

粗視化ニュートン法における探索点の統計的動作

吉澤大樹[†] 坂野鋭[‡] 橋本周司[†]早稲田大学理工学部[†] (株)NTT データ[‡]

1. はじめに

組合せ最適化問題など難解な最適化問題を確率最適化法で解く場合、遺伝的アルゴリズム(GA)などの探索的手法が主に適用されるが、これらの手法は動作の冗長性が大きく、特にGAはパラメータ変更による動作の制御が難しいという問題点がある。

我々が検討してきた粗視化ニュートン法[1]は、それらの問題点を解消するものである。本稿では、粗視化ニュートン法におけるパラメータ制御が、探索点の確率動作にどのような影響を与えるかを解析したので報告する。

2. 対象問題のモデル化

確率最適化法の成否は、その探索点の確率動作が目的関数のランドスケープの統計的な特徴に適しているか否かで決まる[2]。

組合せ最適化問題は、確率最適化法が適用される代表的な問題である。組合せ最適化問題の多くは、局所解を多数持つような複雑な構造でありながら、大域的に見ると最適解を谷底とする1つの大きな谷を持つような統計的特徴を持つランドスケープを持つことが分かってきている[3]~[7]。

一例として以下のナップザック問題を考える。

p_j : profit of object j . $j = 1, 2, \dots, n$.

w_j : weight of object j .

$$x_j = \begin{cases} 1 & \text{if object } j \text{ is selected;} \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (1)$$

$$\text{Maximize } \sum_{j=1}^n p_j x_j, \text{ subject to } \sum_{j=1}^n w_j x_j \leq c. \quad (2)$$

w_j と p_j を同じ幅の一様分布から選び、解候補

(x_1, x_2, \dots, x_n) に対する評価値 $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ を、

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \begin{cases} p_j x_j & \text{if } w_j x_j < c, \\ p_j x_j - 2(w_j x_j - c) & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (3)$$

と定義して、荷物 20 個の問題 1000 題について、探索空間上の各点の最適解からのハミング距離 d ごとの評価値の平均値 f を図 1 に表した。探索空間上の各点の最適解からの距離と評価値の相関係数の平均は -0.56 となった。

このようにナップザック問題の探索空間の地形は、線形的な大域構造を持っている。そこで、

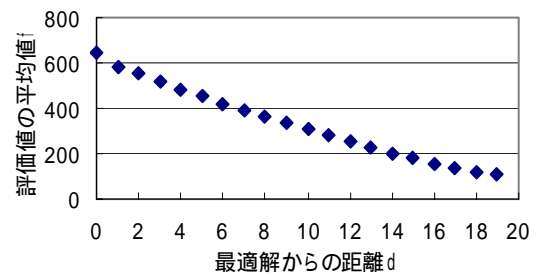


図1. ナップザック問題の地形の大域構造

図 2 のような大域的な山型関数と局所的なノイズの和としてモデル化して考えることにする。

3. 粗視化ニュートン法

提案手法のアルゴリズムは以下の通りである。

1 回にサンプリングする点の数を n とし、サンプリング範囲のサイズ $L(0)$ 、サンプリング範囲の中心位置 $X(0)$ を初期パラメータとして決定する。また $L(t)$ の変更係数を μ (< 1) とする。

例えば、大域単峰関数に適用する場合、

- ・初期サンプリング範囲 $L(0)$ は探索空間全域、
- ・初期中心位置 $X(0)$ は探索空間中央とする。(大域多峰関数の場合には、 $L(0)$ を数分の一、 $X(0)$ はランダムにするのが良い。)そして、

$L(t)$ 内から解候補 x_i をランダムに n 個サンプリングし、その評価値 $f(x_i)$ を得る。

累積された標本点に最小 2 乗法で 2 次関数をフィットさせ、その最大値を与える推定解 M_x を求める。

M_x を新しい探索中心 $X(t+1)$ とする。 $L(t)$ のサイズを μ によって更新する。

~ を T 回繰り返して最適化を行い、 $X(T)$ を最終結果とする。

Coarse-Graining Newton method

```

1 begin initialize t = 0, L(0), X(0)
2 do
3   get f(x_i), i = 1, ..., n randomly in L(t)
4   estimate M_x (which gives f_max),
      (e.g. quadratic regression)
5   X(t+1) = M_x
6   L(t+1) = L(t) * mu
7   t = t+1
8 until t = T
9 end

```

Coarse-Graining Newton's Method

[†]Hiroki YOSHIZAWA and Shuji HASHIMOTO,

School of Science and Engineering, Waseda University

[‡]Hitoshi SAKANO, NTT Data Corp.

