\max}} \right) \quad (28)$$

にして徐々に減少させていくことで、探索点の軌道をカオスの軌道から局所解への収束軌道へと移行させる、いわゆる「カオスアニーリング」が可能である。

谷 [7] は、(26) 式の散逸項を、探索点の速度 $\dot{x}_i(t)$ とパラメータ ω に依存した非線形抵抗

$$\xi(\dot{x}_i(t), \omega t) = \{d_0 \sin(\omega t) + d_1\} \dot{x}_i(t) + d_2 \dot{x}_i^2(t) \operatorname{sgn}\{\dot{x}_i(t)\} \quad (29)$$

に置き換えた非線形振動モデルを提案している。以降本論文では、この非線形振動モデルを谷モデルと称する。非線形抵抗 (29) 式の第一項は、角速度 ω で周期的に正抵抗と負抵抗になる時変線形抵抗、第二項は解軌道の発展を有界にするための 2 次の正抵抗である。谷モデルにおいて局所解である平衡点は、角速度 ω で周期的に、非線形抵抗一項が正抵抗として働くときは安定化し、負抵抗として働くときは不安定化し、それにもなって軌道は局所解間をカオス的に遍歴する。谷モデルは、あらかじめ大域的最適解での $E(\mathbf{x})$ の値がわかっている場合（たとえば、誤差関数の最小化）、局所解間を遍歴している間に $E(\mathbf{x})$ がその値になった場合に停止するなどの終了判定により、大域的最適化に利用することが可能である。

3.2 上下制約条件問題に対する適用

この節では、(1) 式の上下制約条件問題大域的最適解を探索するために、慣性系モデル (13) 式へ藤田・安田モデルと谷モデルを応用することを考える。上下制約条件問題 (1) 式の局所解停留条件は、仮定 1 のもとで無制約問題の場合と同じく $\partial E(\mathbf{x}) / \partial x_i = 0$ であるから、(13) 式の内部状態変数 $\mathbf{u}$ の空間で $du_i(t)/dt = 0$ となれば局所解へ停留する。よって、まず、藤田・安田モデルを応用することを考えると、 $\|\dot{\mathbf{u}}\|$ が停留点に漸近して小さくなるとエネルギーを与えるように働いて速度を得るよう、藤田・安田モデルの非線形抵抗 (27) 式の $x_i(t)$ 、 $\mathbf{x}(t)$ を $u_i(t)$ 、 $\mathbf{u}(t)$ にそのまま置き換えた非線形抵抗

$$\xi(\dot{\mathbf{u}}(t), d_0) = d_1 \left\{ \dot{u}_i(t) - d_0 \dot{u}_i(t) \exp \left(-\frac{\|\dot{\mathbf{u}}(t)\|}{d_2 d_0} \right) \right\} \quad (30)$$

を (13a) 式の散逸項と置き換えた非線形モデルを考えることができる。

つぎに、谷モデルを応用することを考えると、 $\mathbf{u}$ の空間での停留点が、角速度 ω で安定・不安定を引き起こす

ように、谷モデルの非線形抵抗 (29) 式の $x_i(t)$ を $u_i(t)$ にそのまま置き換えた非線形抵抗

$$\xi(\dot{u}_i(t), \omega t) = \{d_0 \sin(\omega t) + d_1\} \dot{u}_i(t) + d_2 \dot{u}_i^2(t) \operatorname{sgn}\{\dot{u}_i(t)\} \quad (31)$$

を (13a) 式の散逸項と置き換えた非線形モデルを考えることができる。これらの非線形モデルを用いて、無制約問題の場合と同じく制約のない $\mathbf{u}$ の空間で連続非線形振動を発生させ、これを (13b) 式の変数変換を用いて上下制限制約に閉じ込めることにより、制約領域を侵害しない大域的最適化が実現できることが期待できる。

3.3 シンプレックス制約問題に対する適用

この節では、シンプレックス制約問題の慣性系モデル (25) 式へ藤田・安田モデルと谷モデルを応用することを考える。シンプレックス制約問題 (14) 式の局所解停留条件は、Lagrange の未定乗数法から、仮定 2 のもとで $\partial E(\mathbf{x}) / \partial x_1 = \dots = \partial E(\mathbf{x}) / \partial x_n$ となるので、(25) 式の内部状態変数 $\mathbf{u}$ の空間で

