

## 連続問題における確率的な内挿/外挿探索の検討

戸松 祐太<sup>†2</sup> 廣安 知之<sup>†1</sup> 鍵谷 武宏<sup>†2</sup>  
中尾 昌広<sup>†2</sup> 三木 光範<sup>†3</sup>

確率的手法を用いて最適化を行う場合、内挿探索と外挿探索をバランス良く行う事が重要である。本稿では、連続問題における内挿探索と外挿探索についての検討を行った。まず最初に解探索空間における内挿探索と外挿探索の定義を行ない、確率的最適化法である Simulated Annealing を用いた探索アルゴリズムの提案を行った。次に、数値実験を通して解探索における内挿探索と外挿探索の効果の検討を行った。その結果、内挿探索を多く行う事により解の精度を上げることができ、また、外挿探索を行う事により局所最適解に陥らずに、最適解を発見しやすくなることを明らかにした。

### Probabilistic Search in Interpolation and Extrapolation Domain of continuous problem

YUTA TOMATSU,<sup>†2</sup> TOMOKI HIROYASU,<sup>†1</sup>  
TAKEHIRO KAGITANI,<sup>†2</sup> MASAHIRO NAKAO,<sup>†2</sup>  
and MINORI MIKI<sup>†3</sup>

It is very important to design interpolation and extrapolation search in evolutionary computations. In this paper, interpolation and extrapolation search were discussed in continuous optimization problems. First, we defined interpolation and extrapolation search determined from searching domains, and we introduced the interpolation and extrapolation search algorithm of stochastic multiple point search algorithm which is based on the Simulated Annealing. Second, the effectiveness of interpolation and extrapolation search was discussed through the numerical test functions. From the results, it was described that the interpolation search increases accuracy ability of searching optimum solution and extrapolation search increases the discovery rate of optimum solution.

### 1. はじめに

最適化において、全探索に必要な計算コストよりも少なく最適点を決定するためには、大局的に最適点の存在を保証し、かつ、精度の良い解を決定する必要がある。そのためには、開発 (exploitation) と探索 (exploration) は重要である。大局的な解を開発しながら、精度の良い解の探索が必要であるからである<sup>1)</sup>。しかしながら、計算コストを一定にした場合、この開発と探索はトレードオフの関係となる。すなわち、開発を重視すると精度の高い解がえられず、精度を重視すると、大局的な解の保証が得られにくい。最適化手法においては、これらの開発と探索のバランスをうまくとることが重要である。遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) や遺伝的プログラミング (Genetic Programming: GP) といった進化計算手法では、これらの開発と探索の探索メカニズムを自動的に切り替え良い解を探索していると考えられる。

本研究では、遺伝的アルゴリズムを始めとする複数探索点情報を利用した確率的探索手法における内挿と外挿探索について検討する。次節以降において詳しく説明するが、GA において Sakuma は解空間に距離尺度を導入し、親個体から構築される空間内に子個体生成が行われるような交叉を内挿交叉、外部に子個体生成が行われるような交叉を外挿交叉と定義している<sup>3)</sup>。本論文では、ここで定義されているように、距離を定義することで複数探索点から構成される空間内の探索を内挿探索、外部の空間の探索を外挿探索と呼ぶこととする。探索能力の高い探索を実現するためには、効率良く、かつ、精度の高い内挿探索のアルゴリズムを利用することが必要である。また、そのような内挿探索を準備することで、内挿空間における開発も十分行うことが可能であると考えられる。一方で、外挿においてどのように開発を行うかは非常に大きな問題である。現在の探索点から得られる情報を基に探索能力も含ませながら開発を行うのか、もしくは、全くランダムに開発を行うのかは、探索の効率に大きな影響を与える。

花田らは、離散問題において、複数の探索点を利用する確率的探索手法において、内挿および外挿探索をどのように行えば良いのかの示唆を与えた<sup>2)</sup>。離散問題において、うまく近

<sup>†1</sup> 同志社大学生命医科学部  
Department of Life and Medical Sciences, Doshisha University