4. モデル化された問題に対する性能

図2のように山型の土台に最大振幅 A のノイズが加わった関数の最大値探索問題を考える。

1回に16点サンプリングして、累積された標本点に対して2次関数をフィットさせる。T=50とし、実験を1000回行い、推定解と実際の最適解の距離平均を求めた。図3は、Aを動かして最適解からの距離と評価値との相関係数を変えた結果である。比較として集団数16の単純GAの結果も示す。提案手法は評価値参照回数の観点から見て、最適解への高速な接近を実現していることが判る。

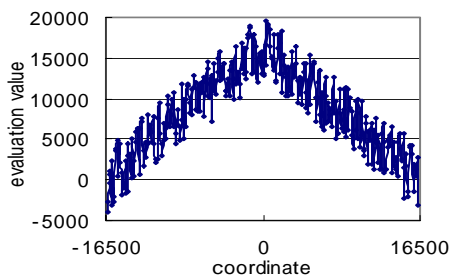


図2. 雑音の乗った山型の関数

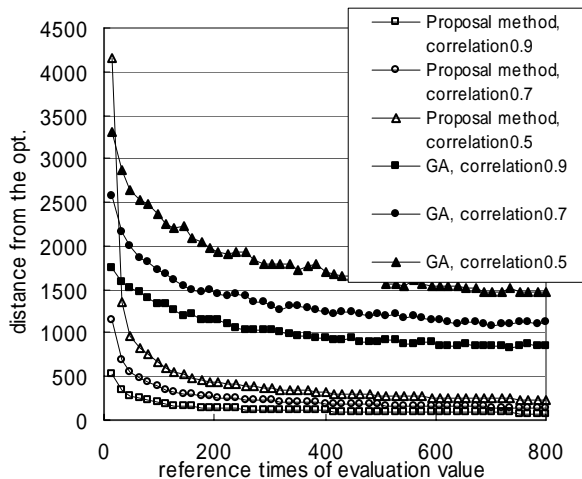


図3. 山型関数 相関係数ごとの比較

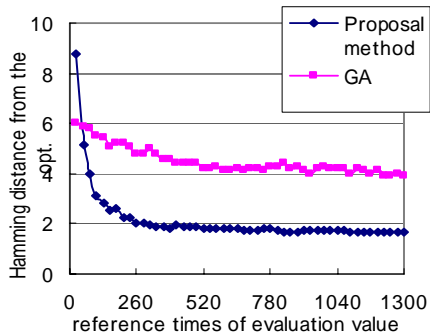


図4. ナップザック問題 (荷物数 21)

5. 実問題に対する性能

次にナップザック問題に提案手法を適用した。問題の設定は、式(1)~(3)の通りである。

解候補はビット列で、超立方体の各頂点に配置される。このように2次関数で近似したときに極

大点が探索空間内部に入らない場合は、1次関数で近似した方が効率的であるので、1次関数で近似する。その関数の最大値を与えるビット列を推定解 M_x とみなす。またサンプリング範囲の限定を確率的な操作に置き換えて、t回目のサンプリングでは、ビット列 M_x と各ビットが80%の確率で同じになるようなビット列をランダムに選ぶ。

50問について解いた結果の平均と集団数22の単純GAとの比較を図4に表す。モデル化された問題における結果との高い類似性が見られた。

6. 探索点の統計的動作

評価関数が線形関数とノイズの和にモデル化される場合について、1次近似する場合の傾き推定誤差を計算した。

傾き a の直線に平均 0、分散 σ^2 のノイズが乗っている評価関数に対して、定義域上で幅 L の領域から n 点サンプリングする場合を考える。

このとき、傾きの推定誤差の期待値 $E(\hat{a})$ は 0、分散 $V(\hat{a})$ は、 $V(\hat{a}) = \sigma^2 / nV(x)$ となる。ただし、 $V(x)$ は標本点の座標 x_i の分散である。

この結果によって、検知できる傾きの精度・傾斜方向の感度が評価でき、手法の信頼性が確かめられる。また、領域の幅 L や点の選び方など、サンプリング法への指針が立ち、手法の扱いやすさが高まった。

7. まとめと展望

組合せ最適化問題に多く見られる地形構造を考慮して、ナップザック問題の地形をモデル化した。また、その地形を考慮した最適化のための新しい手法、粗視化ニュートン法の有効性の検証および、傾き推定の誤差評価を行った。

本手法は、従来法で困難であった収束速度の制御や、パラメータと動作の精度との関係が理解しやすく、またGAのようなパラメータ設定の煩雑さがないので、要求される時間や解の質に応じて、適切に制御できることが期待される。

今後は、多くの実問題で探索的手法に対する優位性を示していく予定である。

[1]吉澤 坂野 橋本:最適化のための粗視化ニュートン法, Proc. of Fifth Workshop on IBIS2002 (2002).
 [2]Wolpert and Macready: No Free Lunch Theorems for Search, Santa Fe Institute Report (1995).
 [3]Manderick, Weger, Spiessens: The GA and the Structure of Fitness Landscape, 4th ICGA (1991).
 [4]Stadler, Schnabl: The landscape of the TSP, Physics Letters A, Vol.161, pp.337-344 (1992).
 [5]Boese, Kahng, Muddu: A New Adaptive Multi-start Technique for Combinatorial Global Optimization, Operations Research Letters, Vol.16 (1994).
 [6]山田武士 and Colin, R.R.: フローショップスケジューリング問題の地形解析と遺伝的局所探索による解法, 情報処理学会論文誌, Vol.39, No.7, pp.2112(1998).
 [7]Yoshizawa, Hashimoto: Landscape analyses and global search of knapsack problems, In Proc. IEEE Intl. Conf. on Systems, Man and Cybernetics (2000).