多峰性最適問題の一解法†

久 保 洋

北海道大学工学部 札幌市北区北 13 条西 8 丁目

(昭和 47 年 2 月 2 日 受付)

A Method for Solving Multimodal Optimization Problems

Hiroshi KUBO

(Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo)

(Received February 2, 1972)

At present, there are a few methods of multimodal optimization technique, which are used in order to find a solution case by case. The global search techniques which are used in all of these methods are usually nonsequential ones. In this paper, we make an attempt at using only a sequential technique in this global search.

As is commonly known, a necessary condition for the differentiable scalar function to become optimal is that its first derivative is equal to zero. When the function is defined over on n -dimensional space, the first derivatives generate hypersurfaces. A point which is any intersection of n hypersurfaces of derivatives is defined as a pole. The intersection of $n-1$ hypersurfaces, taking off any one from these n hypersurfaces, forms a curve, which is defined as a pole line. A curve evidently links a pole with another. The principle of the method proposed in this paper is to search sequentially these poles using the network of these pole lines. The existence and uniqueness of the pole line, the relation between the pole line and the pole, and the selecting of a resolution from poles are proved.

This method needs that the performance measure is of the class C2 because of the existence of continuous hypersurfaces, and furthermore that some inequality constraints are of the class C1 and close the feasible domain because of closing the network of pole lines. Otherwise, it may occur that an optimal solution is not found in this method, for all of extremums found in this method are connected with a certain network of pole lines. In particular, it is impossible to find the solution which exists on the boundary of inequality constraints, but in this case the method finding it using Lagrange multiplier is briefly described. Furthermore, the convergence of solutions in this method under certain conditions and two simple experimentations are reported.

1. ま え が き

より複雑かつ高度な問題などで最適化を目指す場合、単峰性が仮定できない場合が非常に多く存在する。しかしながら多峰性最適問題の解法は、まだまだ未開拓の分野で応用に即したじゃっかんの手法が提案されているにすぎない^{1)~3)}。またそれらはランダム法、タブレーション法などの非逐次的な大局的探索で解の近傍を求め、さらに単峰性の仮定のもとに従来のシーケン

シャル法を使って精度をあげる場合が普通である。本論文は極値と極値を結ぶ曲線を導入することにより、この大局的探索にも逐次的な手法のみを使うことを試みたものである。

一般に n 次元ベクトル空間で定義される可微分なスカラー関数の極値の条件は、それぞれ超曲面を生成する n 個の 1 階偏導関数がゼロに等しいことで示される。この条件を満たすこれら n 個の超曲面の交点を極と定義し、1 個除いた $(n-1)$ 個の交わりを極を通る曲線となることから極値線と定義する。明らかなように、

† 第 10 回計測自動制御学会学術講演会で発表 (昭 46・8)

この極値線は極と極を結ぶ性質をもっている。本論文で提案する方法は、この極値線の存在、極値線と極との関係、および極が極値であるかどうかの条件を導くことにより、この極値線をネットワーク状に追跡しながら、極値を逐次探索してゆく方法である。

本手法では、この極値線のネットワークを閉じたものにするために閉じた不等式拘束が必要であり、また連続な極値線が存在するために目的関数の2階偏導関数と不等式拘束の1階偏導関数の存在が必要である。また求まる解はある極値線でつながった極値の中での最適解であるが、一般には最適解が得られると思われる。以下必要な定理の証明とアルゴリズム、さらにある条件のもとで本手法が収束することを示し、簡単な2つの例題についての実験例も報告する。

2. 理論解析

一般に最適問題は次の形をしている。ここに $\mathbf{X}$ は n 次元ベクトルであり(3)式で記す。

【問題の記述】 (1) 式の目的関数を(2)式の拘束条件を満足しながら最大あるいは最小にする点 $\mathbf{X}^*$ を求めよ。

$$\max \text{ or } \min f(\mathbf{X}) \quad (1)$$

$$\text{subject to } p_i(\mathbf{X}) \geq 0 \quad (i=1, 2, \dots, m) \quad (2)$$

$$\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t \quad (t: \text{転置}) \quad (3)$$