<sup>†2</sup> 同志社大学大学院工学研究科  
Graduate School of Engineering, Doshisha University

<sup>†3</sup> 同志社大学理工学部  
Department of Science and Engineering, Doshisha University

傍の設計を行うことができれば、比較的広い範囲のクラスの問題において、より良いアルゴリズムを設計できることが明らかとなった。

本研究では、連続問題において、内挿および外挿探索はどのような特徴を有すべきかについて検討を行う。これまでに、連続最適化問題において、多くの内挿探索の研究が行われている<sup>6)7)8)9)</sup>。一方で、外挿探索の提案も佐久間<sup>4)</sup>から提案されているが、稜構造をもつ数学関数に関する検討のみとなっている。本研究では、検討をしやすいように、金属の焼きなましを模擬したシミュレーテッド・アニーリング (Simulated Annealing: SA)<sup>10)</sup>をベースに2点探索手法を提案し、それらの探索点から構成される内挿と外挿空間を定義して、代表的な数学関数最小化問題に適用することで検討を行う。

## 2. 局所探索と大域探索の関係

連続問題において、局所探索性能を向上させるためには、近傍幅を小さくする必要がある。これは、最適解を持つ谷に探索点が存在する場合、探索点付近により良い解が存在するためである。そのため、近傍が大きすぎると最適解付近を探索する事が出来ないため、近傍は小さいほうが望ましい。

一方、大域探索性能を向上させるためには、近傍はある程度の大きさを持つ事が望ましい。これは局所解付近に探索点が存在する場合は、近傍がある程度大きくなければ準最適解に収束してしまうためである。そのため、近傍が小さいと改悪を受けなければ準最適解を抜け出せないため、準最適解を抜け出せる適切な近傍幅を持つことが望ましい。つまり、探索点が準最適解付近に存在する際には近傍をある程度大きくし、最適解付近に存在するさいには近傍を小さくするようなアルゴリズムが有効である。そのため、状況に応じて局所探索と大域探索を切り替えて行う必要がある。

## 3. 内挿/外挿探索による局所/大域探索

解空間を  $S$ , 任意の二つの解を  $x, y \in S$  とし、両者の距離を  $d(x, y)$  とすると、解空間は以下に定義される内挿領域と外挿領域の2つの領域に分かる事が出来る<sup>5)</sup>。また内挿領域と外挿領域の概念図を図1に示す。

$$D_{in} = \{s \in S \mid d(s, x_1) \leq d(x_1, x_2) \text{ and } d(s, x_2) \leq d(x_1, x_2)\}$$

$$D_{ex} = \{s \in S \mid d(s, x_1) > d(x_1, x_2) \text{ or } d(s, x_2) > d(x_1, x_2)\}$$

ある2点間に準最適解が存在するような場合、2点の内挿領域を探索しなければ、準最適解を見つけることはできない。また一方で、ある2点間に準最適解が存在しないような場合、2点の外挿領域を探索しなければ、準最適解を見つけることはできない。このように、内挿

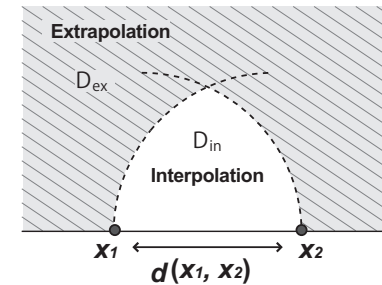


図1 内挿/外挿領域の概念図

領域探索は局所探索性能を、外挿領域探索は大域探索性能を持つ。この2点間で生成される領域においての内挿/外挿領域探索の検証を行うための提案手法について以下述べる。

### 3.1 内挿領域における提案探索手法

内挿領域探索の探索性能を検証するための提案手法について述べる。希求点と準希求点の間の設計変数空間を内挿領域と定め、その領域内に任意の数の探索点を生成する。その生成した探索点の中から希求点と準希求点を見つけ、2点間の距離がある閾値より小さくなるまで探索を行う。以下に内挿探索のアルゴリズムを示す。

