A-32

直交計画法を用いた最適解探索法 ～変数間相互作用に関する評価～

Optimization Using Orthogonal Design Local Search: Effect of Interactions among Variables

田中秀俊
Hidetoshi Tanaka

1．はじめに

関数最適化問題で導関数が入手困難な場合、局所探索法（Local Search, LS）が有効である。LS は初期値を与えて探索を開始し、探索中は、ある点（現在点）の周囲の点（近傍点）の中から良い点を選んで次の現在点とする。導関数が入手困難な場合は、ランダムに近傍点を選択して現在点と比較する方法がよく採用され、遺伝的アルゴリズム、シミュレーテッドアニーリング（Simulated Annealing, SA）、タブーサーチなどはこれに該当する。一方、直交計画局所探索法（Orthogonal Design Local Search, ODLS）[1,2]や応答曲面法のように、直交計画法を用いて近傍点選択と勾配方向見積りを行う方法もある。ODLS は、変数が多い場合に性能を発揮する方法で、局所的な超平面や二次平面を考慮せず、単に各変数の増減の是非のみを判断して勾配方向を算出する。さらに、SA の機能を取り入れ、大局的な最適解探索の機能を持つように改良されている[3]。

直交計画法を用い、各変数の増減の是非のみを判断する点から、ODLS は変数の相互作用が強い場合に性能が期待できないと考えられた。本稿ではその点について、必ずしも性能が悪いわけではないことを数値実験によって明らかにする。

2．ODLS

ODLS は、適当な初期点を現在点として開始し、近傍点選択段階、勾配方向決定段階、現在点更新段階を経て反復的に現在点を更新していく反復改善法である。以下、各段階について例を用いて簡単に述べる。

2.1 近傍点選択

近傍点の集合は、2 水準の直交計画に従って選択される。近傍点と現在点との距離は一定、ただしその距離はランダムに選ぶ。例えば現在点を(x,y,z)、ランダムに選んだ正の数を w とする。3 変数の 2 水準直交計画は(-1,-1,-1), (-1,+1,+1), (+1,+1,-1), (+1,-1,+1)の 4 組なので、近傍点は (x-w,y-w,z-w), (x-w,y+w,z+w), (x+w,y+w,z-w), (x+w,y-w,z+w) の 4 点になる。

2.2 勾配方向決定

近傍点における評価関数値を、各変数の＋および－毎に集計し平均を比較して、良い方をその変数の勾配方向とする。例えば上記 3 変数の第 1 変数については、－側の (x-w,y-w,z-w) と (x-w,y+w,z+w) の平均と、＋側の (x+w,y+w,z-w) と (x+w,y-w,z+w) の平均とを比較し、良い方を第 1 変数の勾配方向とする。

2.3 現在点更新

勾配方向に沿って二分探索を実施する。精度に関する正の数 d を決めておき、各変数について最小幅を d、探索範囲を 0～2w として実施し、最適点を求める。この点と近傍点集合とから最も良い点を求めて次の現在点とする。

3．数値実験対象および条件

本稿では比較実験の対象として、ベンチマーク用として有名な Rastrigin 関数をベースに、変数間の相互作用の強さを変化させることのできる関数 R を作成した。Rastrigin 関数 R(x)を以下に示す。x は整数、最小値は 0 である。変数の数 n は 1000 とした。

$$R(x) = 10n + \sum_{i=1}^{n}\left[\left(x_i/100\right)^2 - 10\cos\left(2\pi x_i/100\right)\right]$$

R(x)の変数間に相互作用を導入するために、2 変数の組をいくつか選んで回転の変換をかけたものを R(x)の入力とする。ここで選ぶ組数が、相互作用の強さを示すと考えられる。回転角度は 45 度および 60 度とした。

比較対象として、SA[4]でも最適化実験を実施した。冷却スケジュールは cauchy 冷却、ステップ幅は各変数について一次元 cauchy 分布とした。パラメータは既報の実験[3]に合わせている。