次に $f(\mathbf{X})$, $p_i(\mathbf{X})$ に連続性の仮定と、 $\mathbf{X}$ の存在の仮定をする。

【仮定1】 $f(\mathbf{X})$ は2階導関数、 $p_i(\mathbf{X})$ は1階導関数が存在する。以下の議論のためこれらの導関数を次のように記す。

$$\mathbf{g}(\mathbf{X}) = (g_1(\mathbf{X}), g_2(\mathbf{X}), \dots, g_n(\mathbf{X}))^t$$

$$(g_i(\mathbf{X}) = \partial f(\mathbf{X}) / \partial x_i)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{X}) = (h_1(\mathbf{X}), h_2(\mathbf{X}), \dots, h_n(\mathbf{X}))^t$$

$$(h_i(\mathbf{X}) = \partial g_i(\mathbf{X}) / \partial \mathbf{X})$$

$$\mathbf{b}_i(\mathbf{X}) = \partial p_i(\mathbf{X}) / \partial \mathbf{X} \quad (i=1, 2, \dots, m)$$

【仮定2】 拘束条件による $\mathbf{X}$ の存在可能領域が存在し、連結した閉領域である。

拘束のない場合、極値の必要条件是 $\mathbf{g}(\mathbf{X}^*)=0$ で示される。これは n 個の連立方程式の解ともいえるが、幾何学的には n 個の超曲面の交点とも解釈できる。このとき $\mathbf{h}_i(\mathbf{X}^*)$ は超曲面 $g_i(\mathbf{X}^*)=0$ の点 $\mathbf{X}^*$ での法線ベクトルとなっている。同様に $p_i(\mathbf{X})=0$ も超曲面を生成し、 $\mathbf{b}_i(\mathbf{X})$ はこの面の法線ベクトルとなっている。この超曲面の交点を拘束のある場合にも拡張して次のように極を定義する。また自由度を1つ除いた $(n-1)$ 個の超曲面の交わりは曲線となり、これを極値線と定義する。

【定義1】 (4)と(5)式の $(n+m)$ 個の超曲面の任意の n 個の交点を極と定義する。

$$g_i(\mathbf{X})=0 \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (4)$$

$$p_j(\mathbf{X})=0 \quad (j=1, 2, \dots, m) \quad (5)$$

【定義2】 (4)と(5)式の $(n+m)$ 個の超曲面の任意の $(n-1)$ 個の交線を極値線と定義する。ある点 $\mathbf{X}^0$ で $(n-1)$ 個の $g_i(\mathbf{X}^0)=0$ あるいは $p_j(\mathbf{X}^0)=0$ を満足しているとする。このときそれらの超曲面の法線ベクトル $\mathbf{h}_i(\mathbf{X}^0)$ あるいは $\mathbf{b}_j(\mathbf{X}^0)$ を列とする $n \times (n-1)$ マトリクス $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^0)$ を導入する。

【定理1】(極値線の一意性) 極値線上の任意の点 $\mathbf{X}^0$ でマトリクス $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^0)$ のランクが $(n-1)$ ならば、極値線の接ベクトル $\mathbf{V}(\mathbf{X}^0)$ はその近傍で一意に定まる。

【証明】 点 $\mathbf{X}^0$ が $(n-1)$ 個の $q_i(\mathbf{X}^0)=0$ を満たしているとする。 $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^0)$ のランクが $(n-1)$ なのでこれらの法線ベクトル $\mathbf{r}_i(\mathbf{X}^0)$ は互いに独立である。また $\mathbf{V}(\mathbf{X}^0)$ は(6)式を満足する。したがって $\mathbf{V}(\mathbf{X}^0)$ は自由度が1となり一意性がいえる。(証明終)

$$\mathbf{V}(\mathbf{X}^0)^t \cdot \mathbf{r}_i(\mathbf{X}^0) = 0 \quad (i: q_i(\mathbf{X}^0)=0) \quad (6)$$

定理1により $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^0)$ のランクが $(n-1)$ ならば極値線は分枝しないことが保障される。またそのランクが $(n-1)$ より小さい k とすると、 $\mathbf{V}(\mathbf{X}^0)$ は $(n-k)$ 次元を張るが、このときはその近傍で空間内に $(n-k)$ 個の点を取り極値線の分枝を調べる必要がある。