#### 【内挿領域探索のアルゴリズム】

- Step1 設計変数空間にランダムに2点生成する。
- Step2 2点の内、評価の良い点を希求点とし、もう一つを準希求点とする。
- Step3 希求点と準希求点の間の領域に探索点を  $N$  点生成する。
- Step4  $N$  点のうち最も評価の良い点が Metropolis 基準を満たしておればその点を準希求点とし、Metropolis 基準を満たさない場合は、 $N$  点のうち最も最良点に近い探索点を準希求点とする。
- Step5 2点の距離が閾値  $Z$  より離れている場合は Step2 にもどり、0.00001 より近づいておれば準希求点をランダムに生成する。

### 3.2 外挿領域探索を付加させた提案探索手法

外挿領域探索の探索性能を検証するための提案手法について述べる。外挿領域探索は、大域的に探索を行うので、それ単体では最適解を見つけることはできない。そこで、前記で提

案した内挿領域探索に外挿領域探索を付加させる手法をここで提案する．前記にある内挿領域探索の Step5 において，希求点と準希求点間の距離が 0.00001 より近づけば以下に示すアルゴリズムの外挿領域探索を行う．

#### 【外挿領域探索のアルゴリズム】

- Step1 設計変数空間にランダムに 2 点生成する．
- Step2 2 点の内，評価の良い点を希求点とし，もう一つを準希求点とする．
- Step3 近傍  $d$  とし希求点と準希求点の外挿領域に探索点を 20 点生成する．
- Step4 20 点のうち最も評価の良い点が Metropolis 基準を満たしておればその点を準希求点とし，Metropolis 基準を満たさない場合は，20 点のうちで最も希求点に近い探索点を準希求点とする．
- Step5 探索回数が 20 回未満の場合は Step2 へ戻る
- Step6 2 点の距離が 0.00001 より近い場合は Step2 にもどり，離れている場合は内挿領域探索を行う．

この外挿領域探索では，探索する外挿領域範囲を決定する近傍  $d$  が重要となってくる．近傍が大きくなると探索する範囲が広くなり効率的な探索を行う事ができなくなる．また近傍が小さくなると準最適解から抜け出す事ができなくなる．そこで，初期の外挿領域探索の近傍を設計変数空間の  $1/4$  とし，内挿領域探索時に最後に準希求点よりも評価が悪い探索点と希求点との距離を外挿領域探索の近傍  $d$  とする．また，内挿領域探索時に一度も準希求点よりも悪い探索点が存在しない場合は，近傍  $d$  を 2 倍にする．これにより，準最適解を抜け出すために必要な谷の大きさを近似できる．また，外挿領域探索のアルゴリズムの Step4 において，Metropolis 基準により満たさなければ希求点から離れている点を準希求点にすることで，探索を停滞させることを防いでいる．

#### 4. 内挿領域探索による局所探索性能の検証

本章では，提案した内挿領域探索の手法と Simple SA<sup>(10)(11)</sup> を元に，内挿領域探索による局所探索性能の検証について述べる．

##### 4.1 対象問題

検証を行う際に用いる対象問題は，単峰性関数である Rosenbrock 関数と，多峰性関数である Rastrigin 関数，Schwefel 関数の 3 つの関数を用いた．

- Rosenbrock 関数

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \{100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (1 - x_i)^2\}$$
$$(-2.048 \leq x_i < 2.048)$$
$$\min(f(x)) = F(1, 1, \dots, 1) = 0$$

単峰性かつ，設計変数間に強い依存関係をもつ関数である．

- Rastrigin 関数

$$f(x) = 10n + \sum_{i=1}^n [(x_i - d)^2 - 10 \cos\{2\pi(x_i - d)\}]$$
$$(-5.12 \leq x_i < 5.12)$$
$$\min(f(x)) = F(d, d, \dots, d) = 0$$