$$\frac{du_1(t)}{dt} = \dots = \frac{du_n(t)}{dt} = \text{一定} \quad (32)$$

となれば局所解へ停留する。よって、まず、藤田・安田モデルを応用するために、 $\mathbf{u}$ の速度成分が同じ値になりそれらの標準偏差が小さくなったら $\mathbf{u}$ の空間での停留構造を崩すようにする。すなわち、前節の藤田・安田モデルの非線形抵抗 (27) 式の $\dot{\mathbf{x}}(t)$ を $\dot{\mathbf{u}}(t)$ で、 $\|\dot{\mathbf{x}}(t)\|$ を $\dot{\mathbf{u}}(t)$ の各成分の標準偏差

$$\bar{\mathbf{u}}(t) = \sum_{i=1}^n \frac{du_i(t)}{dt} / n$$

$$\sigma(\dot{\mathbf{u}}(t)) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (\bar{\mathbf{u}}(t) - \dot{u}_i(t))^2} \quad (33)$$

で置き換えた非線形抵抗

$$\xi(\dot{\mathbf{u}}(t), d_0) = d_1 \left\{ \dot{u}_i(t) - d_0 \dot{u}_i(t) \exp \left(-\frac{\sigma(\dot{\mathbf{u}}(t))}{d_2 d_0} \right) \right\} \quad (34)$$

を (25a) 式の散逸項と置き換えた非線形モデルを考える。本論文では、この非線形モデルを新たに修正藤田・安田モデルと称する。

つぎに、谷モデルを応用することを考えると、 $\mathbf{u}$ の空間での停留点が角速度 ω で安定・不安定を引き起こすように、前節の谷モデルの非線形抵抗 (29) 式の $x_i(t)$ を $u_i(t)$ に置き換え、さらに $\mathbf{u}$ の空間での停留構造を崩すように、(29) 式の第一項に $\dot{\mathbf{u}}(t)$ の平均から $\dot{u}_i(t)$ との差の符号化関数を乗じた非線形抵抗

$$\xi(\dot{\mathbf{u}}(t), \omega t) = -\operatorname{sgn}\{\bar{\mathbf{u}}(t) - \dot{u}_i(t)\} \{d_0 \sin(\omega t) + d_1\} \dot{u}_i(t) + d_2 \dot{u}_i^2(t) \operatorname{sgn}\{\dot{u}_i(t)\} \quad (35)$$

を(25a)式の散逸項と置き換えた非線形モデルを考える. 本論文では, この非線形モデルを新たに修正谷モデルと称する.

以上の非線形振動モデルを用いて, 上下限制約問題の場合と同じく, 制約のない $\mathbf{u}$ の空間で連続非線形振動を発生させ, この内部状態に関する非線形振動を(25b)式の変数変換を用いてシンプレックス制約に閉じ込めることにより, 制約領域を侵害しない大域的最適化が実現できるものと期待される.

4. シミュレーション

この章では, 上下限制約問題に対する藤田・安田モデルと谷モデル, シンプレックス制約問題に対する修正藤田・安田モデルと修正谷モデルの有効性を, いくつかのベンチマークでのシミュレーションを通して確認する. 上下限制約に関しては, すべての i について $p_i=0, q_i=1$ とした, 0-1上下限制約とする.

4.1 シミュレーション方法

シミュレーションでは, 32ビットマシンの一般的なC言語で, 離散化幅 $h=1.0 \times 10^{-5}$ の4次のRunge-Kutta法を用いて行う. この場合, 誤差のオーダーは $O(h^4)=10^{-20}$ 程度と見込め, 連続系のシミュレーションとしての誤差としては十分小さいものといえる. 各問題の初期点 $\mathbf{u}_i(0)$ はランダムに発生させ, $du_i(0)/dt=0.0$ とし, 特に記さない限り, 2.1節の(13a)式, 2.2節の(25a)式の m, ϵ は $m=0.5, \epsilon=1.0$ とし, (2)式, (15)式の r は $r=1.0 \times 10^4$ としてシミュレーションを行う.

ところで, シンプレックス制約の場合, 内部状態に関しては, 局所解停留時において, $du_1/dt=\dots=du_n/dt$ が成り立つだけで, 必ずしも $du_i/dt=0$ となるわけではない. したがって, 局所解停留時にそのままシミュレーションを続けると, u_i の値が発散する可能性がある. また, 局所解に停留していない場合でも, du_i/dt の値が一定の値になると, u_i の値が発散する可能性がある. そこで, (25)式のモデルにおける内部状態の発散抑制のため, $u_i(t) > 300$ となる場合には, (25b)式を満たす自明な解が

$$u_i(t) = \log(x_i(t)) \quad (36)$$

であり, かつ

$$\frac{du_i(t)}{dt} = \frac{dx_i(t)}{dt} \frac{1}{x_i(t)} \quad (37)$$

であることを利用して, その時刻における $x_i(t)$ と $dx_i(t)/dt$ の値を用いて, $u_i(t), du_i(t)/dt$ のリセットを行うものとする. なお, このような(36)式と(37)式によるリセットによって, $\mathbf{x}$ に関する軌道の位置と速度の連続性と制約条件の充足性は失われることはない.