【定義3】 極値線上で $\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^0)$ のランクが $(n-1)$ より小さくなり極値線が分枝する点を、分枝点と定義する。

任意の極点 $\mathbf{X}^*$ で満足している n 個の関数 $q_i(\mathbf{X}^*)=0$ の法線ベクトル $\mathbf{r}_i(\mathbf{X}^*)$ を列とする $n \times n$ マトリクス $\bar{\mathbf{H}}(\mathbf{X}^*)$ を導入する。

【定理2】(極と極値線の関係) $\mathbf{X}^*$ を任意の極とする。 $\bar{\mathbf{H}}(\mathbf{X}^*)$ のランクが n 、 $p_i(\mathbf{X}^*)=0$ を満足している個数を c とすると、その極から出ている極値線

Fig. 1 Relation of pole and pole line

方向ベクトル $V(X^*)$ の個数は (7) 式で示される。

【証明】 X^* が満足している関数のうち $q_j(X^*) = 0$ を 1 個除くと、残りの法線ベクトルから作られるマトリクス $\bar{G}(X^*)$ のランクは $(n-1)$ となり、定理 1 から X^* の近傍での極値線方向ベクトル $V_j(X^*)$, $-V_j(X^*)$ が一意に 2 個求まる。 $q_j(X^*)$ が $g_j(X^*)$ のときはこれらは c 個の $p_j(X^*) = 0$ の超曲面上のベクトルとなり、いずれも拘束を満足する。 $q_i(X^*)$ が $p_i(X^*)$ のときはいずれか一方が $p_i(X^*) \geq 0$ を満足しない。したがって極値線方向ベクトルの個数は (7) 式となる。 (証明終)

$$2(n-c) + c = 2n - c \quad (7)$$

定理 2 からマトリクス $\bar{H}(X^*)$ のランクが n のときは極 X^* より出る極値線方向ベクトルとその個数が求まる。 $\bar{H}(X^*)$ のランクが n より小さい k のときは、 X^* の近傍の $(n-k)$ 次元空間内に $(n-k)$ 個の点を取り極値線方向ベクトルとその個数を調べる必要がある。

次に極の特性に関する定理を証明しておく。定理 2 と同じく極 X^* が c 個の拘束 $p_i(X^*) = 0$ を満足し、 $\bar{H}(X^*)$ のランクは n とする。このとき $b_i(X^*)$ は c 次元部分空間 L を張る。この空間内に互いに直交する c 個の単位ベクトル $e_1 \sim e_c$ を作る。また L の直交補空間 M の内にも $(n-c)$ 個の互いに直交する単位ベクトル $e_{c+1} \sim e_n$ を作る。これら e_j を行とする $n \times n$ マトリクス U を導入する。この U はユニタリ行列となり、変換後も内積とノルムは保存される。また $(n-c)$ 次元空間 M は拘束 $p_i(X^*) = 0$ の交わりの空間になっている。

【定理 3】 (極の特性) 定理 2 と同じく極 X^* は c 個の $p_i(X^*) = 0$ を満足し、 $\bar{H}(X^*)$ のランクは n とする。極 X^* は (8) 式のベクトルの第 1 から第 c 要素までが 0 であり、かつ (9) 式のマトリクスの第 1 ～第 c 行、第 1 列～第 c 列を除いた $(n-c) \times (n-c)$ マトリクスが正定値かつ (10) 式がすべて正ならば極小値、負定値かつ負ならば極大値、その他は不定の極となる。

$$U^t \cdot g(X^*) \quad (8)$$

$$U^t \cdot H(X^*) \cdot U \quad (9)$$

$$g(X^*)^t \cdot b_i(X^*) \quad (i: p_i(X^*) = 0) \quad (10)$$

【証明】 (11) 式は $f(X)$ の点 X^* での 2 階までの展開を U を使って変換したものである。第 1 項は M 空間では仮定により 0 である。したがって M 空間内における極の判定は、直交座標系 $U \cdot dX$ を持つヘシアンマトリクス (9) 式を使ってできる。また L 空間内ではこう配 $g(X^*)$ と dX の存在可能方向ベクトル