設計変数間に依存関係をもたない多峰性の関数である．最適解の周辺に格子状に準最適解が存在する．

- Schwefel 関数

$$f(x) = \sum_{i=1}^n -x_i \sin(\sqrt{|x_i|})$$
$$(-512 \leq x_i < 512)$$
$$\min(f(x)) = F(420.97, \dots, 420.97) = -418.98 \cdot n$$

最適解を探索領域の境界付近に持つ多峰性関数である．最適解の周辺に準最適解が存在しないため，探索プロセスの早い段階において大域的な解探索がなされなければ，局所最適解に収束する．変数間に依存関係はない．

##### 4.2 数値実験

内挿領域探索を行う提案手法で用いたパラメータを表 2 に，Simple SA のパラメータを表 1 に示す．表 2 と表 1 は，提案手法と Simple SA の評価計算回数が同じになるように設定してある．また，各関数において，両者の手法を用いて 30 試行ずつ行い，最適解の評価値を昇順に並べたものを図 2 に示す．縦軸は評価値，横軸は試行回数を表している．また，対象問題の次元数は 5 次元で実験を行った．

### 4.3 局所探索性能

内挿探索による局所探索性能が有効に働いていることを示すには、全ての試行において内挿探索を行っていない Simple SA よりも提案手法の解精度が良いことを示せば良い。図 2 を見ると Rosenbrock 関数、Rastrigin 関数、および Schwefel 関数に関して Simple SA よりも提案手法が良い解精度であることがわかる。また、多峰性関数である Rastrigin 関数において、評価値が  $1E-10$  まで求められていることから、内挿探索により局所探索性能が向上していることがわかる。以上のことから、内挿領域を定めその領域内をランダムに探索を行っても、局所探索性能を向上させることができるということが分かる。

しかし、図 2(a) をみると提案手法における Rosenbrock 関数の解精度は Rastrigin 関数より良いものではない。また、Schwefel 関数では 30 試行中 6 試行しか最適解を求められていない。これは、Rosenbrock 関数や Schwefel 関数は準最適解と最適解が離れていることが原因であると考えられる。提案手法では、希求点と準希求点の距離が近づき外挿探索を行う際に、準希求点を設計変数空間にランダムに生成している。つまり、準最適解の谷から最適解のある谷への遷移をランダムに行われているために、準最適解と最適解が離れている Schwefel 関数や Rosenbrock 関数の解精度は安定しないということが分かる。

以上より、準最適解と最適解が離れていない問題に対しては内挿領域内をランダムに探索を行っても精度の良い解が求められることができるが、準最適解と最適解が離れている問題では、精度の良い解を求め難いことが分かった。

表 1 Simple SA のパラメータ

Function	Rastrigin	Schwefel	Rosenbrock
Total steps	320000		
Cooling steps	32		
Max.(Initial) temperature	10	100	1
Min.(Final) temperature	0.01	1	0.001
Initial neighborhood range	1.0	200.0	1.0

