多峰性未知関数の発見的最大値探索法[†]

亀井 且 有*・荒木 義 彦*・井 上 和 夫*

A Heuristic Method for Searching Global Maximum of Multimodal Unknown Function

Katsuari KAMEI*, Yoshihiko ARAKI* and Kazuo INOUE*

Many techniques for searching the optimum of unimodal unknown function are discussed in nonlinear optimization problems and the mathematical programmings. On the other hand, though the search method for multimodal unknown function is an important technique in the optimization of systems, it is not discussed so sufficiently as the unimodal unknown function.

This paper describes a new method for searching the global maximum of multimodal unknown function. The method is composed of three kinds of searches. They are called G (Grasping)-mode search, F (Finding)-mode search and C (Confirming)-mode search. In the G-mode search and the C-mode search, a heuristic method is used which was extracted from search behaviors of human subjects. In F-mode search, the simplex method is used which is well-known as a search method for unimodal unknown function. Each mode search and its transitions are shown in the form of flowchart. The numerical results for one-dimensional through six-dimensional multimodal functions prove the proposed search method to be an effective one.

Keyword: artificial intelligence, heuristic programming, modeling, optimization, search techniques

1. ま え が き

極値探索法は数学的手法を用いるものと発見的手法を用いるものとに分類できる。数学的手法を用いる探索法は評価関数が単峰性の場合、非常に効率よく探索を行い有効である。しかしながら、評価関数が多峰性

の場合、必ずしも効率のよい探索を行うとは限らない。一方、人間は巧みな方法で比較的早く峰の概念を形成し、最大峰を発見することから、理論的におさえられる数学的探索法に対して、発見的探索法も捨てがたい良い点を有していると思われる。

人間の発見的機能を活用して未知関数の最大値点を効率よく探索する発見的探索法の研究は人間による2次元多峰性未知関数の最大値探索実験を通して行われてきた^{1)~8)}。たとえば、織田らは発見的探索を定義し、人間の探索行動を三つの試行モードを用いて解析し、巨視的な人間の発見的探索モデルを示した¹⁾。奥本らは人間の心理的行動を適当な尺度を用いて測定することによって、人間の探索行動を解析し、微視的な人間の発見的探索モデルを示した²⁾。しかしながら、前者のモデルは計算機アルゴリズムの形としては示されておらず、後者のモデルは一種類の2次元2峰性未知関数に適用できるのみで、他の未知関数への適用の可能性は保証されていない。著者らも人間による一連の最大値探索実験を通して、人間の探索行動の解析およびモデル化を試みてきた^{6)~8)}。まず、最大値点の探索に関する人間の確信度をモデル化した発見的到達度を提案した⁵⁾。つぎに、3種類の探索目的の概念(形状把握、最大値発見、最大値確認)を提案し、それに基づいて人間の探索行動における探索目的の遷移過程を解析し、その遷移モデルを示した^{6),7)}。さらに、人間が最大値探索実験の中で示した形状把握探索を詳細に解析し、そのモデル化を行った⁸⁾。人間の形状把握探索モデルは多峰性未知関数の最大値探索においてまだ十分に研究されていない大域探索、すなわち峰を分離するための探索法と考えられる。

本論文では、探索目的の概念に基づいた発見的最大値探索法を提案し、その有効性を確める。本探索法は形状把握探索、最大値発見探索、最大値確認探索で構成される。形状把握探索および最大確認探索には発見的な手法を用い、最大値発見探索には数学的手法を用

[†] 第25回自動制御連合講演会で発表(昭57.11)

* 立命館大学理工学部 京都市北区等持院北町 56-1

* Faculty of Science and Engineering, Ritsumeikan University, Kyoto

(Received August 25, 1982)

(Revised February 10, 1983)

いる。また、各探索間の遷移は人間の遷移モデルを用いる。本探索法の数値実験は1次元から6次元の合計13種類のテスト関数を用いて行い、数値結果を既発表の数学的手法を用いた探索法と比較する。

2. 探索目的モード

探索目的を以下の三つのモードで定義する⁷⁾。

Gモード (Grasping mode):

