

## 最適化のための粗視化ニュートン法

吉澤大樹<sup>†</sup> 坂野 鋭<sup>††</sup> 橋本周司<sup>†</sup>

本論文においては、まず、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探索空間の地形をモデル化する。次に、その地形を考慮した最適化のための新しい方法、粗視化ニュートン法を提案し、その有効性を実験的に示す。粗視化ニュートン法は、焼き鈍し法や遺伝的アルゴリズムといった従来の探索的手法が持つ冗長な確率動作を、統計的な処理に置き換えることにより、効率的な最適化を実現する。また、従来の探索的手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の理解が可能である。

### Coarse-Graining Newton's Method for Optimization

HIROKI YOSHIKAWA,<sup>†</sup> HITOSHI SAKANO<sup>††</sup> and SHUJI HASHIMOTO<sup>†</sup>

In this paper, we model the landscapes of the search spaces of knapsack problems in consideration of the landscape structure which many combinatorial optimization problems have. Based on the model we propose the new method for optimization called a coarse-graining Newton's method, and show the validity experimentally. The coarse-graining Newton method realizes efficient optimization by replacing redundant probabilistic iteration with statistical one. The relation between parameters and accuracy is clear in the proposal method, and convergence speed can be controlled easily.

#### 1. ま え が き

本論文においては、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探索空間の地形をモデル化する。また、その地形を考慮した最適化のための新しい方法、粗視化ニュートン法を提案し、その有効性を実験的に示す。

シミュレーテッドアニーリング (SA) や遺伝的アルゴリズム (GA) などの探索的手法は、動作に多くの冗長性を持ち、また効率が必ずしもよいとは言えない。また、パラメータが解法の精度に与える影響が分かりにくいなど、実用的とはいえない側面がある。一方、近年の研究で GA は、評価関数を持つ大域的な相関構造の山を、集団として確率的な山登りをする確率勾配法の一つであるといえることが分かってきた<sup>1)</sup>。

そこで我々は、GA などで行っている確率的な大域的勾配の計算を統計的な計算に置き換えることにより、高速かつ高精度に最適化を実現する粗視化ニュートン法を検討した。

#### 2. ナップザック問題の探索空間のモデル化

##### 2.1 組合せ最適化問題と大谷構造

巡回セールスマン問題 (TSP) の探索空間の地形については、Manderick ら<sup>2)</sup> や Stadler ら<sup>3)</sup> が、大域的な相関構造があることを示している。また、Boese らは、局所解がすり鉢上に分布する大谷構造 (big valley structure) が存在することを示している<sup>4)</sup>。

山田らは、フローショップスケジューリング問題について<sup>5)</sup>、吉澤らは、ナップザック問題について地形を解析し<sup>6)</sup>、同様の地形の特徴を見出している。また吉澤らは、巡回セールスマン問題に関して、探索空間の地形を大域構造と局所構造とに分けるモデル化により、大域構造と局所構造の特徴を分析している<sup>7)</sup>。

##### 2.2 ナップザック問題の地形解析とモデル化

以下のナップザック問題を考える。

$p_i$  : profit of object  $i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ .

$w_i$  : weight of object  $i$ .

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

Maximize  $\sum p_j x_j$ ,

subject to  $\sum w_j x_j < c$ .

<sup>†</sup> 早稲田大学理工学部

School of Science and Engineering, Waseda University

<sup>††</sup> 株式会社 NTT データ

NTT Data Corp.

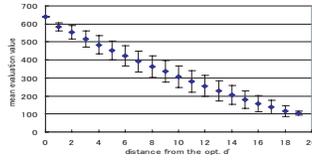


図1 最適解からの距離  $d$  ごとの評価値の平均値  
Fig. 1 fitness per distance from the opt.

