

多峰性関数に対する最適化アルゴリズムの探索性能比較

2P-4

青山功, 田中秀俊, 白石将, 川上かおり, 佐藤裕幸
 新情報処理開発機構 並列応用三菱研究室

1 はじめに

新情報処理開発機構(RWC)並列応用三菱研究室では, アミノ酸配列からのタンパク質の立体構造予測に関する研究を進めている. 現在は, 原子配列のエネルギー最小化問題を解くことで立体構造を予測する方法に着目し, このエネルギー最小化問題に対してメタヒューリスティックスを適用する手法の研究を行っている.

本稿は, 探索性能の検証を目的とし, 多峰性関数を目的関数としていくつかのメタヒューリスティックスの比較評価を行った. 用いた関数は Rastrigin 関数, Schwefel 関数, Griewank 関数の 3 つであり [1], 比較評価を行ったアルゴリズムは, Simulated Annealing(SA)[2], Genetic Algorithm(GA)[3], Multi-Directional Search(MDS)[4], Orthogonal Design Local Search(ODLS)[5] の 4 つである.

2 目的関数

3 つの関数はいずれも多峰性関数であり, 任意の数の入力変数 (入力ベクトル) を取ることができる. 以下に各関数を示す.

[Rastrigin 関数]

$$f_r(x_i |_{i=1,n}) = 10n + \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)) \quad (1)$$

ただし, 各入力変数の範囲を $-5.12 \leq x_i \leq 5.11$ とし, 最小値は 0 である.

[Schwefel 関数]

$$f_s(x_i |_{i=1,n}) = \sum_{i=1}^n -x_i \sin(\sqrt{|x_i|}) \quad (2)$$

ただし, 各入力変数の範囲を $-512 \leq x_i \leq 511$ とし, 入力ベクトル長 (入力変数の数) を n とした場合, 最小値は $-418.982764 * n$ となる.

Comparative Study of Optimization Algorithms on Multimodal Functions
 Isao Aoyama, Hidetoshi Tanaka, Masashi Shiraiishi, Kaori Kawakami, Hiroyuki, Sato
 Parallel Application Mitsubishi Lab. Real World Computing Partnership

[Griewank 関数]

$$f_g(x_i |_{i=1,n}) = 1 + \sum_{i=1}^n \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^n \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) \quad (3)$$

ただし, 各入力変数の範囲を $-512 \leq x_i \leq 511$ とし, 最小値は 0 である.

3 探索アルゴリズム

比較を行う各アルゴリズムの概要を示す.

3.1 SA

局所探索法の 1 つであり, 目的関数値が悪くなる方向への解の更新も許すことで, 局所解からの脱出を可能としている. 目的関数値が悪くなる方向への更新頻度を制御するために, 「温度」と呼ばれるパラメータを用いる. 「温度」が高いほど目的関数値が悪くなる方向への更新確率が高くなる. SA では, まず melting 処理により温度を高めながら探索を行い, 次に cooling 処理により温度を下げながら探索を行う.

3.2 GA

同時に複数の解 (個体という) を持ち, 同時多点探索が行える. 個体集団の中から 2 つの個体を選び, 2 つの個体間の一部を入れ替える交叉や, 1 つの個体の一部を他の値に変化させる突然変異を行って新しい個体を生成し, 元の個体集団と新しく生成された個体集団の中から次の世代に残す (目的関数値の良い) 個体を選択する, という処理を繰り返し行って, 最適解の探索を行う.

3.3 MDS

パターン探索法の 1 手法である. 探索空間内に単体 (simplex) を生成し, その頂点を探索対象とする. 各頂点の目的関数値の値に基づいて, 単体の反転, 拡大, 縮小を行いながら探索を進めていく.