4.2 上下限制約問題のシミュレーション

目的関数 $E(\mathbf{x})$ として, 4変数Levy-Montalvo関数に(2)式の障壁関数 W_1 を加えた関数

$$E(\mathbf{x}) = \frac{\pi}{4} \left[5.0 \sin^2(\pi y_1) + \sum_{i=1}^3 \left\{ (y_i - 1.0)^2 \times (1 + 5.0 \sin^2(\pi y_{i+1})) \right\} + (y_4 - 1.0) \right] + W_1(\mathbf{x}) \quad (38a)$$

$$y_i = 1.0 + 10.0(x_i - 0.5) \quad (38b)$$

を用い, $p_i=0, q_i=1$ とした0-1上下限制約付最適化問題に対する藤田・安田モデルおよび谷モデルを用いたシミュレーション結果を示す. なお, 0-1上下限制約内では, x_3 以外の値が0.5で x_3 の値が0.1刻みごとのすべての点が局所的最適解となり, このうち大域的最適解は, $E(0.5, 0.5, 0.5, 0.5) = 0.0008$ である.

まず, 藤田・安田モデルにおいて $d_0=8.0, d_1=1.0, d_2=2.0$ とし, $t=150$ まで探索点を遷移させる. 結果として, 時刻 $t=100 \sim 150$ の探索点の軌道 t vs $x_3(t)$ をFig. 1に示す. Fig. 1においては, x_3 の値が0.1刻みごとに, 振動が小さくなり停留しかけている様子が確認され, 得られた探索点の軌道は,

- (1) 0-1上下限制約を侵害しないで探索している,
- (2) 一度局所解に停留しかけても, 藤田・安田モデルの内部状態に関する速度のノルム $\|\dot{\mathbf{u}}\|$ の項の影響で, 局所解を脱出している,
- (3) 停留しかける局所解とその時間間隔が不規則である,

という特徴を持っていて, 内部状態に適用した藤田・安田モデルが上下限制約内での大域的探索能力を持っていることがわかる.

Fig. 1 Time series orbit of search points x_3 (t vs $x_3(t)$)

つぎに, 藤田・安田モデルを内部状態モデルに用いて発生させた非周期軌道を, (28)式によるアニーリングで最適解へ収束させた結果を示す. $d_{0\max}=8.0, d_1=1.0, d_2=2.0, t_{\max}=150$ としたときの結果をFig. 2に示す. Fig. 2を見ると, d_0 の減少に伴い, 越えることができる局所解間にある目的関数の障壁の大きさが小さく

Fig. 2 Annealing orbit of x_1 (t vs $x_1(t)$)

Table 1 Convergence rate in 4 dimension Levy-Montalvo function

$t_{\max}$	Convergence rate[%]
50	69
100	71
150	79
200	84

なることで、探索点の軌道がカオスの振動から局所解付近の探索へと変化し、最終的に局所解 (Fig. 2 では、大域的最適解) へ収束しており、0-1 上下制限約内での藤田・安田モデルのカオスアニーリングが有効であることがわかる。さらに、このアニーリング操作の大域的最適化性能を調べるために、アニーリングの探索時間を $t_{\max} = 50, 100, 150, 200$ とし、それぞれの $t_{\max}$ ごとにランダムな初期点で 100 回最適化を行い、そのうち何回大域的最適解へ収束したかを収束率として Table 1 に示す。 $t_{\max}$ が大きいほど大域的最適化性能が良くなっている。これは、 $t_{\max}$ が大きいほうが、より細かく d_0 を減少するため、越えることができる目的関数の障壁の減少が緩やかになるためと考えられる。この結果から、藤田・安田モデルは、無制約問題の場合 [6] と同様に、探索時間と最適解の精度の高さとの間にトレードオフがあるといえる。

最後にまったく同じ例題に対して、内部状態に関する谷モデルを、 $d_0 = 5.0, d_1 = -1.0, d_2 = 0.2, \omega = 0.8$ として適用したときの遷移結果について、時刻 $t = 0 \sim 150$ の探索点の軌道 t vs $x_1(t)$ を Fig. 3 に示す。得られた探索点の軌道は、

