九州大学 工学部地球環境工学科
船舶海洋システム工学コース

システム設計工学 （担当：木村）

(5) 連続関数の最適化

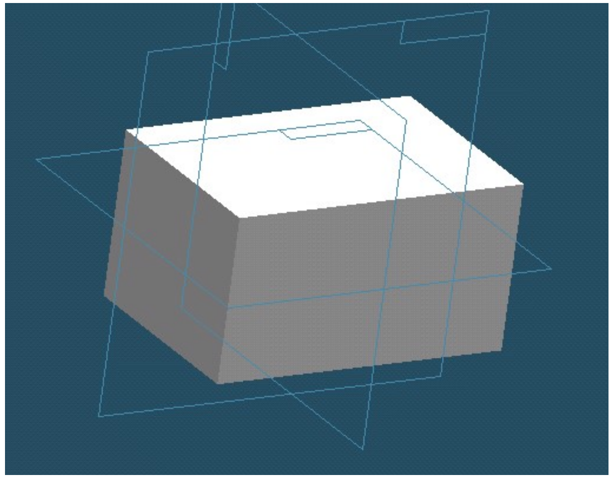
ランダムサーチ
シミュレーテッドアニーリング（SA）
滑降シンプレックス法
遺伝的アルゴリズム

場所： 船1講義室

授業の資料等は

http://sysplan.nams.kyushu-u.ac.jp/gen/index.html

【例:箱の寸法デザイン問題】



●商品としてよく売れるような箱の寸法(比率)をデザインする
→　目的ははっきりしているが、
これだけではモデル化も評価値の定義もできていない

【問題のモデル化と評価の定義】

消費者は、商品に「黄金比」に近い長方形が含まれているものを好む傾向

黄金比 $= 1 : \frac{1+\sqrt{5}}{2}$

$$\mathrm{Cost} = \sum_{3\text{面}} \left(\text{黄金比} - (\text{長辺}/\text{短辺})\right)^2 \times \text{面積}$$

Cost が最小になるデザインが最もよく売れる

このモデルが現実と
かけ離れていては意味がない

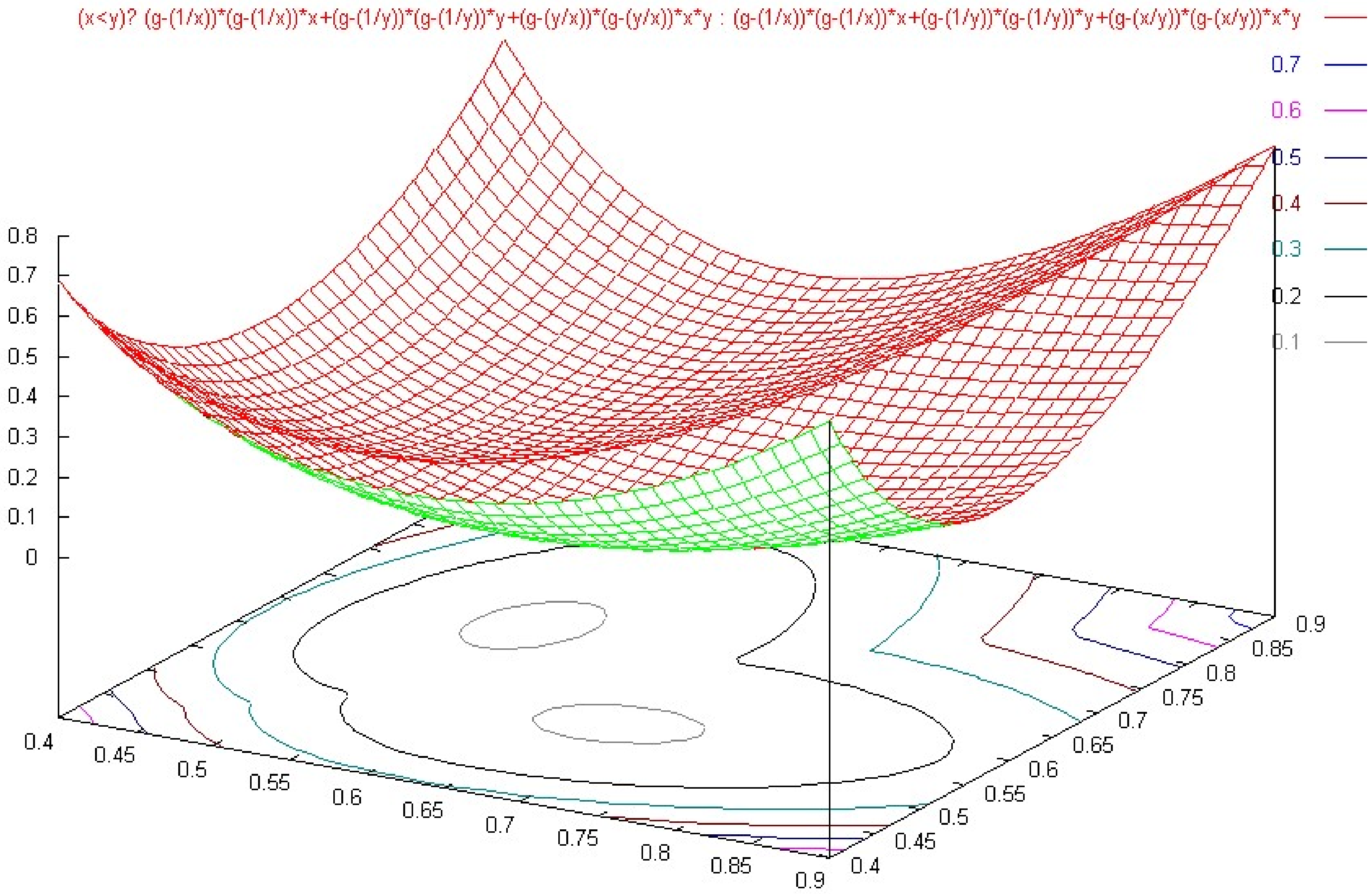
【最適化】

箱の寸法の比率を　X:Y:1　ただし　X ＜ 1　Y ＜ 1　とおく
Cost を最小化する X および Y を求める

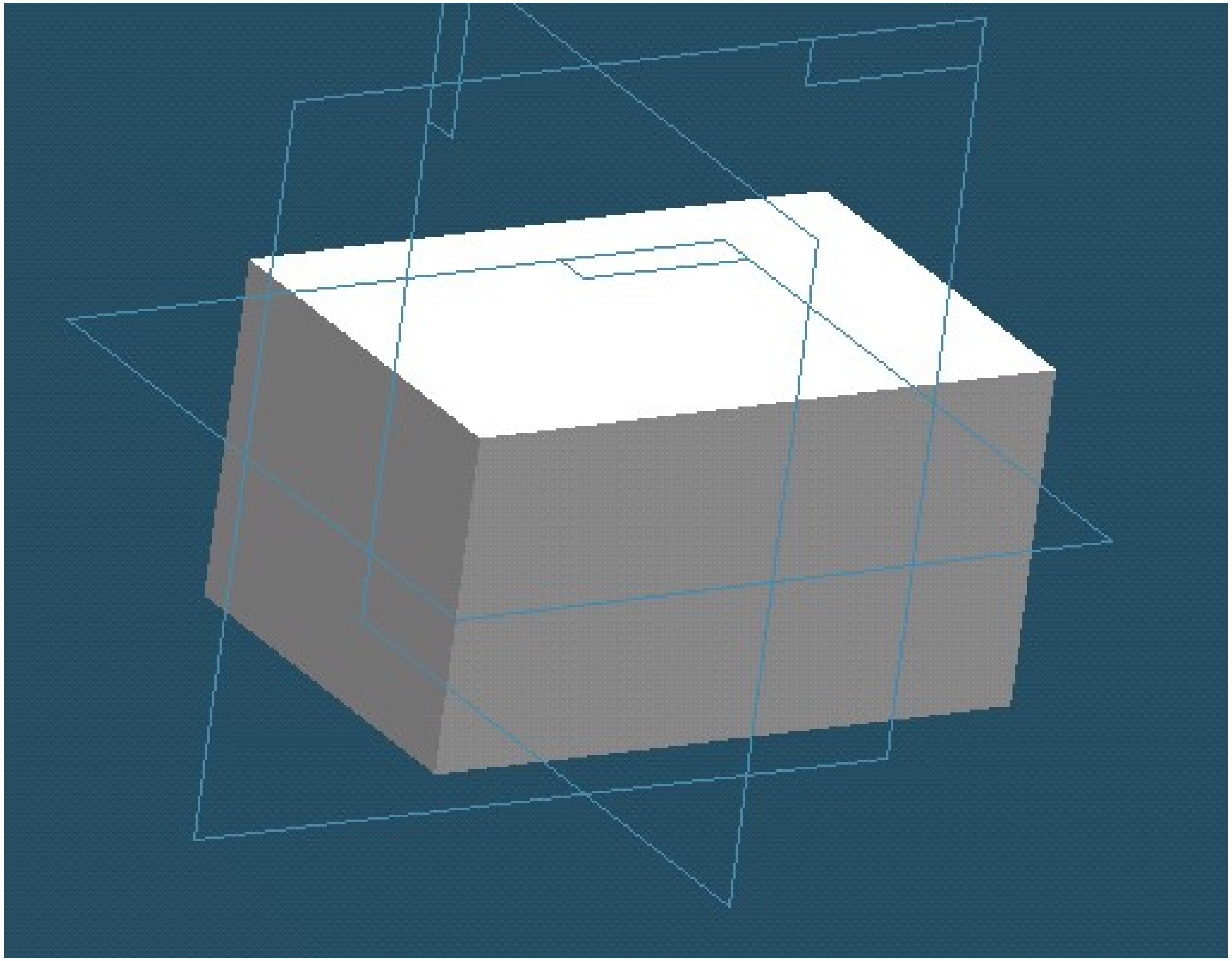
この例題の場合はCostの式から解析的に解けるが、例えばデータベースに基づいた計算などが加わると解析的に求められないので、解候補を次々代入して改善するしかない