3.4 ODLS

局所探索法の1手法である。少ない近傍点から確度の高い探索方法を決定するために、近傍点の生成に2水準の直交計画法を用いている。

4 比較実験

入力ベクトル長が10および100の場合に対して、初期値をランダムに生成して各アルゴリズムをそれぞれ30回実行し、得られた最良解の平均、最小、最大、分散を求める。終了条件は『目的関数計算を50,000回繰り返したら終了』としている。なお、SAの実行にはtaygeta社製のライブラリ[6]を、GAの実行にはGalib[7]を用いている。さらに、各アルゴリズムはそれぞれいくつかの調整パラメータを持つが、予備実験により最も良い結果が得られたパラメータ値を選んでいる。

表1~表3に目的関数別の探索結果を示す。SAとGAはほぼ同等の性能であり、MDSやODLSに比べて数十倍から数千倍良い結果が得られている。さらに、SAおよびGAは最良解の分散が小さく、初期解に依存しないことが分かる。

表 1: 測定結果 (Rastrigin 関数)

入力ベクトル長: 10 / 最小値: 0				
	SA	GA	MDS	ODLS
Ave	6.45E-02	3.33E-02	4.18E+01	8.72E+01
Min	0.00E+00	0.00E+00	9.20E+00	3.00E+01
Max	1.00E+00	1.00E+00	9.21E+01	1.30E+02
Var	6.44E-02	3.33E-02	4.54E+02	6.61E+02

入力ベクトル長: 100 / 最小値: 0				
	SA	GA	MDS	ODLS
Ave	7.48E+01	7.20E+01	7.32E+02	6.73E+02
Min	4.67E+01	5.53E+01	5.62E+02	5.53E+02
Max	1.03E+02	9.00E+01	9.71E+02	7.89E+02
Var	1.87E+02	9.54E+01	1.08E+04	3.61E+03

5 まとめ

SAは目的関数値が悪くなる方向への更新を許し、GAは同時多点探索が可能であることから、初期値に依存しない探索が行えている。これに対して、MDSおよびODLSは局所解から脱出する術を持たないため、初期値に依存した探索結果となっている。

我々は、現在タンパク質の立体構造予測への適用手法としてODLSに注目しており、今後は、多スタート化

表 2: 測定結果 (Schwefel 関数)

入力ベクトル長: 10 / 最小値: -4.19E+03				
	SA	GA	MDS	ODLS
Ave	-4.02E+03	-3.73E+03	-3.21E+03	-2.35E+03
Min	-4.19E+03	-4.08E+03	-3.72E+03	-3.31E+03
Max	-3.62E+03	-3.39E+03	-2.41E+03	-1.58E+03
Var	2.43E+04	2.54E+04	1.17E+05	1.90E+05

入力ベクトル長: 100 / 最小値: -4.19E+04				
	SA	GA	MDS	ODLS
Ave	-3.53E+04	-3.47E+04	-2.10E+04	-2.31E+04
Min	-3.62E+04	-3.56E+04	-2.38E+04	-2.77E+04
Max	-3.43E+04	-3.38E+04	-1.85E+04	-2.02E+04
Var	2.38E+05	3.39E+05	1.89E+06	2.69E+06

表 3: 測定結果 (Griewank 関数)

入力ベクトル長: 10 / 最小値: 0				
	SA	GA	MDS	ODLS
Ave	9.11E-03	7.46E-03	1.53E-01	9.16E-01
Min	2.83E-03	9.77E-04	7.24E-02	6.59E-01
Max	2.33E-02	1.97E-02	3.59E-01	9.99E-01
Var	2.66E-05	2.62E-05	3.88E-03	6.56E-03

入力ベクトル長: 100 / 最小値: 0				
	SA	GA	MDS	ODLS
Ave	1.00E+00	1.00E+00	2.24E+02	1.00E+00
Min	1.00E+00	1.00E+00	1.90E+01	1.00E+00
Max	1.00E+00	1.00E+00	5.32E+02	1.00E+00
Var	0.00E+00	0.00E+00	2.04E+04	0.00E+00

やSAなど他の手法との組み合わせにより、初期値依存性を下げる工夫を行っていく予定である。

参考文献

- [1] D. Whitley, K. Mathias, S. Rana and J. Dzubera, "Building Better Test Functions", International Conference on Genetic Algorithms (1995).
- [2] R. Frost and R. Hieneman, "Simulated Annealing: A Heuristic for Parallel Stochastic Optimization", PDPTA '97(1997).
- [3] 北野宏明, "遺伝的アルゴリズム", 産業図書(1993).
- [4] V. J. Torczon, "Multi-Directional Search: A Direct Search Algorithm for Parallel Machines", Ph.D Thesis, Rice Univ.(1989).
- [5] H. Tanaka, "Local Search Using Orthogonal Design of Experiment", PDPTA '00(2001).
- [6] SA C++ package, <http://www.taygeta.com/>
- [7] Galib, <http://lancet.mit.edu/ga/>