$b(X^*)$ の内積で判定できる。 (証明終)

$$\begin{aligned} f(X^* + dX) - f(X^*) &= (U \cdot g(X^*))^t \cdot (U \cdot dX) \\ &+ \frac{1}{2} (U \cdot dX)^t \cdot (U^t \cdot H(X^*) \cdot U) \cdot (U \cdot dX) \end{aligned} \quad (11)$$

3. アルゴリズム

以上の極と極値線の関係を使ってアルゴリズムを組立てる。まず全体のフローチャートを Fig. 2 に示す。また以下に使用されるパラメータを Table 1 に示す。

【アルゴリズム 1】 探索を開始する準備をし、次の各ステップからなる。

Table 1 Explanation of parameter

HM, AL, IP	input parameter
SX(n)	searching point
PX(n)	record of pole
SV(n)	searching vector
PV(n)	record of pole line vector
SR	radius of searching hypersphere
PR	record of radius of pole
NP	record of number of vector
IPX	record of pole characteristic
EX(n)	dummy point

Fig. 2 System flow-chart

i) HM, AL, IP と探索開始座標 $SX(n)$ の読み込み.

ii) 最初の極 1 個の探索. これは探索ステップ $SV(n)$ が大きいときは (12) 式によるグラジエント法, 小さくなると (13) 式によるニュートン法を使う. ここで $\mathbf{H}$ は拘束にかかっている c 個の $p_i=0$ の法線ベクトル $\mathbf{b}_i$ を行に, 残りの $(n-c)$ 個は g_j のうちで小さいものの $\mathbf{h}_j$ を行にする. また $\mathbf{B}$ はそれに対応する p_i と g_j である.

iii) 極 $SX(n)$ の近傍で単峰を保障する超球の半径 SR を (14) 式で計算する.

$$SV(n) = -\sum \frac{p_i}{HM} \times \frac{\mathbf{b}_i}{\|\mathbf{b}_i\|} - \sum \frac{g_j}{HM} \times \frac{\mathbf{h}_j}{\|\mathbf{h}_j\|} \quad (12)$$

$$SV(n) = \mathbf{H}^{-1} \cdot \mathbf{B} \quad (13)$$

$$SR = \min \left\{ \left| \frac{\det \mathbf{H}}{n \cdot AL \cdot HM^{n-1}} \right|, \left| \frac{p_i}{HM} \right|, \left| \frac{g_j}{HM} \right| \right\} \quad (14)$$

【アルゴリズム 2】(Fig. 3) 極と極値線のネットワークを作るためのパラメータを登録する.

Fig. 3 Flow-chart for algorithm 2

i) 極の座標 $SX(n)$ を $PX(n)$ に, SR を PR に登録.

ii) 定理 2 により極値線探索方向の単位ベクトルとその個数を $PV(n)$ と NP に登録.

iii) 定理 3 による極の特性を計算し IPX に登録.

【アルゴリズム 3】 極値線探索を開始した探索方向ベクトルと, 到達した極の極値線探索方向ベクトルの中で同じ極値線になるものをリンケージする. この到達した極の探索方向ベクトルは探索しないので, 探索する極値線探索方向ベクトルは全体の半分となる.

【アルゴリズム 4】 登録された探索方向ベクトルの中でまだリンケージされないものを順番に探索してゆく.

i) すべての探索方向がリンケージされると探索を終了しアルゴリズム 8 へ, 残っていると,

ii) 次の極値線探索方向ベクトル $PV(n)$ を $SV(n)$

Fig. 4 Flow-chart for algorithm 5

とし, その極の座標 $PX(n)$ を $SX(n)$, PR を SR としてアルゴリズム 5 へゆく.