箱の寸法デザイン問題におけるコスト関数の景観

最小値をとるパラメータは2箇所に存在

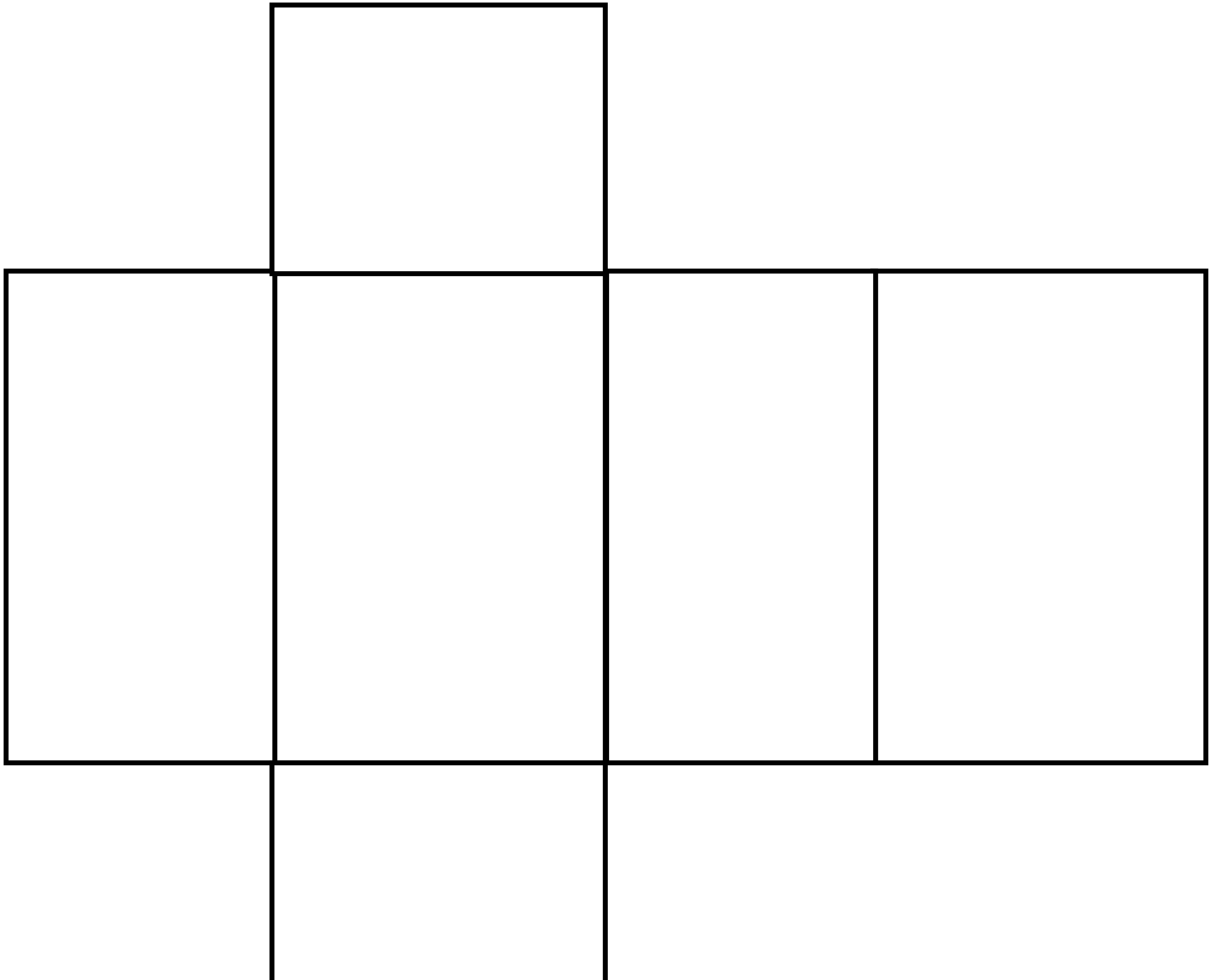


箱の寸法デザイン問題：解答



各辺の比率　1　:　0.67676　:　0.54626

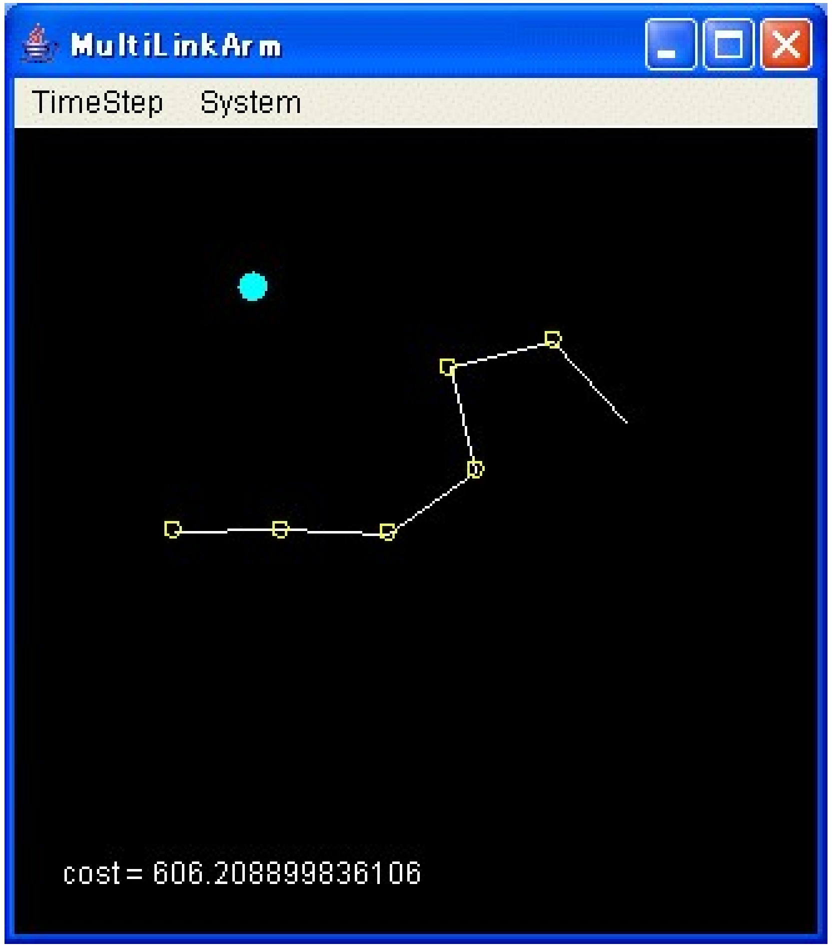
このときのコスト:　0.09117

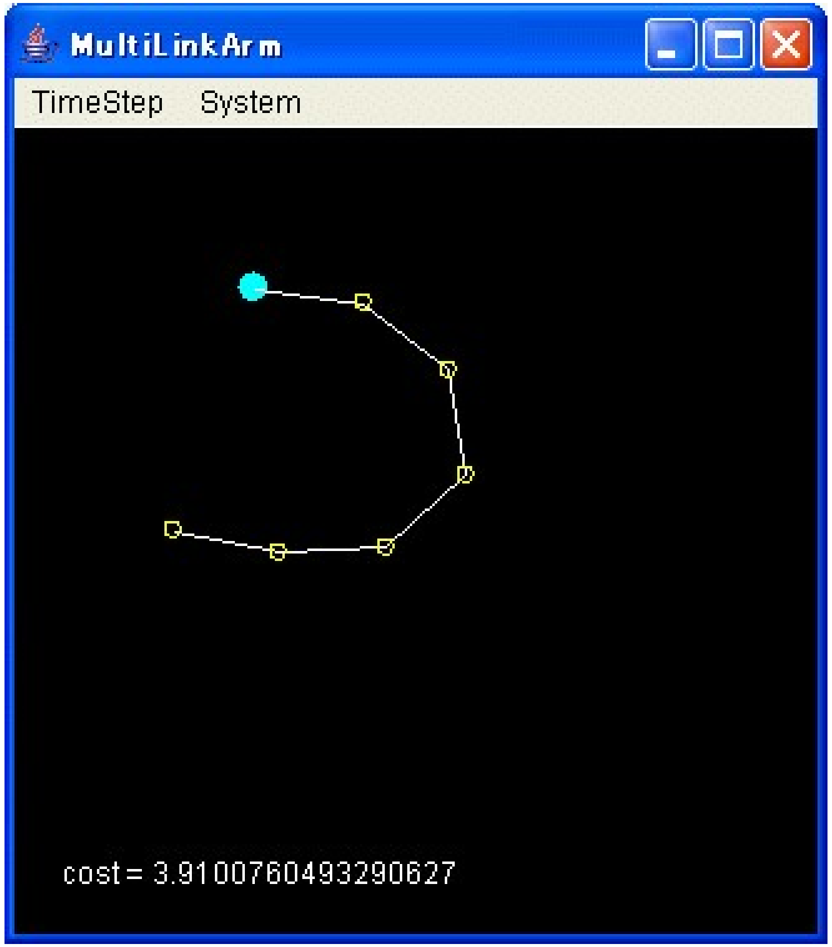


【例：冗長自由度アームのリーチング問題】

●各関節の角度をパラメータとして、アーム先端がターゲット座標に一致するパラメータを求める問題。ただし、各関節はリンク同士を±90度以内で繋ぐ制約があるので、なるべく関節の可動角度中央付近の角度にすることが好ましい。

コスト関数＝（アーム先端座標とターゲット座標の偏差の2乗）
　　　　　　＋（各関節の可動中央角度からの偏差の2乗）



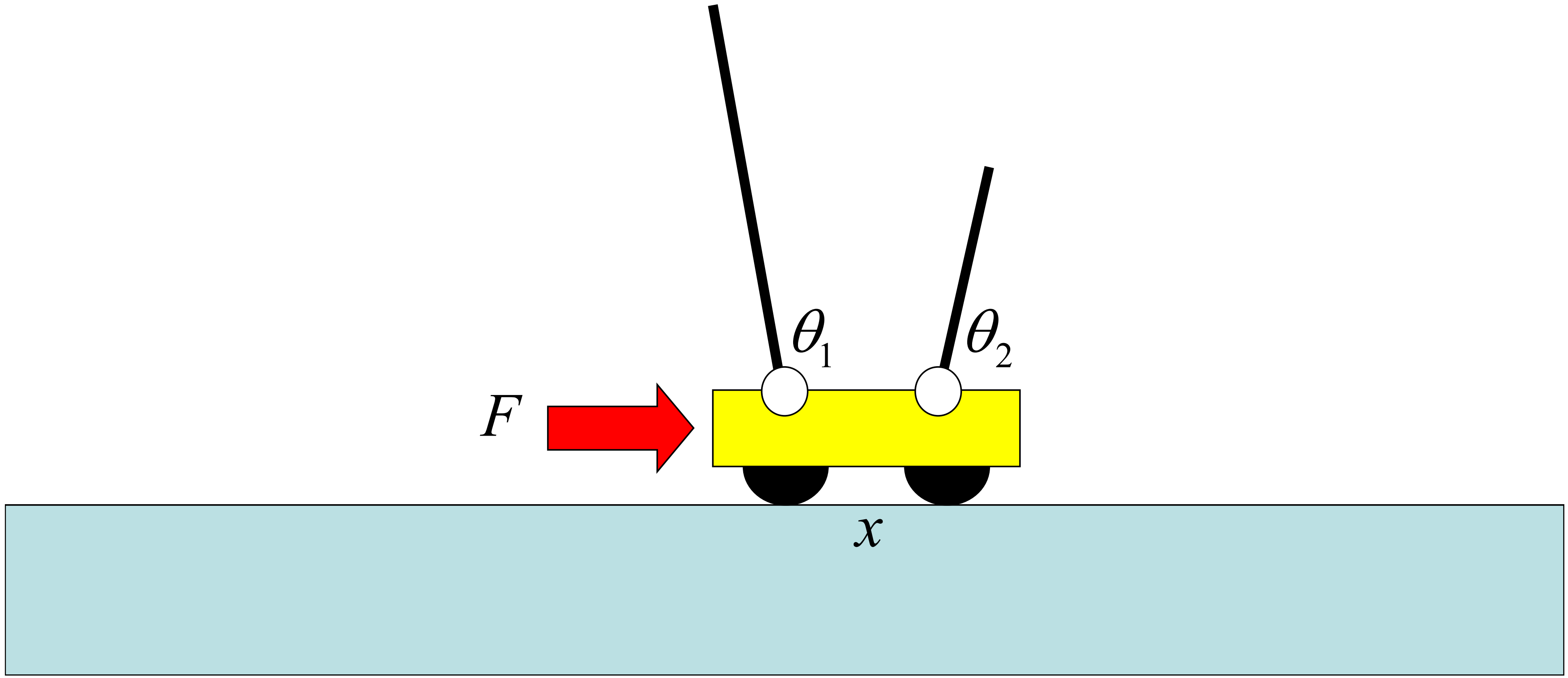


【例：二重倒立振子制御問題】

●台車の位置と速度、および2本の振子（棒）のそれぞれの角度と角速度の計6つの状態量を用いて、2本の棒が倒立した状態で安定して立つように台車を動かすようなコントローラのフィードバックゲインを設計する。ただし台車に作用させる力を制御する。

$$F = w_1 x + w_2 \dot{x} + w_3 \theta_1 + w_4 \dot{\theta}_1 + w_5 \theta_2 + w_6 \dot{\theta}_2$$

コスト関数＝（10000 － steps）　ただし倒れた時点あるいは10000stepで打切り
1 step =0.02 sec



かなり粗い

10個のパラメータを持つ問題において、各パラメータが0～1の区間の値をとるものとして、**各パラメータを 0.1 刻み**で全てのパラメータの組合せを評価すると、評価回数は 11 の10 乗、これをおおよそ 10 の10乗で近似しても、 10,000,000,000 回、すなわち（百億回）必要になる。