- (1) 0-1 上下制限約を侵害しないで探索している、
 - (2) 安定的に局所解付近を探索したのち不安定化して、制約領域全域を探索したあと再び安定化して次の局所解付近を探索するパターンを周期的に繰り返している、
 - (3) 停留しかける局所解が不規則である、
- という特徴を持っていて、やはり内部状態に関する谷モ

Fig. 3 Time series orbit of search points x_1 (t vs $x_1(t)$)

デルが上下制限約内での大域的探索能力を持っていることがわかる。

4.3 シンプレックス制約問題のシミュレーション

4 変数 Rastrigin 関数 [10] をスケールを変換し、符号を逆向きにした関数に (15) 式の障壁関数 W_0 を加えた関数

$$E(\mathbf{x}) = - \left\{ 10n + \sum_{i=1}^4 x_i^2 - 10 \cos(10\pi x_i) \right\} + W_0(\mathbf{x}) \quad (39)$$

を用いたシンプレックス制約付最適化問題に対し、修正藤田・安田モデルおよび修正谷モデルを用いた結果を示す。この関数のシンプレックス上での最適解は多数存在するが、そのうち大域的最適解は、任意の変数の添え字 i に対して、 $x_i = 0.700090, x_{j(j \neq i)} = 0.099970$ であり、4 個あるそれら最適解に対する関数値はすべて同じである。

修正藤田・安田モデルにおいて $d_0 = 8.0, d_1 = 1.0, d_2 = 2.0$ とし、 $t = 150$ まで探索点を遷移させ、時刻 $t = 100 \sim 150$ の部分の軌道 t vs $x_1(t)$ を Fig. 4 に示す。これより、上下制限約問題と同様の特徴があることが確認される。とくに、一度局所解に停留しかけても、修正藤田・安田モデル (34) 式の標準偏差 $\sigma(\dot{\mathbf{u}}(t))$ の項の影響により、局所解を脱出しており、シンプレックス制約上での大域的探索能力を持っていることがわかる。また、 $d_{0\max} = 8.0, d_1 = 1.0, d_2 = 2.0, t_{\max} = 100$ としたとき

Fig. 4 Time series orbit of search points x_1 (t vs $x_1(t)$)

のアンニーリング結果を Fig. 5 に示す. やはり上下制限約と同様に, アンニーリングが可能であることが確認され, 上下制限約問題の場合とまったく同じ条件で, 探索時間と収束率の関係を調べると Table 2 のような結果になる.

つぎに, 内部状態に関する修正谷モデルを $d_0=5.5, d_1=1.0, d_2=0.2, \omega=0.2$ として適用した結果, 得られた $t=0 \sim 150$ の探索点の軌道 t vs $x_4(t)$ を Fig. 6 に示す. やはり得られた探索点の軌道は, 上下制限約問題の場合と同様, シンプレックス制約を侵害せず, 安定・不安定のパターンを周期的に繰り返しながら, 局所解を遍歴しており, 修正谷モデルがシンプレックス制約内での大域的探索能力を持っていることがわかる.

念のため (38a) 式の $\sum_{i=1}^3$ を $\sum_{i=1}^{10}$ に置き換えた障壁関数付 10 変数 Levy-Montalvo 関数に対して, シンプレックス上の大域的最適解を探索した結果に言及しておく. な

Fig. 5 Annealing orbit of x_1 (t vs $x_1(t)$)

Table 2 Convergence rate in 4 dimension deformation Rastrigin function

$t_{\max}$	Convergence rate[%]
50	64
100	81
150	90
200	84

Fig. 6 Time series orbit of search points x_4 (t vs $x_4(t)$)

お, この場合の大域的最適解は $x_i=0.1, i=1, \dots, n$ である. 内部状態に関する修正藤田・安田モデルにおいて, $d_{0\max}=8.0, d_1=1.0, d_2=1.0, t_{\max}=300$ としたアンニーリング操作を, ランダムに選んだ初期点から 100 回行った結果, 35%の確率で大域的最適解への収束が見られた. この値自体は必ずしも高い収束率とはいえないが, 10 変数空間のシンプレックス上の大域的探索であることを考慮すれば, それなりの有効性があると考えられる. さらに, 内部状態に関する修正谷モデルを $d_0=4.0, d_1=1.0, d_2=0.2, \omega=0.1$ として適用した結果, 得られた時刻 $t=100 \sim 300$ の探索点の軌道 t vs $x_4(t)$ を Fig. 7 に示す. 探索点の軌道は, すべての局所解を通らないまでも, シンプレックス上の大域的最適解を通っており, 修正谷モデルが有効であることがわかる.