【アルゴリズム 5】(Fig. 4) 極値線探索における次の極値線上の点として, $SX(n)$ を中心に半径 SR の超球と極値線との交点を求め, その点を $SX(n)$ として探索方向ベクトル $SV(n)$ と超球の半径 SR を計算する.

i) $SX(n)$ より $SV(n)$ の方向に距離 SR の点 $EX(n)$ を (15) 式から求める.

ii) $EX(n)$ を通り $SV(n)$ に直交する超平面と極値線の交点の探索. これは (13) 式によるニュートン法を使う. ここで $\mathbf{H}$ は探索中の極値線の満足する $(n-1)$ 個の $q_i=0$ の法線ベクトルを $\mathbf{r}_i$ 行に, 残りの 1 行は $SV(n)$ を使う. また $\mathbf{B}$ は $\mathbf{r}_i$ に対応する $(n-1)$ 個は q_i , 残りは 0 とする.

iii) (17) 式により $EX(n)$ を $SX(n)$ より SR の距離に修正し, その修正ステップ幅 (16) 式が判定値より大きければ (18) 式により $SV(n)$ を修正して ii) に戻る. 判定値より小さければ iv) $EX(n)$ を $SX(n)$ としこの点での探索方向ベクトル $SV(n)$ を計算し, (19) 式により SR を計算しアルゴリズム 6 へゆく.

$$EX(n) = SX(n) + SQ \times SV(n) \quad (15)$$

$$\|EX(n) - SX(n)\| - R \quad (16)$$

$$EX(n) = SX(n) + \frac{SR \times (EX(n) - SX(n))}{\|EX(n) - SX(n)\|} \quad (17)$$

$$SV(n) = \frac{EX(n) - SX(n)}{\|EX(n) - SX(n)\|} \quad (18)$$

$$SR = \min \left\{ \left| \frac{\det \mathbf{H}}{(n-1) \cdot AL \cdot HM^{n-2}} \right|, \left| \frac{p_j}{HM} \right|, \left| \frac{g_j}{HM} \right| \right\} \quad (19)$$

(q_i は除く)

【アルゴリズム 6】 アルゴリズム 5 で求めた $SX(n)$ が探索中以外の $p_j \geq 0$ を満足しないかあるいは g_j の符号が変わると極を通過したことがわかる。このときはアルゴリズム 7 へ、そうでなければアルゴリズム 5 へゆく。

【アルゴリズム 7】 新しい極かどうかを判定する。

i) アルゴリズム 1 と同じくニュートン法で極 $SX(n)$ の精度をある。

ii) $SX(n)$ がすでに登録済みの極 $PX(n)$ を中心とした半径 PR の超球の中にあればアルゴリズム 3 へ、そうでなければ (14) 式で SR を計算しアルゴリズム 5 へゆく。

【アルゴリズム 8】 解とする極を打出す。このとき入力パラメータ IP を使って必要な解の条件を入れておく。 $IP=0$ のときはすべての極を打出す。 $IP>0$ のときは極大値を関数値の大きい順に IP 個打出す。 $IP<0$ のときは極小値を関数値の小さい順に $-IP$ 個打出す。また極の判定は IPX を使う。

4. 収束の証明

3. で述べたアルゴリズムの収束性を保障するには、1) 登録する極と極値線の個数の有限性、2) 極値線のステップ幅決定のさいに極や分枝点をとばさないこと、がいえればよい。しかし任意の関数についてはこれらを証明することは不可能である。以下、目的関数と拘束条件が仮定 1, 2 以外にどのような条件を満足すれば、アルゴリズムの収束性が保障されるかを示す。

【証明 1】 極と極値線の有限性は (4) と (5) 式の超曲面の存在とその独立性がいえればよい。陰関数の定理から $h_i(\mathbf{X})$ と $b_i(\mathbf{X})$ が 0 でなければ超曲面は存在する。同じく面の独立性は $h_i(\mathbf{X})$ と $b_i(\mathbf{X})$ が互いにすべての点で異なればよい。ただしある 1 点でこれらが 0 または一致してもその近傍で超曲面の存在と独立性はいえる。したがって $h_i(\mathbf{X})$ と $b_i(\mathbf{X})$ がある領域で 0 または 1 次従属にならなければ極と極値線の個数は有限である。