1回の評価に1秒かかるものとすると、計算には 317年 を要する

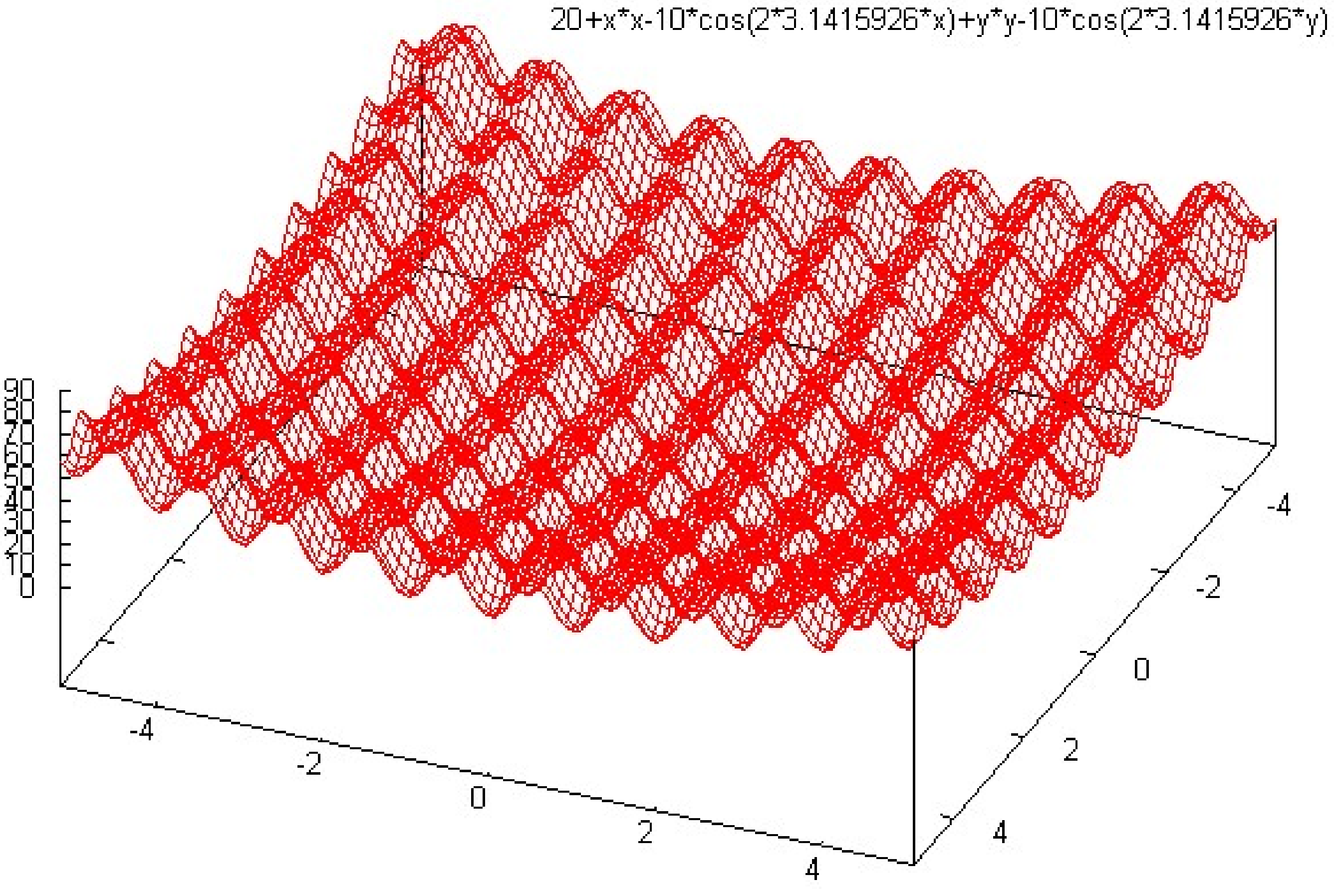
パラメータの探し方（探索方法）を工夫しなければ
答えを見つけることができない

ベンチマーク問題： Rastrigin関数

コスト関数

$$f(x_1, x_2, \cdots x_n) = 10n + \sum_{i=1}^{n} \left(x_i^{\ 2} - 10\cos(2\pi\, x_i) \right)$$

ただし　　$-5.12 < x_i < 5.12$



n=2の場合の
コスト関数の景観

・局所解が多数存在する多峰性関数

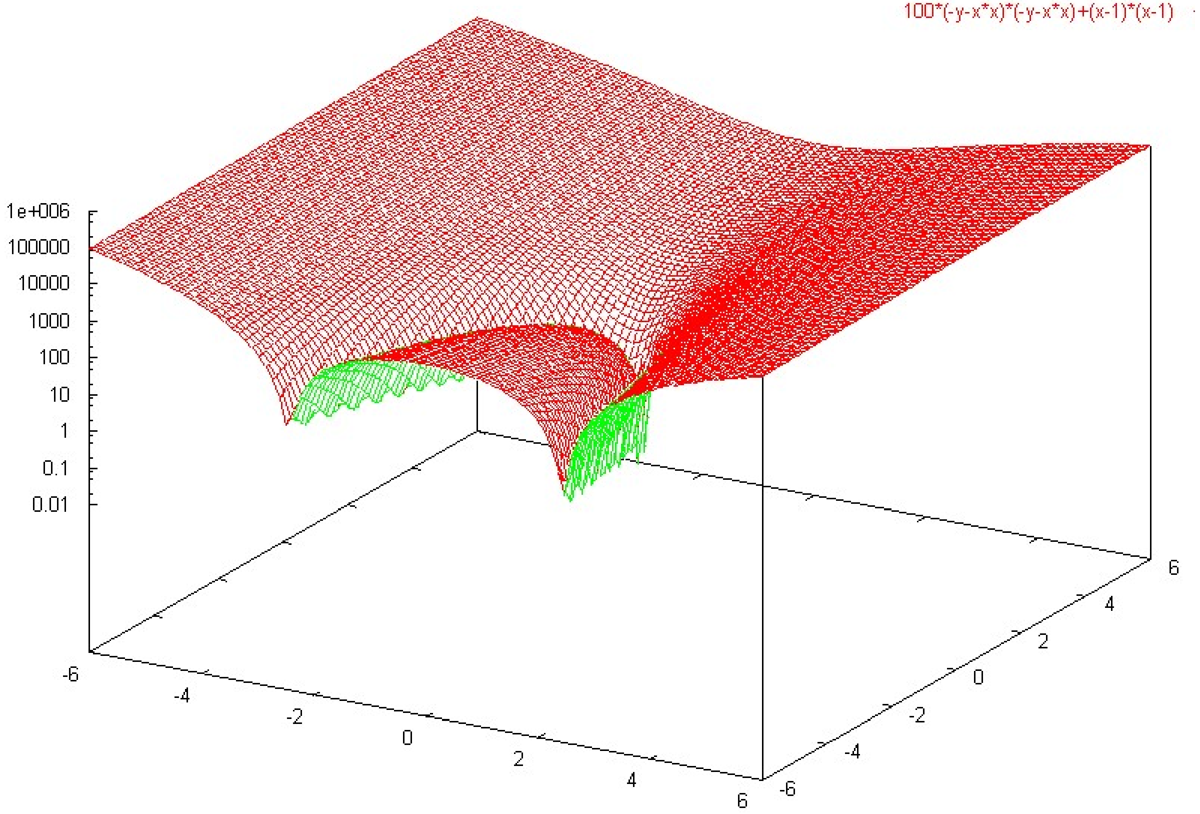
・探索域中心（全て0）に最適解が存在し、その周辺に格子状に複数の局所解を持つ。

ベンチマーク問題:　Rosenbrock関数

コスト関数

$$f(x_1, x_2, \cdots x_n) = \sum_{i=1}^{n-1} \left\{ 100\left(x_i^2 - x_{i-1}^2\right) + (1 - x_i)^2 \right\}$$