表 2 内挿領域探索のパラメータ

Total steps	16000
Cooling steps	16
Search number in interpolation	20

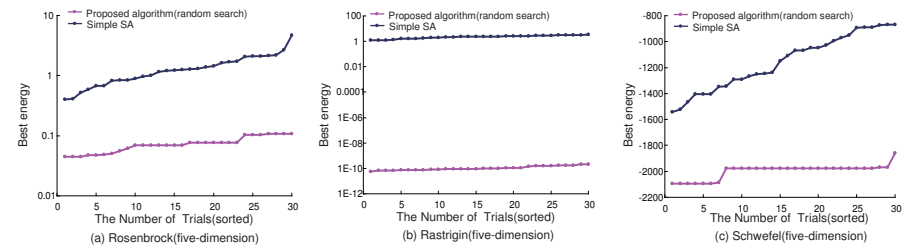


図 2 提案手法と Simple SA の結果

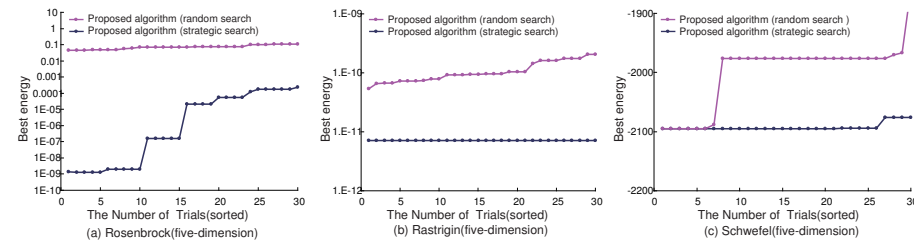


図 3 内/外挿領域探索と内挿領域探索の手法における結果

### 5. 外挿領域探索による大域探索性能

外挿領域探索による探索性能を検証するために、3.1 節で提案を行った内挿領域探索の手法と、3.2 節で提案をおこなった外挿領域探索を付加した内挿領域探索（以下、内/外挿領域探索と記述）の手法による比較を行なった。外挿領域探索時には、前者の手法では設計変数空間にランダムに探索を行うが、後者の手法では内挿探索時の情報と希求点と準希求点の情報を元に外挿領域探索を行う。本章では、外挿領域の探索においては、どちらの探索が有効であるかについて述べる。対象問題と内挿領域探索のパラメータは 4 章で説明したものと同じである。また、これ以降においての外挿領域探索は内/外挿領域探索における外挿探索を指す。

実験結果を図 3 に示す。図 3 は各関数において、両者の手法を用いて 30 試行ずつ行い、最適解の評価値を昇順に並べたものである。縦軸と横軸は対象問題の設計変数領域を示している。

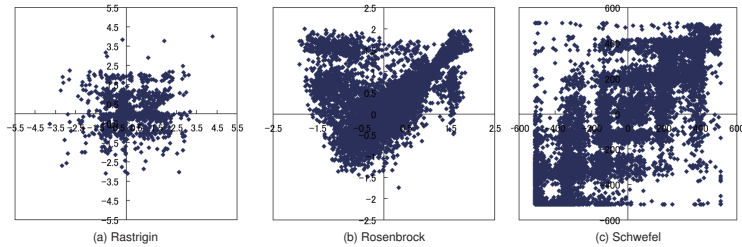


図 4 内/外挿領域探索の手法における準希求点の探索履歴

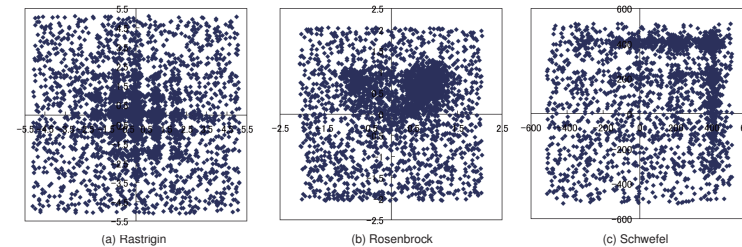


図 5 内挿領域探索の手法における準希求点の探索履歴

### 5.1 外挿領域探索による効率の良い大域探索

図 3 の (a) と (b) を見ると、内挿領域探索の手法より内/外挿領域探索の手法のほうが、解精度が向上していることが分かる。内/外挿領域探索における提案手法を用いた際に、各関数においての 2 次元の設計変数空間での準希求点の遷移履歴を図 4 に示す。また、内挿領域探索の手法を用いた際の準希求点の遷移履歴を図 5 に示す。図 4 と図 5 の縦軸と横軸は致傷問題の設計変数領域を示している。図 4 と図 5 を見ると、内/外挿領域探索を行うほうが、各関数の準最適解の谷を重点的に探索を行っていることが分かる。内/外挿領域探索では、外挿領域にある探索点の中で準希求点よりも評価が良い点に遷移するよう探索を行う。その為に、準希求点は他の準最適解が存在する谷に遷移することができる。これにより、準希求点は準最適解から他の準最適解にスムーズに遷移することができ、無駄な探索を行わずに済むために、図 3(c) のように内挿領域探索よりも最適解発見率が高くなると考えられる。つまり、希求点と準希求点の情報を元に外挿領域探索を行うほうが効率の良い探索が可能であることが分かる。

