

準最適解求解問題に対する山登り法アプローチにおける解探索加速手法の提案*

3D-02

乾伸雄, 野池賢二, 小谷善行†

東京農工大学工学部‡

高野義巳, 深川容三‡

キヤノン株式会社宇都宮光学機器事業所▽

概要

山登り法は準最適化手法としてよく使われる手法である。しかしながら、準最適解が求まるまでのプロセスは問題の性質、初期値の与え方、探索の方法などに依存するため、実際に解こうとしている問題を観察した改良が必要となる。本論文では、最適評価関数を山登り法に適した形に変形することで、高速に解を求める手法を提案する。

1. はじめに

設計問題においては多数のパラメータを調整することで、いくつかの基準を満たす解を求めることが要求されている。また、設計サイクルの短縮が現実的に要求されるため、準最適解を求めるまでの時間的制約が課せられる。山登り法[1]は、線形計画法のような適用可能な問題に関する制限がなく、評価関数と制約条件をブラックボックスとして扱うこともできるので、準最適化問題に有効な手法の一つである。また、ニューラルネットワークや遺伝的アルゴリズムのような解を求めることに関する問題が少ないという利点がある。

しかしながら、山登り法には多峰性の問題に対し、脆弱であるという問題点がある。シミュレーテッドアニーリングのような解決策が用いられるが、根本的な解決には至っていない。これとは別の問題として、探索空間の問題が挙げられる。

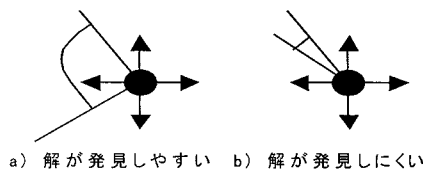


図1 局所的な探索空間

図1に山登り法における居所的な探索空間の模式図を示す。●は現在のパラメータであり、山登り法では微小にパラメータを変化させた空間を探索する。通常山登り法では評価関数の微係数を用いて最適な方向を決定するが、ここでは任意の局所空間を探索することを考える。

図1の a) の場合、解を改善する方向が広いいため、現在の評価を改善する方向を見つけやすい。これに対して、b) の場合は、狭いため、局所探索に時間をかけることが必要である。どの程度局所区間を精査するかが探索時間に与える影響は大きく、短時間で解を求めようとした場合問題となる。

本論文で解決する問題は図1(b)のような問題である。すなわち、あるパラメータを改善するような微小変化分が見つけにくい問題である。この問題を扱うために、評価関数の改善方法を提案する。多峰性の問題は本論文では考慮しない。

2. 問題の定式化

対象とするのは設計問題であるが、本問題は次のようにモデル化できる。

N 種類のパラメータ値 P_i ($i=1, 2, \dots, N$) がある範囲内で存在する。その下限を L_i , 上限を U_i とおくと、次のように記述される。

$$L_i < P_i < U_i$$

異なる i, j に関して、 P_i と P_j の間に何らかの制約が存在する場合、その間の関係を制約条件として記述することが可能であるが、われわれが使っている問題設定においては、おのおののパラメータは独立に変化可能であると考え、このようなパラメータによって、 M 種類の評価値を得ることができる。

$$E_j(P_1, P_2, \dots, P_N) < T_j \quad j=1, 2, \dots, M$$

評価関数 E_j はパラメータ $P_1 \sim P_N$ の全てあるいは一部によって値が定まる。 E_j がどのような関数であるかは、問題によって既知である。おのおのの評価関数値 E_j には目標値 T_j が設定されており、 T_j 以下の値

* Accelerating convergences of evaluations in a hill-climbing method for sub-optimal problems

† Nobuo Inui, Kenji Noike, Yoshiyuki Kotani

‡ Yoshimi Takano, Youzou Fukagawa

§ Dept. of Computer Science, Tokyo University of Agriculture and Technology

▽ Utsunomiya Optimal Products Operation, CANON INC.