【証明 2】 極あるいは極値線上の任意の点 $\mathbf{X}^0$ で $p_i(\mathbf{X}^0)=0$ あるいは $g_i(\mathbf{X}^0)=0$ を満足しているものを $q_i(\mathbf{X}^0)=0$ とし、その法線ベクトルを $\mathbf{r}_i(\mathbf{X}^0)$ とする。その他の $p_j(\mathbf{X}^0), g_j(\mathbf{X}^0)$ を $h_j(\mathbf{X}^0)$ とする。また探索ステップを $R \cdot \mathbf{V}$ ($\|\mathbf{V}\|=1$) とする。極をとばさないためには (20) 式を満足すればよい。これを

保障するために $h_j(\mathbf{X})$ の最大変化率として (21) 式を仮定する。 $\mathbf{X}$ の存在可能領域内でこれが満足されると、(22) 式を満足する R については極をとばさないことが保障される。次に分枝点をとばさないためには、 $\mathbf{X}^0$ が極のときは $\mathbf{r}_i$ を行としたマトリクス $\mathbf{G}$ 、極値線上のときは $(n-1)$ 個の $\mathbf{r}_i$ と $\mathbf{V}$ を行としたマトリクス $\bar{\mathbf{G}}$ を導入して (23) と (24) 式が満たされればよい。このため q_i の最大変化率を (25) 式で仮定すると、(26) と (27) 式が成立する。さらに $\|\mathbf{r}_i\|$ の最大変化率を (28) 式で仮定すれば、(26) と (27) 式の最大変化率はそれぞれ (29) と (30) 式となる。したがって $\mathbf{X}$ の存在可能領域内で (25) と (28) 式の仮定が満たされると、(31) と (32) 式を満たす R については分枝点をとばさないことが保障される。以上のことから (21) と (28) 式を満足するように HM と AL がとられると収束が保障される。この HM と AL は目的関数と拘束条件のなめらかさを規定する 1 つの方法である。

$$h_j(\mathbf{X}^0 + \alpha \times R \times \mathbf{V}) \times h_j(\mathbf{X}^0) \geq 0 \quad (0 \leq \alpha \leq 1) \quad (20)$$

$$\left\| \frac{\partial h_j(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \right\| \leq HM \quad (21)$$

$$R \leq \left| \frac{h_j(\mathbf{X}^0)}{HM} \right| \quad (22)$$

$$\det \mathbf{G}(\mathbf{X}^0 + \alpha \times R \times \mathbf{V}) \times \det \mathbf{G}(\mathbf{X}^0) \geq 0 \quad (0 \leq \alpha \leq 1) \quad (23)$$

$$\det \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^0 + \alpha \times R \times \mathbf{V}) \times \det \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^0) \geq 0 \quad (0 \leq \alpha \leq 1) \quad (24)$$

$$\|\mathbf{r}_i(\mathbf{X})\| \leq HM \quad (25)$$

$$|\det \mathbf{G}(\mathbf{X})| \leq HM^n \quad (26)$$

$$|\det \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X})| \leq HM^{n-1} \quad (27)$$

$$\left\| \frac{\partial \|\mathbf{r}_i(\mathbf{X})\|}{\partial \mathbf{X}} \right\| \leq AL \quad (28)$$

$$\left\| \frac{\partial \det \mathbf{G}(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \right\| \leq n \times AL \times HM^{n-1} \quad (29)$$

$$\left\| \frac{\partial \det \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \right\| \leq (n-1) \times AL \times HM^{n-2} \quad (30)$$

$$R \leq |\det \mathbf{G}(\mathbf{X}^0)| / n \times AL \times HM^{n-1} \quad (31)$$

$$R \leq |\det \bar{\mathbf{G}}(\mathbf{X}^0)| / (n-1) \times AL \times HM^{n-2} \quad (32)$$

5. 実験例と考察

プログラムはフォートランでコーディングし、約 600 ステップである。目的関数と拘束条件はサブルーチン・プログラムの形で、メイン・プログラムとつながっている。またそれらの導関数は偏微分した関数形でサブルーチン・プログラムに含まれている。

使用した計算機は北海道大学大形計算機センターの

FACOM 230/60 である。以下の計算機使用時間は、コンパイラと I/O 時間を除いたプログラム実行時間である。

【例題 1】

$$\text{目的関数} \quad f(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^n 2^{1-i} \times x_i^2$$

$$\text{拘束条件} \quad p_i(\mathbf{X}) = 10 - x_i \geq 0 \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

$$p_{n+i}(\mathbf{X}) = x_i + 8 \geq 0 \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