未知関数の形状を把握するための探索。

Fモード (Finding mode):

未知関数の最大値点を発見するための探索。

Cモード (Confirming mode):

未知関数の最大値点がすでに発見されていることを確認するための探索。

3. 発見的最大値探索法

3.1 探索目的の遷移モデル

人間による2次元多峰性未知関数の最大値探索実験は人間が試行点を決定する直前にその探索目的を三つのモードの中から一つ選択する形で進められ、実験結果から探索目的のモード遷移モデルが抽出された⁷⁾。著者らが提案する新しい最大値探索法はこのモデルのモード遷移に従う。Fig. 1に本探索法のフローチャートを示す。本探索法はGモード探索（形状把握探索）、Fモード探索（最大値発見探索）、Cモード探索（最大値確認探索）から構成され、それぞれの探索を逐次行う。すなわち、人間が効率よく最大値点を探索するときの基本タイプであるGFCタイプ⁷⁾で探索を進める。ただし、Fモード探索で最大値を新たに発見できなかった場合は再び定義領域の全体にわたってGモード探索を行うGFGタイプ⁷⁾で探索を進める。ま

Fig. 1 Flowchart of new maximum search method

た、Cモード探索で新たな最大値を発見した場合はその最大点を中心に再びFモード探索を行うFCFタイプ⁷⁾で探索を進める。

3.2 Gモード探索⁸⁾

多峰性未知関数を $y=f(x)$ とする。 x は n 次元空間における状態であり、 $x=(x_1, x_2, \dots, x_n)$ で表わす。ただし、 $0 \leq x_i \leq 1$ とする。

Gモード探索の手順を以下に述べる。

- [1] (2^n+1) 個の初期試行点 x^i ($i=1, 2, \dots, 2^n+1$) を決定し、その高さ y^i を観測する。初期試行点 x^i の座標は1次元未知関数の場合は $x^1=\frac{1}{2}$, $x^2=\mu$, $x^3=1-\mu$ とし、2次元未知関数の場合は、 $x^1=\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, $x^2=(\mu, \mu)$, $x^3=(\mu, 1-\mu)$, $x^4=(1-\mu, \mu)$, $x^5=(1-\mu, 1-\mu)$ とする。3次元、4次元などの未知関数の場合も同様に定義領域の中央および各隅に決定する。ただし、 $0 \leq \mu < 0.5$ 。

第 t 回目 ($t \geq 2^n+2$) の試行点 x^t を以下の手順にしたがって決定する。

- [2] 試行点 x^i ($i=1, 2, \dots, t-1$) の高さ $y^i=f(x^i)$ を高 (H1)、中 (H2)、低 (H3) の三つの程度に分類する。

$$\left. \begin{aligned} H1 &= \{y^i | y^i \geq \bar{y} + (y^+ - \bar{y})\alpha\} \\ H2 &= \{y^i | \bar{y} - (\bar{y} - y^-)\alpha \leq y^i < \bar{y} + (y^+ - \bar{y})\alpha\} \\ H3 &= \{y^i | y^i < \bar{y} - (\bar{y} - y^-)\alpha\} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

ただし、

$$\left. \begin{aligned} y^+ &= \max\{y^i\}, \quad y^- = \min\{y^i\}, \\ \bar{y} &= \frac{1}{t-1} \sum_{i=1}^{t-1} y^i, \quad 0 < \alpha < 1. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

- [3] 試行点 x^i, x^l ($i, l=1, 2, \dots, t-1; i \neq l$) 間の距離 d_{il} を短 (D1)、中 (D2)、長 (D3) の三つの程度に分類する。

$$\left. \begin{aligned} D1 &= \{d_{il} | d_{il} \leq d^- + \beta \Delta d\} \\ D2 &= \{d_{il} | d^- + \beta \Delta d < d_{il} \leq d^+ - \beta \Delta d\} \\ D3 &= \{d_{il} | d_{il} > d^+ - \beta \Delta d\} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

ただし、

$$\left. \begin{aligned} d_{il} &= \|x^i - x^l\|, \quad \Delta d = d^+ - d^-, \\ d^+ &= \sqrt{n} (1-2\mu), \quad d^- = 2\mu, \quad 0 < \beta < 0.5 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