ただし　$-2.048 < x_i < 2.048$



n=2の場合の
コスト関数の景観

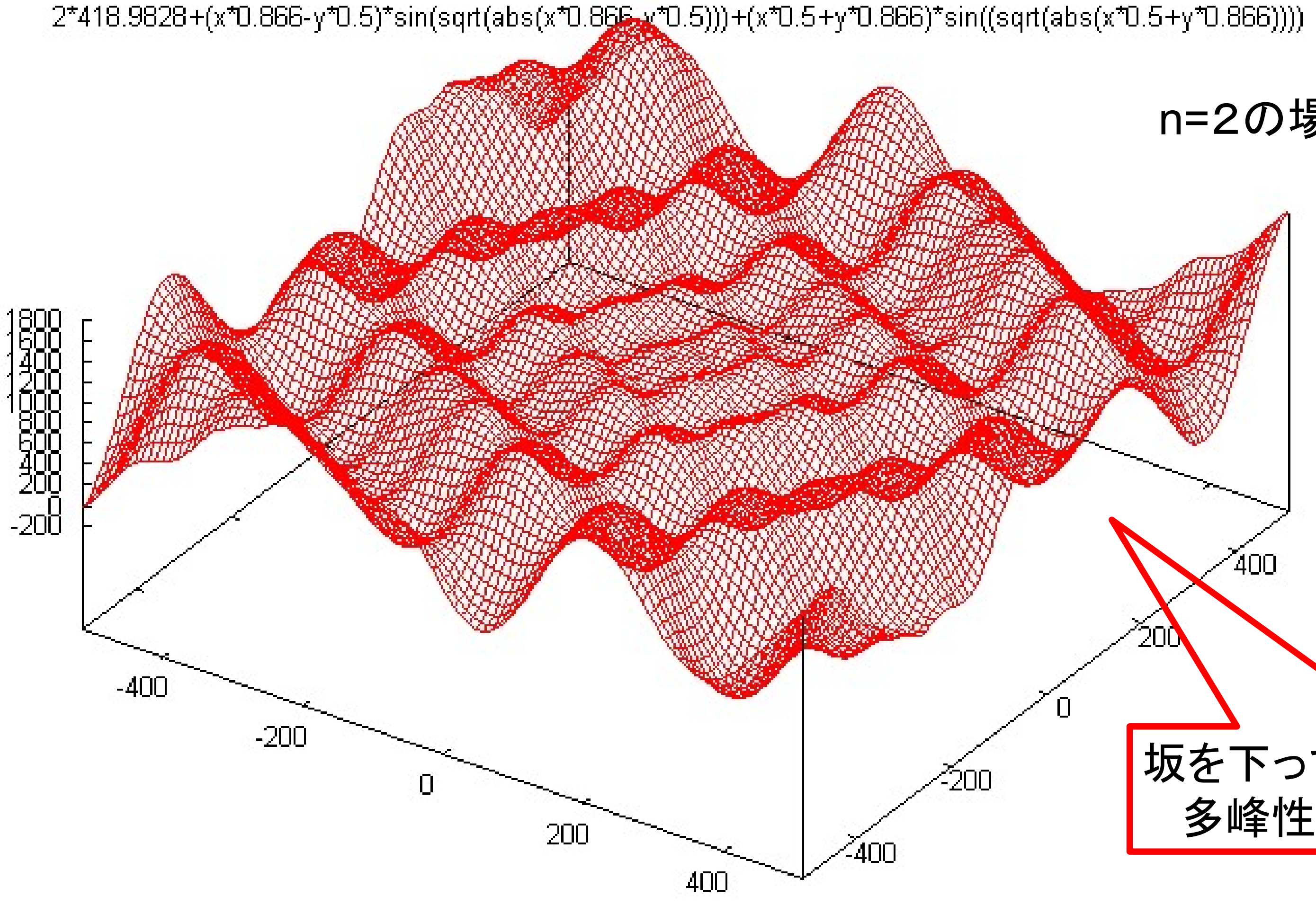
極小点＝最小点は1つしか無いが、
そこへたどり着くには
長くて曲がりくねった谷を
辿らねばならない
=変数間の依存関係が強い

ベンチマーク問題： Schwefel関数

コスト関数

$$f(x_1, x_2, \cdots x_n) = \sum_{i=1}^{n} - x_i \sin\left(\sqrt{|x_i|}\right)$$

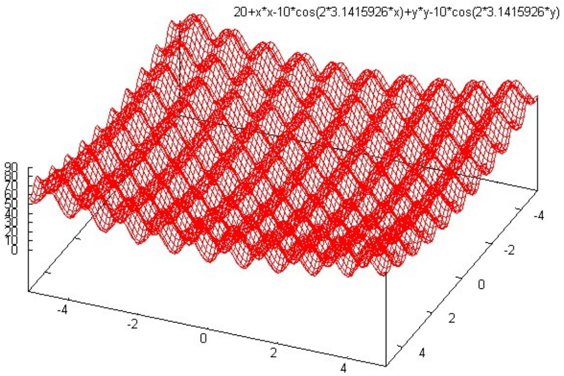
ただし $-512 < x_i < 512$

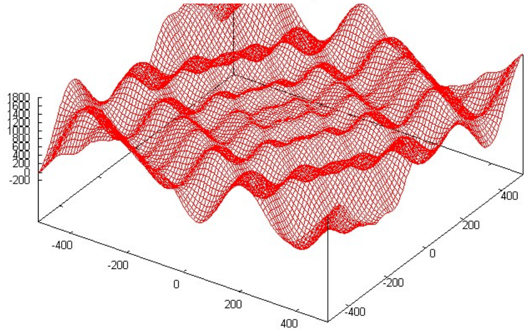


n=2の場合のコスト関数の景観

- 局所解が多数存在する多峰性関数
- 最適解が探索領域の境界付近に存在

坂を下っていくだけの勾配法は、多峰性関数には使えない！





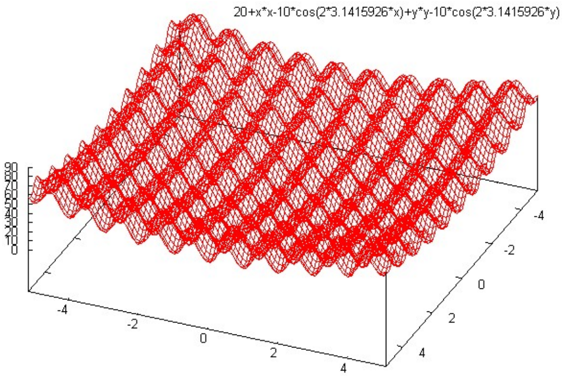
勾配法＝勾配を下って極小値を探す方法

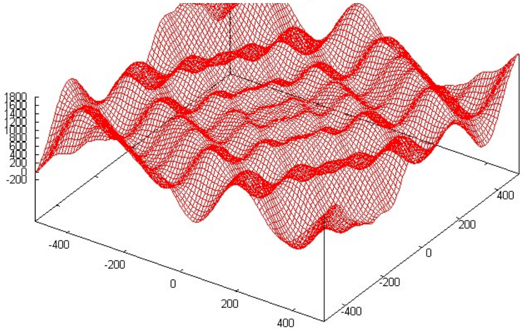
多峰性関数に勾配法は使えない！

【解決策】

1. ランダムに動く

2. 多点で探す





勾配法＝勾配を下って極小値を探す方法

多峰性関数に勾配法は使えない！

【解決策】

1. ランダムに動く

2. 多点で探す

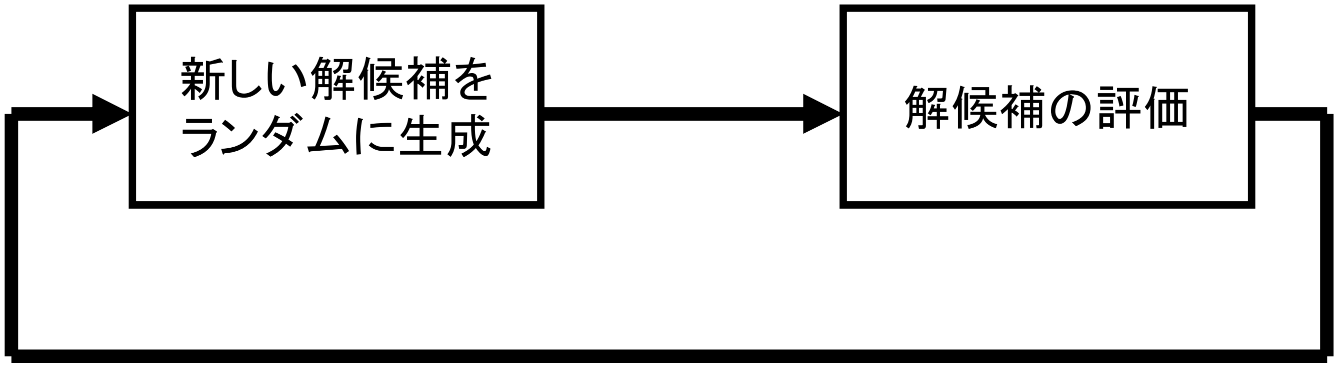
【ランダムサーチ・網羅探索による最適化】

モンテカルロ法とも呼ばれる
全数探索と同義な場合と区別する場合がある

・最も単純な方法で、どんな問題に対しても適用可能
・時間さえかければ、理屈の上ではいつかは最適解を発見できる
・今まで生成した解候補と評価値を参考にしないので、**探索効率は悪い**

探索性能の下限としての比較対象

ランダムサーチによる最適化のプロセス：



それまで見つけた最良の解候補よりも高い評価値だった場合、
最良解候補を置き換える

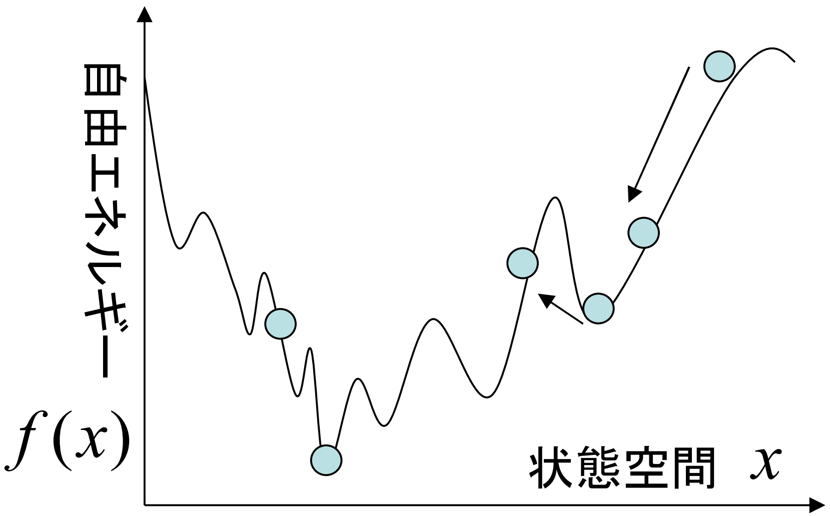
【焼きなまし法(simulated annealing)による最適化】

統計物理学からのアナロジー：

・物質の分子結晶はいろいろな状態を遷移
・エネルギーの低い状態へ遷移しやすい傾向
・温度を下げるとエネルギー極小状態へ到達
・温度を一気に下げると局所的極小状態へ
・温度をゆっくり下げると大域的極小状態へ