### 5.2 外挿領域探索による局所探索性能の向上

内/外挿領域探索では、状況に応じて近傍の大きさを変更する。Rastrigin 関数における外挿領域探索の近傍の履歴を図 6、Rosenbrock 関数における外挿領域探索の近傍の履歴を図 7 に示す。図 6 と図 7 の縦軸は評価値を示しており、横軸はアニーリングステップ数を示している。また、Rosenbrock 関数と Rastrigin 関数の外挿探索回数と外挿探索時の Metropolis 基準により不受理となった回数、つまり、希求点から一番遠い点に遷移した回数とその比率を表 3 に示す。図 6 の近傍履歴は 0.5 から 1 の間で収束しているが、図 7 は 0 から近傍の最大値まで大きく変動している。表 3 を見ると Rosenbrock 関数では、外挿探索時に

Metropolis 基準により不受理となった割合が大きいのことがわかる。これは、外挿探索時に希求点よりも離れた探索点に準希求点が遷移していることを意味する。Rosenbrock 関数は単峰性関数であるために、外挿探索時では現在の準希求点よりも評価の良い探索点を見つけられないために、このようなことが生じる。Rosenbrock 関数は最適解と準最適解の距離が離れており、準希求点と希求点が離れた場所から内挿領域探索を行うと、最適解から離れた準最適解と最適解の距離を外挿探索時の近傍とする。これにより、Rosenbrock 関数の場合では近傍が大きく変動する。

図 6 を見ると、外挿領域探索時の近傍の大きさが Rastrigin 関数の谷の大きさである 1 に近い値で収束している事がわかる。このことから、内挿領域探索時に準希求点よりも悪い探索点と希求点の距離を外挿探索の近傍とすることで、準最適解から抜け出すのに必要な近傍を自動で決定できていることがわかる。また、表 3 を見ると Rastrigin 関数における外挿領域探索時の Metropolis 基準により不受理となった確率が Rosenbrock 関数よりも少ないことから、効率よく準最適解の谷に遷移していることがわかる。

以上のことをふまえて、図 3(a) と (b) の内/外挿領域探索における解精度が向上している理由について述べる。外挿領域探索における近傍の大きさが最適解とその隣に存在する準最適解の谷の距離に近似されることにより、外挿領域探索時の準希求点は最適解とその回りの準最適解までの探索で留まる。それにより内挿探索時に最適解付近を集中的に探索を行うことができ、Rastrigin 関数の解精度が向上したと考えられる。このことを示すために、内挿領域探索と内/外挿領域探索における両提案手法において、Rastrigin 関数における設計変数空間の -1 から 1 の領域を内挿探索時の準希求点が何回探索を行ったか調べた。両提案手法において 30 回試行を行い、内挿探索回数と設計変数空間の -1 から 1 の領域における準希求点の探索回数の平均を表 4 に示す。表 4 を見ると内挿探索回数を基準とした -1 から