- [4] 高さ y^i, y^l および距離 d_{il} によって18とおりに分類された試行点対 $[x^i, x^l]$ の中から探索優先順位表に基づいて順位が高い試行点対 $[x^i, x^l]$ を選ぶ。Gモード探索で用いる探索優先順位表の例をTable 1に示す。ただし、同表において“—”印は試行点対 $[x^i, x^l]$ を選ばず、探索を行わないこと

Table 1 Grades of trial points for G-mode search TBL I

		y^j			
		H1	H2	H3	
y^k	H1	10	—	—	D1
		3	8	9	D2
		1	2	4	D3
	H2		—	—	D1
			—	—	D2
			5	6	D3
	H3			—	D1
				—	D2
				7	D3

The hyphens denote the omission of the search

を表わす。

【5】 試行点 $\mathbf{x}'$ を決定する。

$$\mathbf{x}' = (\mathbf{x}^j + \mathbf{x}^k) / 2 \quad (5)$$

Table 1 および (5) 式は人間の探索行動の解析結果より抽出されたものである⁸⁾。

【6】 試行点 $\mathbf{x}'$ の近傍に (6) 式を満足するような試行点 $\mathbf{x}^i$ ($i \leq t-1$; $i \neq j, k$) が存在する場合、試行点 $\mathbf{x}'$ の高さの観測を省略し、【4】へ戻る。

$$\|\mathbf{x}' - \mathbf{x}^i\| < \mu \quad (6)$$

これは試行点 $\mathbf{x}'$ の高さが試行点 $\mathbf{x}^i$ の高さ y^i によって代表されると考えられるためである。

【7】 試行点 $\mathbf{x}'$ の高さ y' を観測する。

【8】 $y' \geq y^+$ ならば、 $t = t+1$ として【2】戻る。

$y' < y^+$ ならば、探索優先順位が 1 段階低い試行点対 $[\mathbf{x}^j, \mathbf{x}^k]$ を選び、 $t = t+1$ として【5】へ戻る。

【9】 以上の手順を探索優先順位が最低位になるまで繰返し、F モード探索へ移る。

ここで、 μ は未知関数の峰数および急峻さに関するパラメータである。すなわち、1 点の試行点が代表する領域の大きさを表わしている。したがって、未知関数の形状が非常に急峻であると予測される場合は μ を小さく設定する必要がある。

本 G モード探索の手順は文献 8) の人間の形状把握モデルに基づいている。ただし、文献 8) と異なっており、高さの分類では全試行点の高さを、距離の分類では定義領域の最大距離をそれぞれ考慮した。このことによって、未知関数が高次元でその形状が複雑となったときも文献 8) より安定した探索が期待できる。

3.3 F モード探索

F モード探索は局部探索と収束探索とで構成する。局部探索は最大値点の周辺を探索し、収束探索のため

の出発点 (基点) を決定するための探索である。収束探索は最大値点を必要とする精度で求めるための探索である。このように F モード探索を二つの探索に分割する理由は多くの出発点から同じ最大値点へ収束することを防ぎ、最大値点の発見をできる限り少ない試行数で行うためである。局部探索および収束探索には非線形最適化問題などでよく知られているシンプレックス法⁹⁾を用いる。ただし、シンプレックス法の停止条件を (7) 式で与え、局部探索では $\varepsilon = \varepsilon_1$ 、収束探索では $\varepsilon = \varepsilon_2$ ($< \varepsilon_1$) とする。

$$\left\{ \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} (y_{(i)} - \bar{y})^2 \right\}^{1/2} < \varepsilon \quad (7)$$

ただし、 $y_{(i)}$ はシンプレックスの i 番目の頂点の高さである。

$$\bar{y} = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} y_{(i)} \quad (8)$$

F モード探索の手順を以下に述べる。

局部探索

【1】 試行点 $\mathbf{x}^+$ ($y^+ = \max\{y^j\}$) を出発点 $\mathbf{s}$ とする。

【2】 出発点 $\mathbf{s}$ からシンプレックス法 ($\varepsilon = \varepsilon_1$) により準最大値 y^* および準最大点 $\mathbf{x}^*$ を求める。