「状態」 → 解候補
「エネルギー」 → 評価値

エネルギー最小状態＝最適解
とした最適化のプロセス



システムがある状態 x_i になっている確率

$$\mathrm{P}(x_i \mid T) = \frac{\exp(-f(x_i)/T)}{\sum_{x \in S} \exp(-f(x)/T)}$$

ギブス分布（ボルツマン分布）
Tは温度パラメータ

エネルギーの低い状態ほど確率が高い

特徴：

1）時間をかければかけるほど解候補が改善され、
　十分時間をかければ最適解の発見が保障される
2）連続関数最適化，および組合せ問題最適化の両方に適用できる

【焼きなまし法(simulated annealing)による最適化】

処理手順

1） 初期解候補 x を生成

2） 何らかの確率分布によって解候補 x から次の解候補 x' を生成
（ランダムに x の近傍を選ぶことが多い）

3） 次の確率に従って乱数Zを生成：
ただしZは0または1の値をとる

$$P(Z=1)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{f(x')-f(x)}{T(t)}\right)}$$

ただし温度関数 $T(t)=\frac{k}{\ln(t+2)}$

4） $Z=1$ のとき x を x' に置換える、

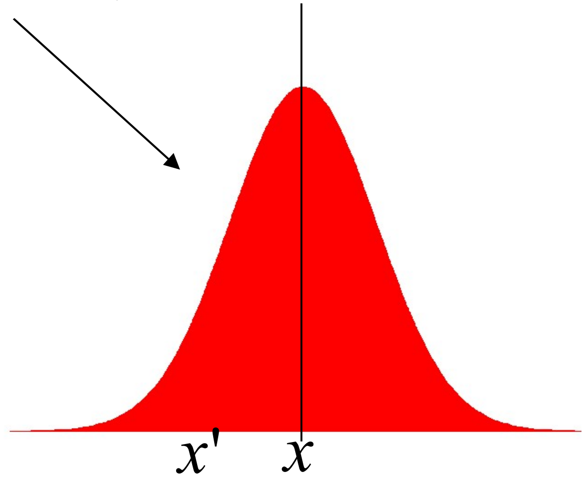
5）時刻 t を1進めて2）から繰返す

これでは収束が遅すぎて非実用的
k/t の関数にすることもある

「近傍」の解候補の生成方法

1） 数値最適化問題の場合： 解候補 x は連続値パラメータなので、
中心値 x, 分散 σ^2 の正規分布によって生成： $x' = N(x, \sigma^2)$

分散のパラメータは設計者が問題に応じて適当に与える
時間とともに小さくしていく場合もある



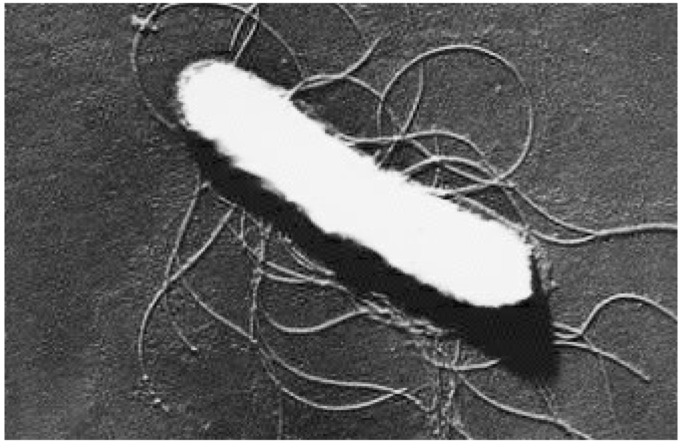
2） 組合せ最適化の場合：
まず解候補の「近傍」を定義する必要がある
→ 問題毎に個別に設定： 実行可能な表現になるよう工夫を要する

例1） TSP
順列中の都市を入れ替える ABCDEF → AECDBF
順列中の部分順列を移動するなど ABCDEF → ACDEBF

例2） SAT
論理変数の論理を反転させる 1011101 → 1001101

【参考】

大腸菌の走性

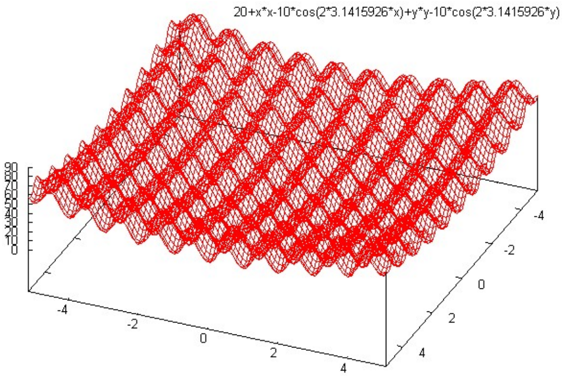


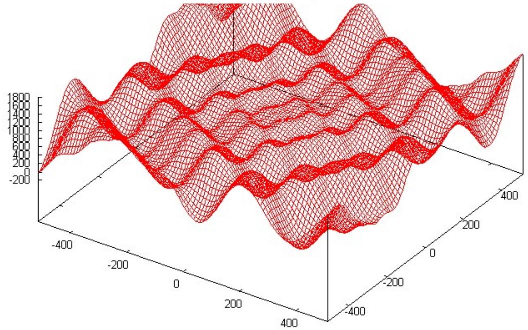
2～3秒間の直線的運動と、
0.1秒ほどのランダムな方向転換
の繰り返し

化学的濃度が低い（要するにエサが少ない）場合には活発に動き回り、
濃度の高い領域ではあまり動かないようにすることでエサのある場所へ集まる

⇩

焼きなまし法によく似た探索をしている





勾配法＝勾配を下って極小値を探す方法

多峰性関数に勾配法は使えない！

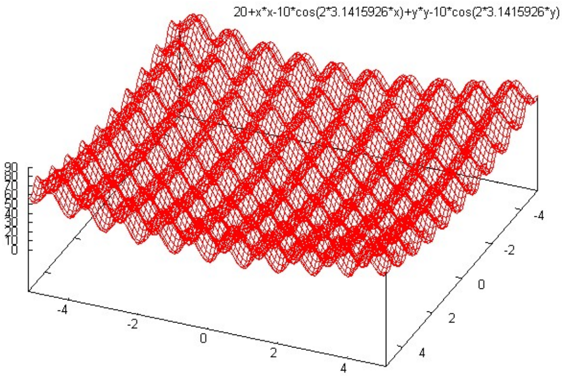
【解決策】

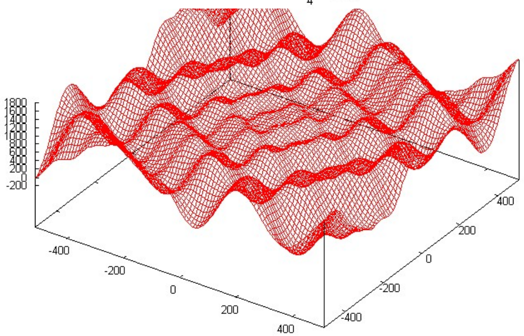
ランダムサーチ

SA

1. ランダムに動く

2. 多点で探す





勾配法＝勾配を下って極小値を探す方法

多峰性関数に勾配法は使えない！

【解決策】

1. ランダムに動く

2. 多点で探す

滑降シンプレックス法

【制約のない関数最適化】 滑降シンプレックス法

関数の勾配を計算せず、多点探索で最小値を得る

N次元変数関数に対してN+1コ以上のシンプレックス（探索点） x_j について以下を定義

1) 目的関数値が最大の点 x_h ← 関数最小化なので、最悪の点
2) 目的関数値が2番目に大きい点 x_s
3) 目的関数値が最小の点 x_l ← 関数最小化なので、最良点
4) i = h なる点を除いた全ての x_j の重心 x_g