【例題 2】

$$\text{目的関数} \quad f(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^n \left(-\cos \frac{x_i}{2} \right)$$

$$\text{拘束条件} \quad p_1(\mathbf{X}) = r^2 - \sum_{i=1}^n x_i^2 \geq 0$$

例題はいずれも次元数 n を変化できる。例題 1 は目的関数のみでは最小値 1 個の単峰であるが、 $2n$ 個の超立方体の拘束条件によりこれらの頂点に 2^n 個の極大値をもつ。例題 2 はカーブした極値線の追跡を試みるために、拘束条件として 1 個の超球を用いる。またこの超球の半径 r を変化して、同次元での極の個数を変えることができる。

【結果】 Table 2 に、例題 1 を用いてパラメータ HM, AL と次元数 n を変化させた結果を示す。Table 3 は例題 2 の次元数 $n=3$ として超球の半径 r を変化させた結果を示す。いずれもすべての極が求まっている。

Table 2 Result of example 1

experiment number	1	2	3	4
dimension	3	3	4	5
number of poles	27	27	81	243
number of maximum poles	8	8	16	32
number of minimum poles	1	1	1	1
number of pole line vectors	108	108	432	1 620
HM(real value=2)	2	20	2	2
AL(real value=0)	10^{-9}	10^{-9}	10^{-9}	10^{-9}
CPU time [s]	19	151	177	1 924

Table 3 Result of example 2

experiment number	5	6
radius of hypersphere	10	15
number of poles	73	183
number of maximum poles	0	8
number of minimum poles	7	7
CPU time [s]	105	925

dimension=3
HM(real)=0.25
AL(real)=0.125
HM=0.5
AL=1.0

【考察】 非常に簡単な例題であるが、極値線をネ

ットワーク状に探索するという本手法の試みを実験的に確かめた。以下本手法の問題点などについてじゃっかん考察を加える。

本手法は、ある極値線につながった極値の中での最適化を行なうという準最適化の形をとっている。最適解が得られない場合は i) 拘束内で他に独立した極値線のネットワーク上に解がある場合、ii) 不等式拘束の境界面に解がある場合、の 2 つの場合が存在する。前者については、その可能性が非常に小さいことから一般には最適解が得られると思われる。後者についてはラグランジュ乗数を使って、境界面の等式拘束を拘束のない問題に変換して本手法を使うことにより解を求めることが可能である。特にそのさい、拘束の内側の極値線と拘束面との交点が必ず変換後の問題における極値線上の点になり、かつラグランジュ乗数が 0 となりまたその逆も成立する。

また本手法では目的関数と拘束条件のなめらかさを推定する必要がある。とくに HM は (次元数-2) 乗で効き、これらは計算時間にかなり影響する。推定が困難な場合などには、本手法自体に適応性をもたせること、あるいは目的関数になんらかの平滑化を行なうことなどが考えられる。実際的には収束性を犠牲にして AL を非常に小さくすると計算時間を短くすることができる。

最後に、本手法における計算上の制限については、次元数の増加に伴い極値線の本数と不定の極が急激に増加し、数時間の計算時間が可能として 5, 6 次元、記憶容量が 40kW 程度として 1000 個程度の極の探索が限度と思われる。

6. む す び

本手法は 2 階偏導関数が利用できる場合にはかなり有効な多峰性最適問題の解法と予想され、いちおうの成果は得られたと思う。とくに、同程度の極値を多数見つける必要がある場合にも使用可能であろう。

おわりに、日ごろご指導いただいている北海道大学工学部沖野教郎教授に心から感謝いたします。

参 考 文 献

- 1) I. N. Bocharov and A. A. Fel'dbaum : An Automatic Optimizer for the Search of the smallest of Several Minima : A & RC, 23-3 (1962)
- 2) G. J. McMurtry and K. S. Fu : A Variable Structure Automaton Used as a Multimodal Searching Technique, IEEE Trans. AC, AC-11, July (1966)
- 3) J. D. Hill : A Search Technique for Multimodal Surfaces, IEEE Trans. SSC, SSC-5-1 (1969)