を持つようにパラメータを調整することが求められる。これらを満たしていればよいので、本問題は本質的に解が一つに定まるわけではない。しかしながら、全ての評価関数 E_j がしきい値 T_j 未満であるような解の存在が保証されているわけではないので、いくつかの制約条件を満たさない場合も考慮して、全体の評価関数を設計することが必要となる。

評価値自体はおの他の別々の指標の上に成り立っている。つまり、 $E_j - T_j$ を用いてどの評価要素の値がしきい値に近く、または遠いかということ来判断することはできない。そのため、相対的な評価尺度を導入する。これを逸脱割合 R_j と呼ぶことにする。最適化の目標は全ての評価値の逸脱割合を 1 未満にすることと捉えられる。

$$R_j = E_j(P_1, P_2, \dots, P_N) / T_j < 1$$

逸脱割合での最適化を考えたとき、すべての評価要素が合格する、すなわち、逸脱割合が 1 未満になることは、現実問題として考えにくいいため、最適化の目標に関して、次の二つの可能性を考察した。

- もっとも大きい逸脱割合（最大逸脱割合）を持つ評価要素の値を下げる

$$\max R_j \rightarrow \min$$
- 逸脱割合の平均（平均逸脱割合）を下げる。

$$\text{ave } R_j \rightarrow \min$$

最大逸脱割合も平均逸脱割合も全体の逸脱割合を下げる効果がある。しかしながら、違った結果が期待される。最大逸脱割合 $\max R_j$ を下げるということは、もし $\max R_j < 1$ となるならば、全ての逸脱割合が条件を満たしていることを示している。平均逸脱割合 $\text{ave } R_j < 1$ となっても、逸脱割合がばらばらになっている場合、必ずしも全ての逸脱割合が条件を満たしているとは限らない。この意味では、最大逸脱割合を用いた評価が適切であると言える。

最大逸脱割合でも平均逸脱割合でも全ての逸脱割合が条件を満たしていない場合不均衡が起きる。つまり、ある最大逸脱割合を下げて、他の逸脱割合が下がることは保証されない。平均逸脱割合の場合、逸脱割合全体が均等に下がることが期待される。すなわち、極端に逸脱割合が大きいものがある場合は、それを下げようとし、全てが均等の場合は全体を下げる方向で最適化が進むことが期待できる。

このように一長一短があるが、本論文では最大逸

脱割合を使う。これは、パラメータ数が多く、パラメータの微小変動によった場合、平均逸脱割合では解が改善しづらい、つまりある評価要素が改善されても他の要素の悪化により打ち消されてしまうためである。

実際の最適化過程ではどのような形であっても、少しでも解を改善する方向が見つけられる問題は解決しやすい。このような最適化過程は、山を登っていく過程に例えられる。山が一つしかなく、坂が急である問題は解きやすい。これに対して、いくつもの山があり、そこに至る経路に登り降りがあるような場合は、解くことが困難である。また、パラメータの変化方法に関しても、 $i=1, 2, \dots, N$ の順番に最適化を繰り返していけるならば解きやすいと言えるが、評価関数に対して相互作用がある。単純な場合は、おの他のパラメータを一つずつ変化させて試せばよいが、複雑な場合は、複数のパラメータを同時に変化させて試すことが必要である。後者の方が実行時間がかかる。

パラメータは連続値を取るもので、評価関数の形が一次式であるような場合、線形計画問題として帰着され、最適値を求めることが可能である。しかしながら、われわれが試みている問題においては、最大値を求めたり線形でない評価要素が含まれる。そのため、われわれは、本章で述べてきた問題において、評価関数をブラックボックスとして考える。これは、線形計画法のような問題の定式化に立脚した方法に比べると、非効率的である。その代わり、適用できる問題の範囲は広大である。

3. 山登り法

山登り法は、いくつかの問題があるにせよ、最適化問題の解法としてはオーソドックスな手法であり、改良を施すことで、準最適解を見つけることができるフィジビリティの高い手法である。その考え方は、次のように記述される。④～⑦はループになっており、これを世代と呼ぶ。