【3】 試行点 $\mathbf{x}^j$ の中から高さが“高”に属する試行点 $\mathbf{x}^j$ ($y^j \in H1$) を出発点として 1 点選ぶ。

【4】 $\|\mathbf{x}^j - \mathbf{x}^*\| < \omega$ ならば、【3】へ戻り他の試行点 $\mathbf{x}^j$ を選ぶ。

$\|\mathbf{x}^j - \mathbf{x}^*\| \geq \omega$ ならば、試行点 $\mathbf{x}^j$ を出発点 $\mathbf{s}$ とする。

【5】 出発点 $\mathbf{s}$ からシンプレックス法 ($\varepsilon = \varepsilon_1$) により準最大値 y^* および準最大点 $\mathbf{x}^*$ を求め、【3】へ戻る。

【6】 試行点 $\mathbf{x}^j$ ($y^j \in H1$) がすべて出発点として選ばれるまで上記の手順を繰返し、局部探索を終了する。

収束探索

収束探索は局部探索で得られた準最大点 $\mathbf{x}^*$ を出発点 $\mathbf{s}$ として局部探索と同じアルゴリズムで行い、最大値 y^{**} および最大点 $\mathbf{x}^{**}$ を求める。ただし、 $\varepsilon = \varepsilon_2$ 。最後に、最大値 $y^{+++} = \max\{y^{**}\}$ とし、 $y^{+++} = y^+$ ならば、再び G モード探索へ戻る。 $y^{+++} > y^+$ ならば、C モード探索へ進む。

ここで、 ω は異なる出発点 $\mathbf{s}$ から同じ峰へ収束することを避けるためのパラメータである。未知関数の峰数が非常に多いと予測される場合は ω の値を小さく設定する必要がある。

3.4 C モード探索

人間による 2 次元多峰性未知関数の最大値探索にお

けるCモード探索はGモード探索と類似しており、その役割は不十分なGモード探索を補うことにある⁷⁾。したがって、Cモード探索はGモード探索と同じ手法を用いる。ただし、Cモード探索で用いる探索優先順位表はGモード探索を補うように作成されねばならない。Table 2 にCモード探索で用いる探索優先順位表の例を示す。TBL II はGモード探索で行えなかった高さの不確定な領域を探索しようとするものであり、TBL III はFモード探索によって得られた最大値の近傍にさらに高い点が存在しないことを積極的に確認しようとするものである。これら2種類のCモード探索は人間の探索行動より抽出されたものである⁸⁾。また、試行点 $\mathbf{x}'$ の高さ y' が $y' \in H1$ ならば、試行点 $\mathbf{x}'$ の周辺領域に新たな最大点の存在が期待されるため、試行点 $\mathbf{x}'$ を出発点 $\mathbf{s}$ として再びFモード探索へ戻る。

Table 2 Grades of trial points for C-mode search TBL II

		y^j			
		H1	H2	H3	
y^k	H1	—	—	—	D1
		—	—	—	D2
		—	—	—	D3
	H2		—	—	D1
			1	2	D2
			—	—	D3
	H3			—	D1
				3	D2
				—	D3

The hyphens denote the omission of the search

Table 2 Grades of trial points for C-mode search TBL III

		y^j			
		H1	H2	H3	
y^k	H1	—	1	2	D1
		—	—	—	D2
		—	—	—	D3
	H2		3	—	D1
			—	—	D2
			—	—	D3
	H3			—	D1
				—	D2
				—	D3

The hyphens denotes the omission of the search

4. 数値結果

数値実験では、1次元から6次元の合計13種類の関数をテスト関数として用いた。テスト関数 KB0 1, KB0 2 および KB0 3, KB0 4, KB0 5, KB0 6 はそれぞれ同じような形状をした峰を複数個有する1次元および2次元関数であり、文献 10) より引用した。また、Shekel's family (SQRN), Hartman's family (HARTMAN), Goldstein and Price (GP), Branin (RCOS) は文献 11) で用いられている標準テスト関数である。テスト関数 SQRN 5, SQRN 7, SQRN 10 は4次元関数である。テスト関数 HARTMAN 3 および HARTMAN 6 はそれぞれ3次元および6次元関数である。テスト関数 GP および RCOS は2次元関数である。Table 3 に数値実験で用いたパラメータ値を示す。