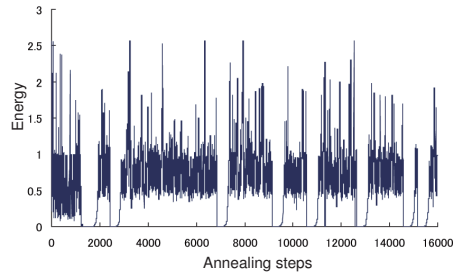


図 6 Rastrigin 関数における外挿近傍の履歴

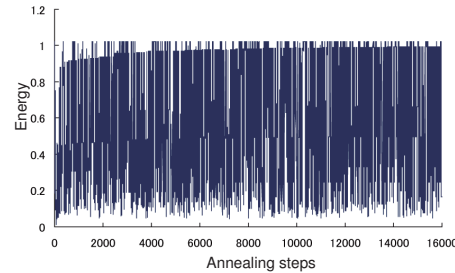


図 7 Rosenbrock 関数における外挿近傍の履歴

1 の領域における探索回数の比率は、内/外挿領域探索における提案手法のほうが良いことが分かる。これにより、外挿領域探索を行うことにより無駄な探索が減り、内挿探索時の局所探索性能が向上したことがわかる。Rosenbrock 関数では、外挿探索時の近傍は大きな値になるので、Rastrigin 関数のように最適解付近の集中探索による解精度の向上は望めないが、5.1 節で記述した効率の良い大域探索により評価値が低い部分を重点的に探索を行うので、無駄な探索が減り、解精度が向上したと考えられる。しかし、外挿の近傍が大きくなるとランダムな外挿探索の要素が強くなり、図 3(c) のように解精度にばらつきが生じてくる。以上のことより、広い外挿領域の範囲を適切に調節し探索を行う外挿領域探索により、無駄な探索を減らし、解精度の向上が望めることが分かった。

## 6. ま と め

本研究では、連続問題においての内挿探索と外挿探索の検討を行った。検討を行う為に SA をベースとした内挿/外挿探索を行う多点型確率的探索手法の提案を行った。内挿領域探索においては解精度が向上することを確認し、外挿領域探索を付加させることにより効率のよい解探索を行うことを確認した。それより、連続問題において内挿領域をランダムに探

表 3 外挿探索時の探索回数と不受理回数

Function	Rastrigin	Rosenbrock
Steps of search in extrapolation domain	11597	10526
Ration of unaccepted steps in extrapolation search	3972(34%)	10527(63%)

索を行うことにより局所探索性能の向上し、外挿領域を適切に設定し探索を行うことにより効率の良い大域的探索を行うことができることが分かった。

## 参 考 文 献

- 1) J.-M. Renders and S.P. Flasse.:newblock Hybrid methods using genetic algorithms for global optimization. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B*, Vol.26, No.2, 2002.
- 2) 花田良子, 廣安知之, 三木光範.:組合せ最適化問題における内挿/外挿的な領域への遺伝的多段階探索の有効性. 情報処理学会論文誌, Vol.47, p.2890-2908.
- 3) H. Sakuma and M. Yamamura.:Extrapolation-directed crossover for real-coded GA:overcoming deceptive phenomena by extrapolative search, Proceedings of Congress on Evolutionary Computation, pp.553-560(2001).
- 4) 佐久間淳. 小林重信.:実数値 GA におけるサンプリングバイアスを考慮した外挿的交叉 EDX, 人工知能学会論文誌, 17 巻 6 号 (2002).
- 5) H. Sakuma and M. Yamamura.:Extrapolation-directed crossover for real-coded ga:overcoming deceptive phenomena by extrapolative search. Proceedings of Congress on Evolutionary Com- putation, pp.553?560(2001).
- 6) Ono I. Kobayashi, S. and M.: Yamamura.:An E?cient Genetic Algorithm for Job Shop Scheduling Problems. Proc. of 6th Int. Conf. on Genetic Algorithms, pp.506.
- 7) Ono, I. and Kobayashi, S.:A Real-coded Genetic Algorithm for Function Optimization Using Unimodal Normal Distribution Crossover, Proc. 7th ICGA, pp. 246-253(1997).
- 8) 樋口隆英, 筒井茂義, 山村雅幸 :実数値 GA におけるシンプレックス交叉の提案 人工知能学会誌, Vol. 16, No. 1 (2001).
- 9) 小野功, 佐藤浩, 小林重信.:単峰性正規分布交叉 UNDX を用いた実数値 GA による関数最適化, 人工知能学会誌, Vol.14, No.6, pp.1146-1155(1998)
- 10) Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M., Teller, A., Teller, E.:Equation of State Calculation by Fast Computing Machines. Journ. of Chemical Physics(1953).
- 11) Kirkpatrick, S.,Gelett Jr.C.D.,Vecchi,M.P.:Optimization by Simulated Annealing. Science(1983).

表 4 Rastrigin 関数における内挿探索時の探索回数と最適解付近の探索回数

	Strategic search	Random search
Steps of search in interpolation domain	4403	14476
Steps of search in domains from -1 to 1	4075(34%)	11879(63%)