(操作1：反射) x_h を以下の x_r で置き換える：

$$x_r = (1+\alpha)x_g - \alpha x_h$$ ，ただし $\alpha > 0$ は反射係数

(操作2：拡大) $x_g - x_r$ 方向に沿って x_r を以下の x_e に置き換える：

$$x_e = \gamma x_r + (1-\gamma)x_g$$ ，ただし $\gamma > 0$ は拡大係数

(操作3：縮小) x_h を以下の x_c で置き換える：

$$x_c = \beta x_h + (1-\beta)x_g$$ ，ただし $0 < \beta < 1$ は縮小係数

(操作4：収縮) シンプレックス全体を x_l の方向へ半分に縮小する

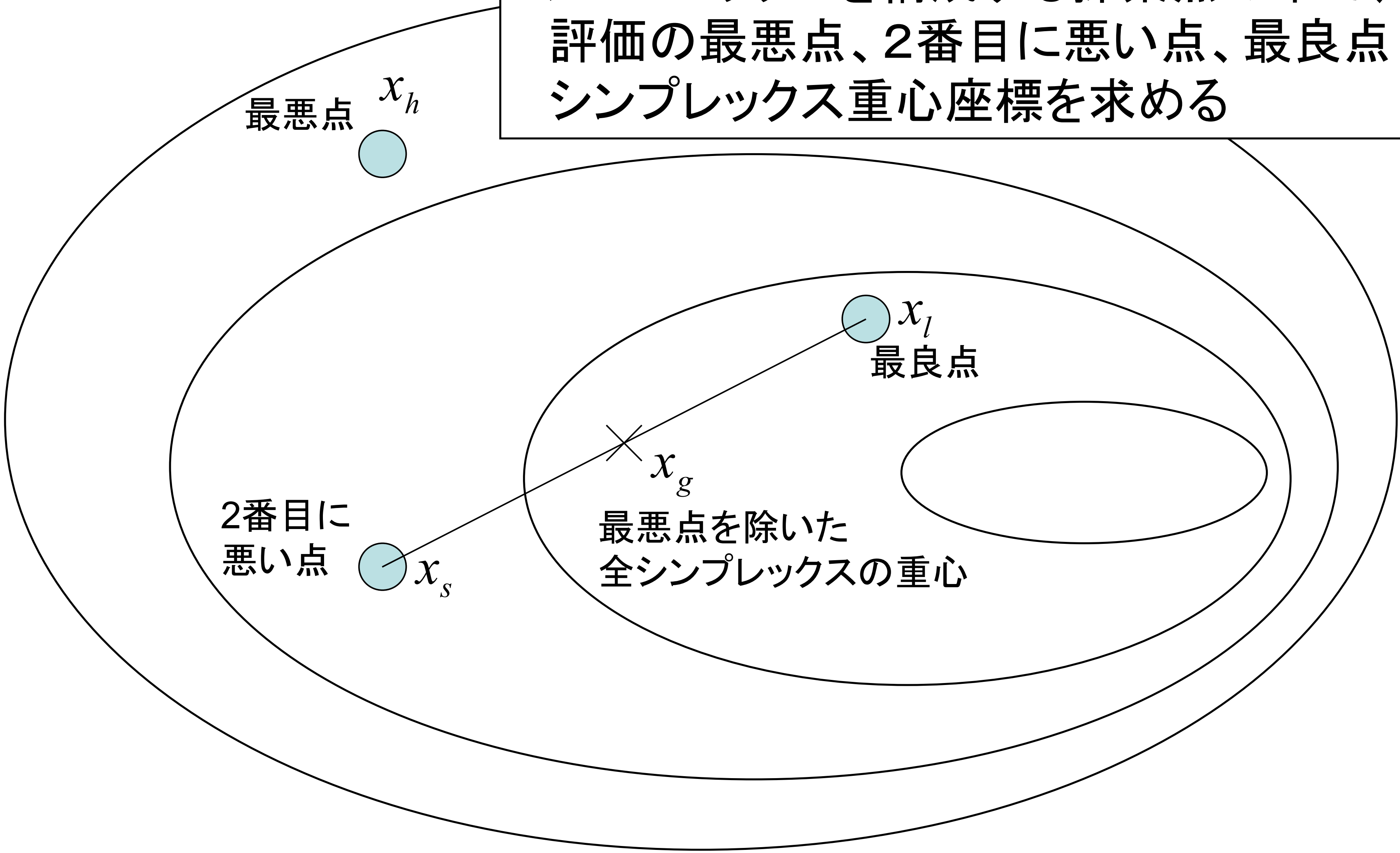
$$x_i = 0.5(x_l + x_i)$$ ，ただし $i = 1, \cdots n+1$