荷重  $w_j$  と利得  $p_j$  を同じ幅の一様分布から選び、解候補  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  の評価値  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  を、

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

と定義して、ランダムに多数のナップザック問題を生成した。ナップザック問題の解候補をビット列で表した場合、最適解からのハミング距離  $d$  ごとの平均評価値が強い相関を示すことが知られている<sup>6)</sup>。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距離  $d$  ごとの評価値の平均値を図1に表した。

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、最適解を頂点とする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

#### 3.1 粗視化ニュートン法

図2はナップザックの探索空間の特徴、すなわち組合せ最適化問題に多く見られる大谷構造をモデル化した関数である。この関数を粗視化、例えばグラフを描く線を太くしてみると、細かい凹凸は消滅し、滑らかに近い関数となっていく。このような関数に対してはニュートン法の類が有効である。

そこで、このような評価関数の勾配法的最適化を可能にするために、粗視化ニュートン法を提案する。

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  $n$ 、歩幅  $\Delta X$  の計算法、サンプリング領域サイズの変更係数  $\mu (\leq 1)$  を事前に設定しておく。サンプリング領域の初期中心位置  $X(0)$  とサンプリング領域のサイズ  $L(0)$  を初期パラメータとして決定する。

例えば、大域的に単峰な関数に適用する場合、パラメータ等の設定例は以下の通りである。

- $L(0)$  は探索空間全域、 $X(0)$  は探索空間中央。
- 歩幅の計算法  $\Delta X = \nu * L(t) \frac{\nabla f}{|\nabla f|}$ 、 $\nu$  は定数。後で見ると、大域的に多峰な関数に適用する場

合は、初期サンプリング領域を全探索空間の数分の一、初期中心位置はランダムにするとよい。

$t + 1$  回目のイテレーションにおいて、

- ①  $L(t)$  内から解候補  $x_i$  をランダムに  $n$  個サンプリングし、評価値  $f(x_i)$  を得る。
  - ② 標本点に最小2乗法で1次関数をフィットさせ、粗視化された勾配  $\nabla f$  を求める。
  - ③  $X(t)$  を勾配方向に歩幅  $\Delta X$  分移動する。
  - ④  $L(t)$  を  $\mu$  によって更新する。
- ①~④を繰り返して最適化を行う。以上に整理する

Algorithm 1

```

1 begin initialize  $t \leftarrow 0, L(0), X(0)$ 
2 do
3   get  $f(x_i), i = 1, \dots, n$  randomly in  $L(t)$ 
4   estimate  $\nabla f$ , by linear regression
5   calculate  $\Delta X$ 
6    $X(t+1) \leftarrow X(t) + \Delta X$ 
7    $L(t+1) \leftarrow L(t) * \mu$ 
8    $t \leftarrow t + 1$ 
9 until  $t < T$ 
10 end

```

1次関数ではなく、2次関数をフィットさせ、極大点にサンプリング中心を移動する方法も考えられる(Algorithm 2)。最適解が探索空間中央付近にある場合は有効である。

#### 3.2 パラメータと誤差に関する理論解析

ここでは、目的関数が線形関数とノイズにモデル化される場合について、Algorithm 1の線形関数の傾き推定における誤差を計算する。傾き  $a$  の直線上の各点に平均0、分散  $\sigma$  のノイズが乗っている評価関数に対して、定義域に対して幅  $L$  の領域から  $n$  点サンプリングする場合を考える。傾きの推定誤差を  $\Delta a$  とすると、傾きの推定誤差の期待値  $E(\Delta a)$  は0、分散  $V(\Delta a)$  は、 $V(\Delta a) = \frac{\sigma}{nV(x)}$  となる。ただし  $V(x)$  は、標本点の座標  $x_i$  の分散である。これによって、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。他にも、評価関数のスケールング技法など、発展を論じることができる利点もある。

### 4. 実験

提案手法の有効性を確認するために数値実験を行った。実験は、モデル化された極大値を多数持つ関数の最大値探索(実験1, 3)及び、組合せ最適化問題の1つであるナップザック問題(実験2)の2種である。

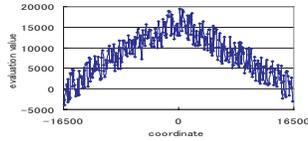


図2 雑音の乗った山型の関数  
Fig.2 V-shaped function with noise

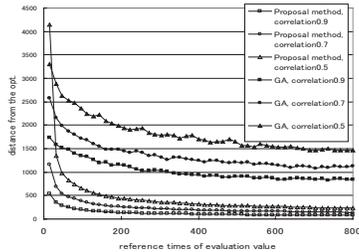


図3 山形関数 相関係数ごとの比較  
Fig.3 V-shaped, concerning correlation coefficient

#### 4.1 実験1 山型の関数

山型の土台に平均0, 最大振幅Aの一様分布のノイズが加わった関数の最大値探索問題を考える(図2)。

具体的には, 1回に16点ずつ解候補をサンプリングして, 累積されたサンプリング点に対して, 最小2乗法を用いて2次関数をフィットさせる(Algorithm 2)。得られた2次関数の極大(最大)点を推定された最適解位置とみなすという操作を繰り返した。