本探索法はすべてのテスト関数の最大値探索に成功した。Tables 4, 5, 6 に数値結果を示す。ただし、Table 4 のランダム法による試行数は相対誤差が1%以内の最大値を得るために必要とした試行数の平均値である¹⁰⁾。また、Table 6 の本探索法のマイナス符号は他の探索法が最小値探索を行っているためである。

Fig. 2 に探索結果例を示す。ただし、○印は初期試

Table 3 Values of parameters used in numerical experiments

n	Test functions	μ	ω	ε_1	ε_2
1	KB0 1, KB0 2	0.03	0.15	10^{-6}	10^{-6}
2	KB0 3, KB0 4, KB0 5, KB0 6	0.13	0.25	10^{-6}	10^{-4}
	GP, RCOS	0.13	0.25	10^{-6}	10^{-5}
3	HARTMAN 3	0.16	0.25	10^{-2}	10^{-6}
4	SQRN 5, SQRN 7, SQRN 10	0.16	0.28	10^{-2}	10^{-6}
6	HARTMAN 6	0.26	0.34	10^{-2}	10^{-6}

$\alpha, \beta = 0.333$ for all test functions

Table 4 Comparison of numerical results between proposed method and Kubota's Method¹⁰⁾

	methods	test functions					
		KB0 1	KB0 2	KB0 3	KB0 4	KB0 5	KB0 6
numbers of trials	Proposed	40	50	57	83	77	35
	Kubota	46	68	85	97	89	74
	Random	42	72	590	906	764	305
relative errors	Proposed	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.006
	Kubota	0.004	1.185	0.042	0.310	0.730	0.16

Table 5 Comparison of numbers of trials between proposed method and others⁽¹⁾

methods	test functions						
	SQRN 5	SQRN 7	SQRN 10	HARTMAN 3	HARTMAN 6	GP	RCOS
Proposed	643	446	454	150	392	181	172
Bremmerman	340-L	1700-L	2500-L	505-L	L	210-L	250
Mod Bremmerman	375-L	405-L	336-L	420-L	-515	300	160
Zilinskas	L	12121-L	8892-L	8641			5129
Gomulka/Branin	5500	5020	4860				
Törn	3679	3606	3874	2584	3447	2499	1558
Gomulka/Törn	6654	6084	6144				
Gomulka/V. M.	7085	6684	7352	6766	11125	1495	1318
Price	3800	4900	4400	2400	7600	2500	1800
Fagioli	2514	2519	2518	513	2916	158	1600
De Biase/Frontini	620	788	1160	732	807	378	597
Mockus	1174	1279	1209	513	1232	362	189

An "L" indicates a local minimum was accepted.

Table 6 Optimum values of proposed method and others⁽¹⁾

methods		Proposed	Törn	Price	Fagioli	De Biase/ Frontini
test functions	SQRN 5	-10.15319	10.1422	10.1532	10.153	10.14
	SQRN 7	-10.40293	10.3909	10.4029	10.403	10.399
	SQRN 10	-10.53640	10.5300	10.5364	10.536	10.43
	HARTMAN 3	-3.86278	3.86260	3.86278	3.8628	3.8627
	HARTMAN 6	-3.32236	3.31370	3.32237	3.2032	3.3223
	GP	-3.00001	3.00001	3.00000	3.	2.9997
	RCOS	-0.397891	0.397901	0.397887	0.39789	1.250

(a) Test function KB01

(b) Test function KB02

(c) Test function RCOS

(d) Test function GP

Fig. 2 Examp of search behaviors

行点, ●印はGモード試行点, △印は準最大点, ▲印は最大点, □印はCモード試行点をそれぞれ表わす. また, Fモード探索における試行点の記述は図を煩雑にするため矢印で表わす.