Fig. 7 Time series orbit of search points x_4 (t vs $x_4(t)$)

5. おわりに

本論文では, 非線形の散逸項をもつ連続時間散逸系モデルによる制約条件付大域的最適化手法を提案した. 提案モデルは, 内部状態変数に関する非線形散逸系モデルとその内部状態を引数とする非線形出力関数とから構成されるいわゆる内部状態表現モデルであり, この非線形散逸系モデルとして, カオスの軌道を生成する藤田・安田モデルと谷モデルを採用した. とくにシンプレックス制約問題に対しては, その局所解停留条件を陽に考慮した修正藤田・安田モデルと修正谷モデルと称すべき新しいモデルを提案し, シンプレックス上の大域的探索に有効であることを確認した. しかしながら, 前者のモデルと後者のモデルとでは, それらによる探索挙動に本質的な違いもあることも確認される. すなわち, 複数の局所的最適解を遍歴する様子が, 前者はかなり不規則であるのに対して, 後者はより周期的であることである. このようなダイナミクスの本質的な相違によって, 両者の一長一短を直接比較することができないが, あえてあげるとすれば, 前者は遍歴が不規則であるために, アンニーリング操作が有効であるのに対して, 後者は限定された局所的最適解のみを比較的同じ周期で遍歴する傾向があるために, アンニーリング操作によって特定の解しか得られ

ない可能性があることが、シミュレーションを用いた例題からは指摘される。

ところで、連続時間系カオス軌道では、たとえば比較的大きなサンプリング時間によるオイラー差分によって離散化した離散化勾配法 [10] による離散系カオス軌道と異なり、離散系カオスに固有な局所解間に生じるバウンダリクライシスを克服しなければならない課題がない。また、連続系モデル自体、それを実装することができるデバイスが物理的に実在すれば、それによる高速の演算処理が可能である。

最後に、今後の課題として、

- (1) 内部状態表現モデルでは、制約領域の境界に局所解が存在するとき、この近傍において内部状態が発散するため、本論文では障壁関数を目的関数に付加してこれを回避しているが、内部状態の発散をより直接的に回避するモデルを考案すること、
- (2) 変数の数が比較的多い大規模な問題に対しても、高速でかつ高い割合で大域的最適解へ収束する、修正藤田・安田モデルに対するアニーリング手法を開発すること、

などをあげることができる。

参考文献

- [1] K. Aihara, T. Tanabe and M. Toyoda : Chaotic neural networks ; *Physics Letter A*, Vol. 144, Nos. 6,7, pp. 333-340 (1990)
- [2] H. Nozawa : A neural network model as a globally coupled map and applications based on chaos ; *Chaos*, Vol. 2, No. 3, pp. 377-386 (1992)
- [3] L. Chen and K. Aihara : Chaotic simulated annealing by a neural network model with transient chaos ; *Neural Networks*, Vol. 8, No. 6, pp. 915-930 (1995)
- [4] 菅田, 志水 : 擬似最急降下法によるカオスを用いた大域的最適化 ; 信学論 (A), Vol. J79-A, No. 3, pp. 658-668 (1996)
- [5] 徳田, 小野寺, 徳永, 合原, 長島 : 最適化問題を解くカオス的力学系の分岐のシナリオとその最適化手法の検証 ; 信学論 (A), Vol. J80-A, No. 6, pp. 936-948 (1997)
- [6] 藤田, 安田, 横山 : 散逸系カオスを用いた大域的最適化手法 ; 信学論 (A), Vol. J77-A, No. 6, pp. 881-889 (1994)
- [7] 谷 : カオス的最急降下法を適用したニューラルネットにおける学習および記憶想起の動特性について ; 信学論 (A), Vol. J74-A, No. 8, pp. 1208-1215 (1991)
- [8] 堀江 : 最適化の視点による非線形現象論的数理モデルの合目的論 ; 計測と制御, Vol. 42, No. 1, pp. 60-71 (2003)
- [9] 堀江, 相吉, 石井 : メモリー付きニューロン (慣性系ニューロン) を用いた畳み込み積分型勾配法のニューラルネットワーク実現 ; システム制御情報学会論文誌, Vol. 11, No. 3, pp. 112-119 (1998)
- [10] 増田, 相吉 : シンプレックス上のカオス力学系と正規化制約付大域的最適化手法 ; 電気学会 電子・情報・システム部門誌, Vol. 123-C, No. 6 (2003) (掲載予定)
- [11] 堀江, 相吉 : 力学モデルによる大域的最適化手法—非線形ダイナミクスと非線形最適化 ; システム/制御/情報, Vol. 45, No. 4, pp. 205-211 (2001)