三菱電機（株）情報技術総合研究所

4. 実験結果

R(x)の最小化問題について、ODLS と SA それぞれのアルゴリズムで関数の評価回数を 5 万回に限定して解を得た。図 1 および図 2 に比較結果を示す。

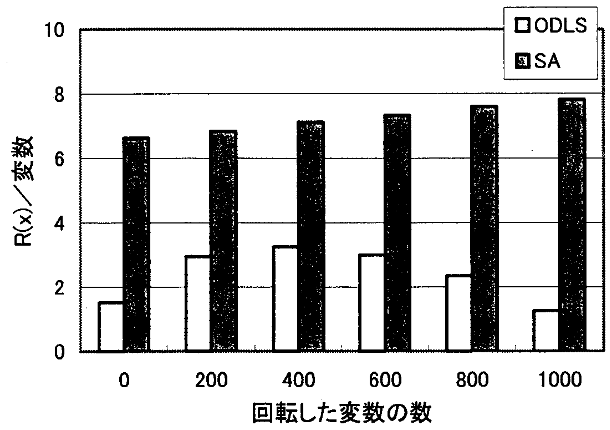

図 1　回転角 45 度における性能比較

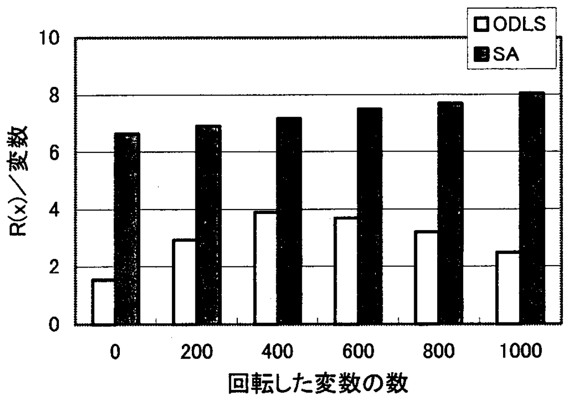

図 2　回転角 60 度における性能比較

図の縦軸は得られた解の評価値を変数の数で割ったもので、探索開始点を−512〜+511 の間の一様乱数を成分とする点として、探索開始点を変えて 20 回試行した平均値を示している。横軸は回転させた変数の数で、2 変数ずつ選んで回転させているので回転させた数はその半分となる。

5. 考察

Rastrigin 関数の二乗の項は回転に関して無視してよいので、2 変数間の相互作用は cos 関数の項に由来する。2 変数を X,Y、回転を 45 度とすると、簡単のために係数を省くと cos(X+Y) と cos(X-Y) の和、つまり cosXcosY という形の相互作用である。この相互作用を持つ変数が増えるに従って、SA の解は単調に悪化している。よって、回転した変数組が混在することによって発生する変数間関係の効果は、単調増加であると考えられる。

これに対し ODLS は、回転角 45 度、60 度とも 400 付近をピークとし、0 と 1000 とがほぼ同じとなるような、上に凸の曲線を描いている。ODLS にとって、cosXcosY の形の相互作用は性能への影響が小さいが、それが混在することの影響は大きいということを、この結果は示している。よって、ODLS の勾配決定方式もしくは近傍点選択方式に、この性質があると考えられる。少なくとも、ODLS の性能は相互作用に関して単調に悪化するわけではないことが言える。性質の検証と詳細の解明は今後の課題である。

6. まとめ

ランダムなサイズの近傍を用い、直交計画法と二分探索とによって解を反復改善する最適解探索法の、変数間相互作用に関する評価を実施した。実験では、変数を 2 つずつ選択して回転変換をかけることによって変数間相互作用を調節した。その結果、シミュレーテッドアニーリングで単調な悪化が見られた状況設定において、本探索法は、変数選択数で半数付近を頂点とする、上に凸の性能を示し、相互作用に関して単調に悪化はしないことが示された。

参考文献

[1] 田中，他: “直交計画法によるノイズつき多次元関数の勾配推定”, 第 61 回情処全国大会, 1D-06, 2000-9.
[2] 田中，他: “分子ポテンシャル最小化問題に関する並列局所探索法の比較評価”, 数理モデル化と問題解決研究会, MPS-33-12, 2001-3.
[3] 田中，他: “ノイズを用いた局所探索法”, 数理モデル化と問題解決研究会, MPS-38-8, 2002-3.
[4] SA C++ package, http://www.taygeta.com/