探索過程のタイプはテスト関数 KB05 および HARTMAN 3 の場合のみが FCF タイプであり, 残りすべて GFC タイプであった. ただし, Gモード探索では探索優先順位表 TBL I を, Cモード探索では TBL II を使用した. 探索過程が FCF タイプとなった場合は第2回目のCモード探索では TBL III を使用した. 最大値と他の局部最大値とがほぼ等しいテスト関数 KB01, KB03, KB04 および最大値がすべて等しいテスト関数 RCOS の場合, 本探索法は最大値およびすべての局部最大値を見逃すことなく探索している. 一方, 最大値と他の局部最大値とが大きく異なるテスト関数 KB06 の場合, 本探索法は最大値のみの探索を行い, 他の局部最大値の探索は行っていない. また, 急峻な峰を多く有するテスト関数 SQRN 5, 7, 10 の場合, Gモード探索およびCモード探索を十分に行って, 探索結果に信頼性を与えている. さらに, 高次元のテスト関数 HARTMAN 6 の場合も, 効率よく最大値および局部最大値を探索している. 以上の数値結果および探索行動より, 本探索法は高い信頼性を有し, 少ない試行数で正確に未知関数の最大値を探索する効率の高い探索法と考えられる.

5. む す び

多峰性未知関数の発見的最大限度探索法を提案した. 2次元から6次元の合計13種類の多峰性関数を用いて数値実験を行った. その結果, 本探索法は少ない試行数で精度よく最大値を探索することが確められた. また, 他の探索法と比較して信頼性の高い安定した探索法であると考えられる.

本論文ではパラメータ μ, ω の決定方法についてはふれなかった. 論文中で示したそれぞれの数値は数値

実験を通して経験的に得られたものである. また, 探索優先順位はあらかじめ決定されており, 細かい探索状況の判断が行われないまま探索が進められることもあった. 以上2点の具体的な対策として今後はつぎのような方法で研究を進めたい. (1) 探索の総合評価 $= f(\mu, \omega)$ という3次元関数を考え, 学習機能を有した探索法が最適パラメータを自己決定する. (2) 高さおよび距離の概念に基づいて作成した二つの条件付言語命題を用いて Fuzzy 推論により探索優先順位を決定する.

最後に, 本研究にご協力いただいた立命館大学理工学部電気工学科井上研究室の大学院学生, 学部学生諸氏に謝意を表わします.

参 考 文 献

- 1) 織田, 中村: 二次元・多峰性評価関数の最適点の発見的探索法, 計測と制御, **7**-12, 852/858 (1968)
- 2) 奥本, 北嶋, 山下: 二次元・二峰性関数の最大限度探索における発見的探索行動のモデル化, 電学論 (C), **99**-4, 87/93 (1979)
- 3) 荒木, 井上: ヒューリスティックスによる極値探索法の一考察—初期探索法および探索タイプについて—, システムと制御, **20**-8, 425/433 (1976)
- 4) 織田, 長岡, 中村: 発見的探索と概念形成, 計測自動制御学会論文集, **10**-4, 389/394 (1974)
- 5) 亀井, 荒木, 井上: 人間探索者の最大限度探索に関する確信度のモデル化, 電学論 (C), **101**-2, 38/44 (1981)
- 6) K. Kamei, Y. Araki and K. Inoue: A Mode Analysis of Heuristic Behavior of Searching for Multimodal Optimum Point, Proceedings of 8th IFAC World Congress, 1053/1058 (1981)
- 7) 亀井, 荒木, 井上: 発見的探索行動における探索目的の遷移モデル, システムと制御, **26**-6, 380/387 (1982)
- 8) 亀井, 荒木, 井上: 人間による多峰性未知関数の形状把握探索のモデル化, システムと制御, **26**-11, 736/744 (1982)
- 9) J. A. Nelder and R. Mead: A Simplex Method for Function Minimization, The Computer Journal, **7**, 308/313 (1965)
- 10) 久保田, 北森: 多次元多峰性未知関数の最大限度探索法, 計測自動制御学会論文集, **10**-6, 707/714 (1974)
- 11) L. C. W. Dixon and G. P. Szegö: Towards Global Optimization 2, North-Holland, N. Y. (1978)