山登り法のアлゴリズム

- ① パラメータ列の初期化 $P_0 = P_{01}, P_{02}, \dots, P_{0N}$
- ② 初期評価関数の算出 $E_0 = E(P_0)$
- ③ $i=0$
- ④ パラメータの微小変化集合 P_{i+1} の算出

$$P_{i+1} = \{p_{i+1,1}, p_{i+1,2}, \dots, p_{i+1,m} | p_{i+1,j} \leftarrow p_{i,j} + h\}$$

- ⑤ $E_{i+1} = \min E(p_{i+1})$, $\exists p_{i+1} \in P_{i+1}$ を求める。
 ⑥ もし, $E_i < E_{i+1}$ ならば, 終了
 ⑦ $i \leftarrow i+1$, ④へ

山登り法の鍵となる部分は, ④であり, あるパラメータからどのように次に試みるパラメータの集まりを求めるかが重要である。ここで, 生成されるパラメータが悪いと, ⑥で次の最適解が発見することができなくなる。最急降下法は評価関数の微分係数を使い, 次に試みるべきパラメータを発見する手法であり, さまざまな問題で有効性が示されている。しかしながら, これは評価関数をブラックボックスとするわれわれの考え方と合致しない。そこでパラメータにある動的に変化する微小変量を加えることで, 次世代の候補となるパラメータを算出する。

解の質と実行時間の間にはトレードオフが存在する。山登り法において, 解の質を向上するためには, たくさんのパラメータの候補を次世代のために試みることが重要である。⑤における問題は評価値が最小となるパラメータの一つを選択していることである。次世代に考えるべきパラメータは前世代のパラメータの微小変化であるため, 最小のものがもっとも良いとは限らず, 一番評価値を小さくできるものを選ぶことによって, 袋小路に陥ってしまうことも考えられる。これは山登り法の本質的な問題であり, これを改善するためにシミュレーテッドアニーリング法が考えられている。探索初期に近い世代では比較的小ざっぱに良い解を探索し, だんだんと最適な解を探索していく。

第 2 章で最適化結果の評価として最大逸脱割合を用いると述べたが, われわれが直面している問題において, 第 1 章で述べた問題により最大逸脱割合を用いると解を発見しにくい。これを改善するための②, ⑤で用いる評価関数を第 4 章で述べる。また, 微小変化を動的に発見する方法について第 5 章で述べる。

4. 評価関数の設計

第 2 章で述べたように, 最大逸脱割合も平均逸脱割合も評価関数としては一長一短がある。そこで, 次のような式を用いて, 両者の特徴が現れる評価値を計算する。この評価関数は k の値によってさまざ

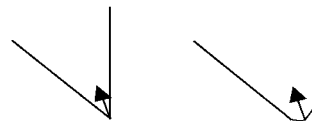
まな特徴を出すことができる。

$$E(p_1, p_2, \dots, p_N, k) = (\sum_i R_i(p_1, p_2, \dots, p_N))^k / N^{1/k}$$

$k = \infty$	最大逸脱割合
$k = 2$	二乗和平均の平方根
$k = 1$	相加平均 (平均逸脱割合)
$k = -1$	調和平均
$k = -\infty$	最小値

k を無限大にすると和において, 最大値のもの以外は考慮されなくなる。例えば, $a_1 + a_2 + a_3$ において, $a_1 \gg a_2, a_3$ という関係式が成り立てば, $(a_1 + a_2 + a_3)^k \approx a_1^k$ となることによっている。つまり, 上記において, 適切に k を選択, 一般的には 1 以上の数で選択すれば, 最適化に適した評価関数を得ることができる。どのような k が良いかは問題に依存し, 実験的に決定する。また, 世代に応じて, 動的に k の値をコントロールするなど考えられる。