この実験を1000回行い, 評価値の参照回数すなわち累積サンプリング数に対する推定された解と実際の最適解の距離平均を図3にあらわした。ノイズの振幅Aを動かして, 最適解からの距離と評価値の相関係数をいくつか変えた場合を示してある。

比較として, 集団数16, 交叉率1.0, 突然変異率が遺伝子長の逆数である単純GA(ただし, コーディング法はグレー表現)の結果を示す。GAは集団の最近解, 提案法は推定された1点から, 最適解までの距離を用いて評価した。

いずれの場合も期待された通り, 提案手法の方が最適解への高速な接近を実現している。

#### 4.2 実験2 ナップザック問題

##### 4.2.1 実験2.1 相関係数が高い場合

次にナップザック問題に適用した。問題設定は, 2.2の通りである。実験に用いた荷物数21の問題50題の平均相関係数は $-0.56$ であった。ナップザック問題の解候補は, 超立方体の各頂点 $\{0, 1\}^n$ に配置される。このように2次関数で近似すると極大点が探索空間内部に入らない場合は, 1次関数で近似して勾配をみた

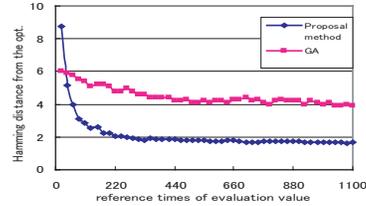


図4 ナップザック問題 荷物21 相関係数 $-0.56$   
Fig.4 Knapsack problems, correlation coefficient  $-0.56$

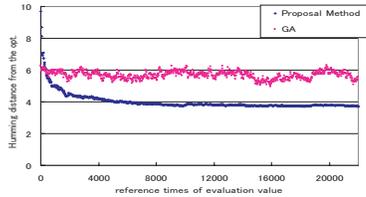


図5 ナップザック問題 荷物21 相関係数 $-0.28$   
Fig.5 Knapsack problems, correlation coefficient  $-0.28$

方が効率的である。したがってAlgorithm 1のように多次元の1次関数で近似する。勾配から求まる最大値を与えるビット列を推定された解とみなす。

2回目以降のサンプリングでは,  $\mu$ を用いる代わりに, 現在の推定された解と各ビットが80%の確率で同じになるように近傍からサンプリングし, 累積されたサンプリング点に対して最小2乗法を適用した。

50問について解いた結果の平均を図4に表す。また, 同じ評価値参照回数となる集団数22の単純GAと比較した。モデル化された問題における結果(図3)との高い類似性が見られた。

##### 4.2.2 実験2.2 相関係数が低い場合

次に, より難度が高い問題に提案手法を適用する。実験2.1と同じ分布から価値と荷重のそれぞれを荷物の個数だけ選び出し, それぞれの数字を大きい順にソートしてから, 順に荷物の価値と荷重に対応させ問題を作り直す。すると, 評価値と最適解からの距離との相関係数は $-0.28$ に下がった。

このように相関係数が低いナップザック問題50問について, 解いた結果の平均を図5に表す。GAは探索を止めてしまうのに対して, 提案手法はゆっくりではあるが探索を続けている。

##### 4.3 大域的な多峰関数

ここでは大谷構造が仮定できない大域的な多峰性関数に対するふるまいを調べる。

図6は, 左半分に平均評価値の高いU字型の山, 右半分に平均評価値が低いV字型の山を持つ大域的に2峰性の関数である。このような問題に対してGAはU

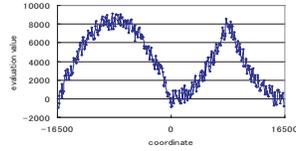


図 6 UV 型の関数  
Fig. 6 UV-shaped function

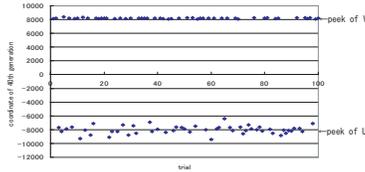


図 7 はじめから局所的にサンプリングした場合  
Fig. 7 Case of sampling locally

字型の山に収束しやすいということが知られている<sup>8)</sup>。

一方で、V 字側に最適解がある場合など、V 字型の谷についても同様に探索を行いたいという欲求もあり、GA のバリエーションとして狭い分布範囲の集団で複数回探索を行う生得分離モデル<sup>9)</sup> が提案されている。

提案法により各回 40 点ずつサンプリングして一次関数による近似を行った (Algorithm 1)。はじめから探索空間の 10 分の 1 ( $L(0) = 3300$ ) の範囲に局所的にサンプリングして、勾配を計算するごとにサンプリング範囲を毎回 0.9 倍 ( $\mu = 0.9$ ) して次第に狭めた。また、 $\Delta X = \nu * L(t) \frac{\nabla f}{|\nabla f|}$ ,  $\nu = 0.3125$  を歩幅として探索点を動かした。結果を図 8 に表した。横軸は実験番号を表し、縦軸が各実験での 40 回推定後の推定座標を表している。試行 100 回に対し、51 回は U 字型谷に、49 回は V 字型谷に収束した。これは、生得分離モデルの GA と類似した結果である。

このように提案手法は、GA と同様に様々なバリエーションが考えられる。そのため問題の探索空間のモデル化が重要で、適切なモデル化が本手法の適したパラメータ設定につながる。これは、確率最適化法全般に共通の性質であるが、本手法は、GA などに比べてパラメータ制御が探索動作に与える影響を理解しやすく、パラメータ制御が容易に行える利点がある。

## 5. まとめと今後の課題

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探索空間をモデル化した。また、その特長に適した新しい最適化法、粗視化ニュートン法を提案し、その有効性を実験的に示した。

提案手法は、想定された問題に関して GA より速い

最適解への接近を実現している (実験 1, 2)。これは、動作の冗長性を省き、探索空間の特徴をより効率よく利用しているためと考えられる。

提案手法は複雑な局所構造に強く、ある程度のサンプリング点があれば、大きなノイズ成分に対しても性能が落ちにくいことも示された (図 3)。これは、理論解析に一致する。

評価関数が大域的多峰関数で表されている問題における提案手法のふるまいには、工夫された GA とも定性的に同等な特徴がみられた (図 7)。

また、従来の探索的手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、GA のパラメータ設定のような煩雑さがないので、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、多くの実問題で他の探索的手法に対する優位性を示していく予定である。

## 参 考 文 献

- 1) Salomon, R.: Evolutionary Algorithms and Gradient Search: Similarities and Differences, IEEE Transaction on Evolutionary Computation, vol.2, No.2, pp.45-55 (1998).
- 2) Manderick, B., Weger, M. and Spiessens, P.: The Genetic Algorithm and the Structure of Fitness Landscape, 4th ICGA, pp.143-150 (1991).
- 3) Stadler, P.F. and Schnabl, W.: The landscape of the travelling salesman problem, Physics Letters A, Vol.161, pp.337-344 (1992).
- 4) Boese, K.D., Kahng, A.B. and Muddu, S.: A New Adaptive Multi-start Technique for Combinatorial Global Optimization, Operations Research Letters, Vol.16, pp.101-113 (1994).
- 5) 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.2112-2123 (1998).
- 6) Yoshizawa, H. and Hashimoto, S.: Landscape analyses and global search of knapsack problems, In Proc. IEEE Intl. Conf. on Systems, Man, and Cybernetics 2000, pp.2311-2315 (2000).
- 7) 吉澤大樹, 橋本周司.: 巡回セールスマン問題における地形構造の解析, 人工知能学会論文誌 vol.16, pp.309-315 (2001).
- 8) 池田心, 小林重信.: GA の探索における UV 現象と UV 構造仮説, 人工知能学会論文誌 vol.17, pp.239-246 (2002).
- 9) 池田心, 小林重信.: 生得分離モデルを用いた GA と JSP への適用, 人工知能学会論文誌 vol.17, pp.530-538 (2002).