数学的には, k の値が大きいき, すなわち最大逸脱割合を考えたときは鋭角の頂点に現在のパラメータが位置することになる。これは基本的に一つの評価値を改善する方向にしか次世代が進めないことに原因がある。鋭角が鋭いほど, 次の最適解を探す範囲が狭くなる。第 3 章で述べたように, 全ての次世代に可能なパラメータを探索することはできないので, 現世代を改良する解が発見しにくくなる。ただし, 発見してしまえば, それが最適解に近づく方向である可能性は高い。これに対して, k の値が小さいとき, すなわち平均逸脱割合に近づくほど, 最適解の方角は分かりにくくなるが, 改善する解を求めやすくなる。これは, 一つでも評価値を改善することができれば, その方向に進むことができるためである (図 2)。



a) 解が発見しにくい b) 解が発見しやすい

図 2 丸みを持った局所的な探索空間

5. 可変微小変分による探索の加速

次の世代の基となるパラメータを求める際に, すべてのパラメータを同時に微小変化させることが望

ましい。これは、評価関数に複数のパラメータが影響を与えるためであるが、パラメータ数が多いときは非現実的である。そのため、本論文では、一度に一つのパラメータしか変化させない、あるパラメータ p の微小変分 h の与え方は、次の考えに基づく。

- ・ 改善している間は h を大きく取る。
- ・ 改善しない場合は h を小さく取る。

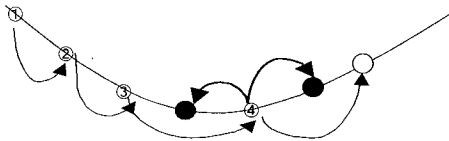


図3 変分の方角と距離

図3は概念図であるが、世代は評価値を下げる方向に進むと考える。評価値が改善している間は、図3の場合、第4世代までは値が改善しているので h を大きくしていく（すなわち速くを調べる）。第5世代ではそのままでは改善されないので、 h を小さくし、左右方向について探索する。図3の場合は左方向に進む。この探索において、 h があらかじめ定められた限界値より小さくなった場合、山登り法の実行は停止させる。

6. 複数のパラメータを使った山登り法

本論文では多峰性の問題を扱うことは避けるが、山登り法の初期値によって、収束した解の良さが異なることが多い。この問題のため、複数回山登り法を実行して、最も良い解を採用することが考えられる。ここの山登りは独立に行われるので、複数のコンピュータを用いることで、並列に実行できる。

この際、よい評価が与えられるパラメータを残し、結果の悪いパラメータを持つものを改善する方法が考えられる。これは遺伝的アルゴリズムの一種と考えられる。悪いものに対しては、まったく新たにパラメータを割り付ける方法や、良いパラメータを利用して、悪いパラメータを改善する方法が考えられる。

7. 他の手法

最急降下法、最適降下法、ニュートン法などの手法は、関数が微分可能であることを前提として開発

された手法である。本論文で扱っている設計問題において、評価関数は、絶対値、最大・最小値などを含んでいるため、これらの方法は適切とはいえない。非線形な問題であるが、線形な部分だけを抽出してグローバルな準最適解の位置を大まかに決める方法なども考えられる。

8. 実験

本手法の実験評価のために、レンズ設計の最適化問題を課題と扱う。50種類のパラメータ、40種類の評価関数で構成されている。本稿では具体的なパラメータの種類、評価関数については言及しない。3次までの多項式関数、および絶対値関数、最大・最小値関数で構成された評価関数からなる。目的関数は、第2章で述べたように、最大逸脱割合を最小にするようなパラメータの組を求めることである。ただし山登り法を実行する過程での評価関数としては、第4章で述べた手法を用いる。従来、人手でパラメータの調整を行った問題であるが、人手で行ったものとの比較を行う。

実験結果として、10通りの設計問題について、人手で行ったものとの比較を行った。そのうち、9通りについてはシステムが優れた解をだしている。人手で作成したパラメータとシステムの出力したパラメータの違いは大きい。

9. おわりに

本稿では、設計問題に関して、山登り法を改良する方法について述べた。評価関数の微係数を評価式から求められない場合の改良案について述べた。評価関数によっては、局所空間での最適値が準最適値を見つけるために適切でない場合も存在するが、種々の改良を取り入れることで解を改良することができた。

謝辞

本研究を支援していただいた、キヤノン(株)および東京農工大学の各位に感謝する。

参考文献

- [1] 長尾智晴: 最適化アルゴリズム, 昭晃堂, 2000