これらの操作を、次に述べる手順で組合せ，シンプレックスを更新する。
基本的に，最悪点をシンプレックス重心の逆側へ移動して関数値を小さくしていく。

$\alpha = 1, \quad \beta = 0.5, \quad \gamma = 2$ が経験的に良い

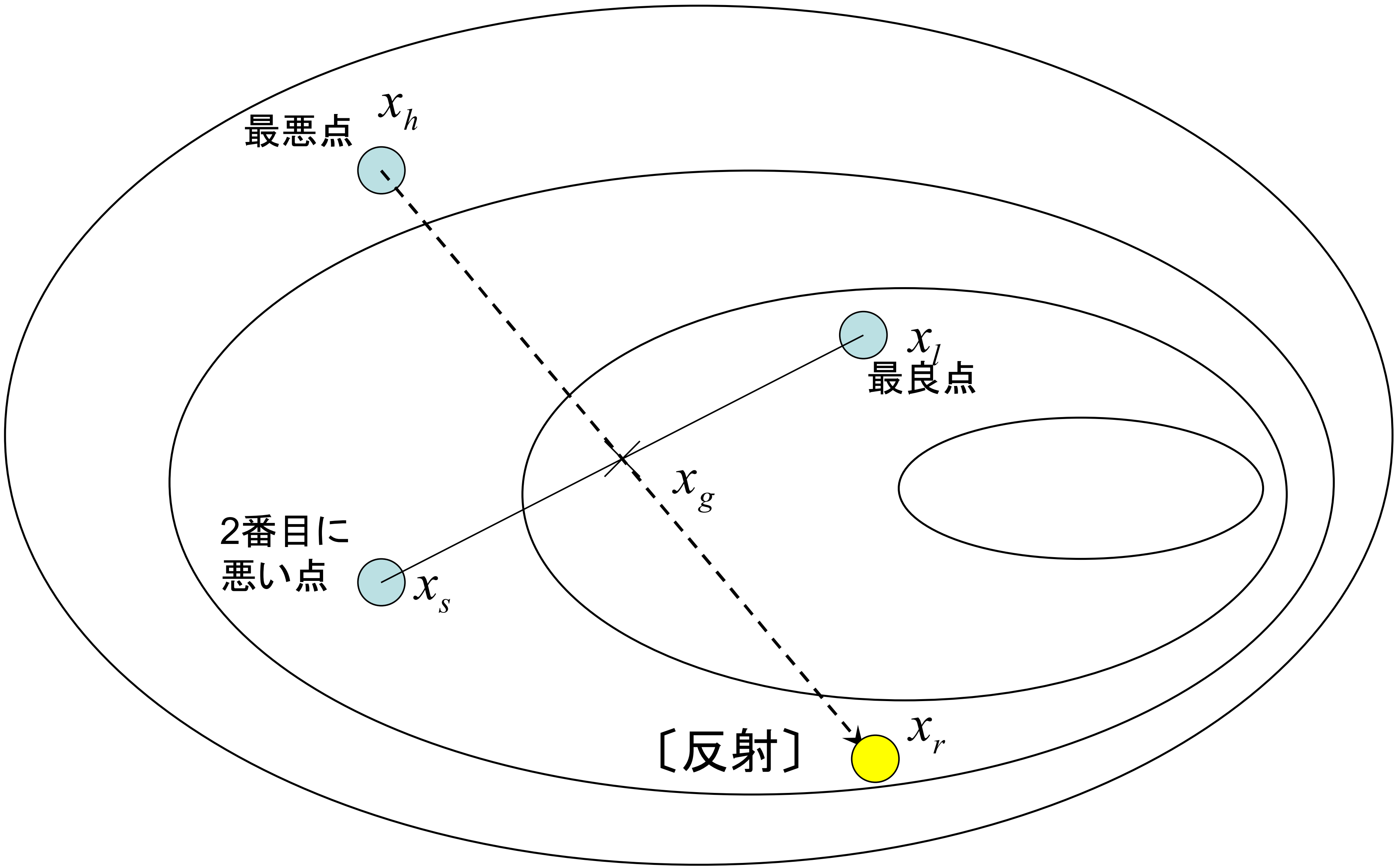
滑降シンプレックス法の動作　〔スタート〕

・シンプレックスを構成する探索点の中で、
評価の最悪点、2番目に悪い点、最良点
シンプレックス重心座標を求める



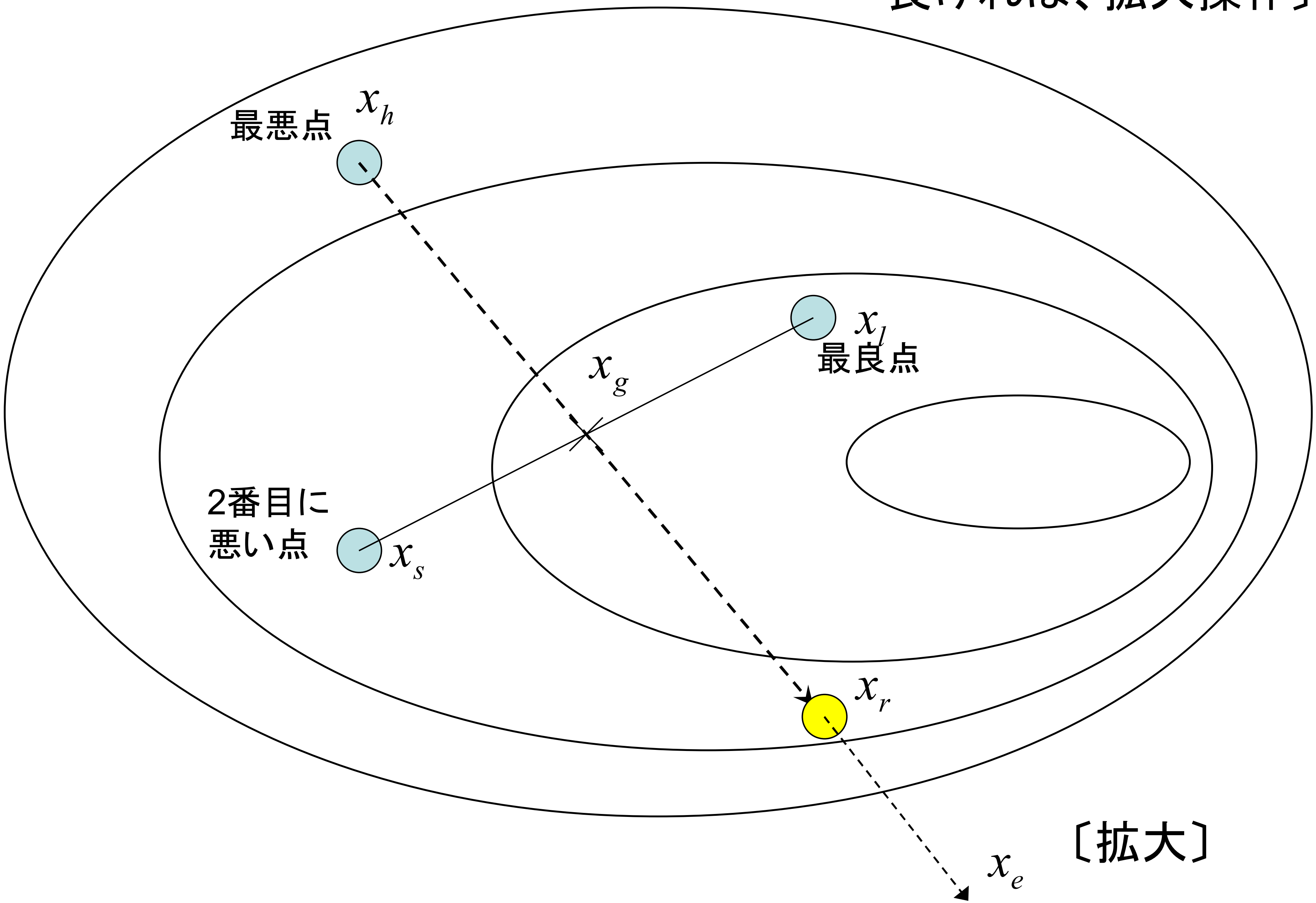
滑降シンプレックス法の動作

〔まずは反射操作〕



滑降シンプレックス法の動作

〔反射の結果が最良点より
良ければ、拡大操作〕

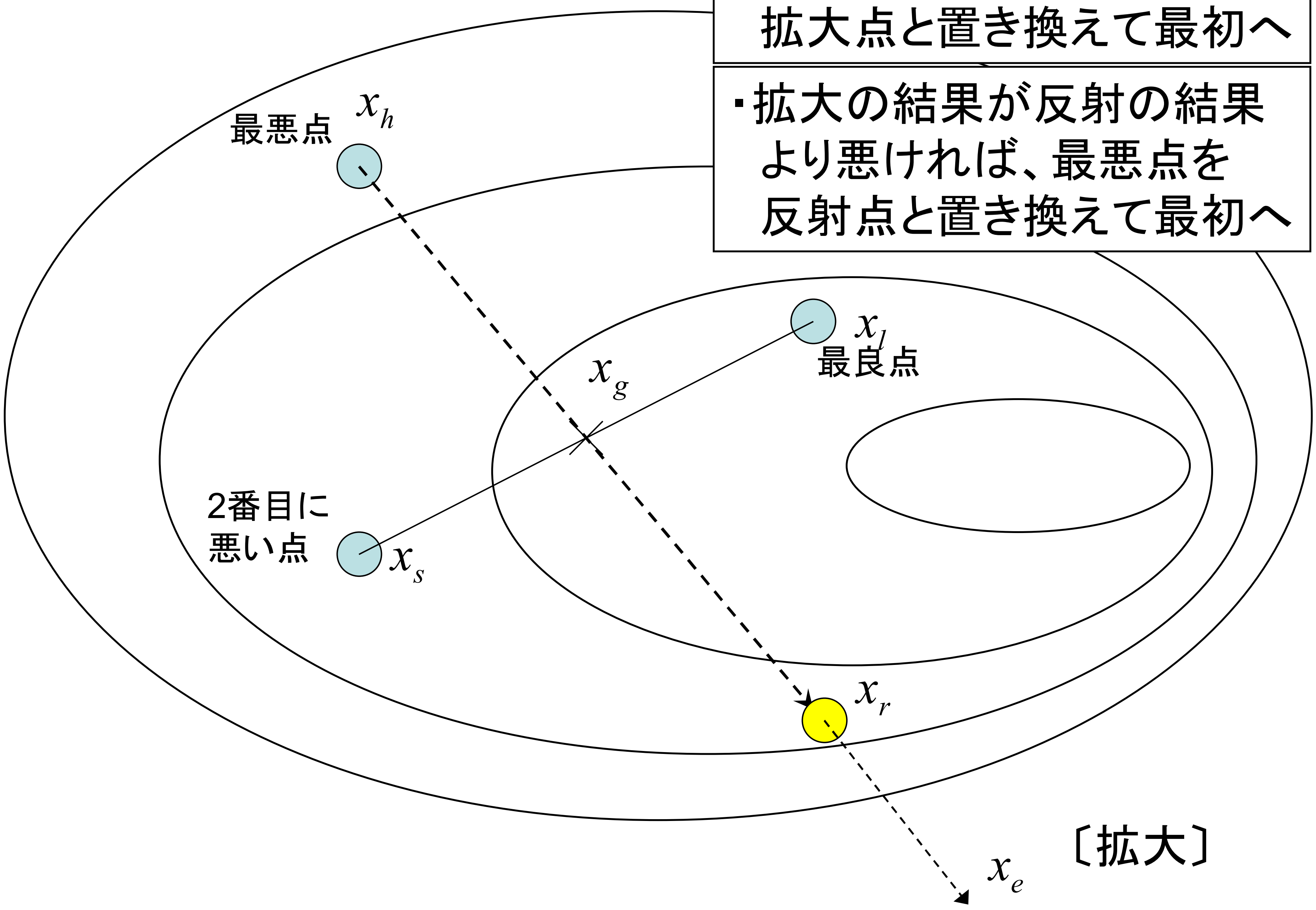


〔拡大〕

滑降シンプレックス法の動作

・拡大の結果が反射の結果より良ければ、最悪点を拡大点と置き換えて最初へ

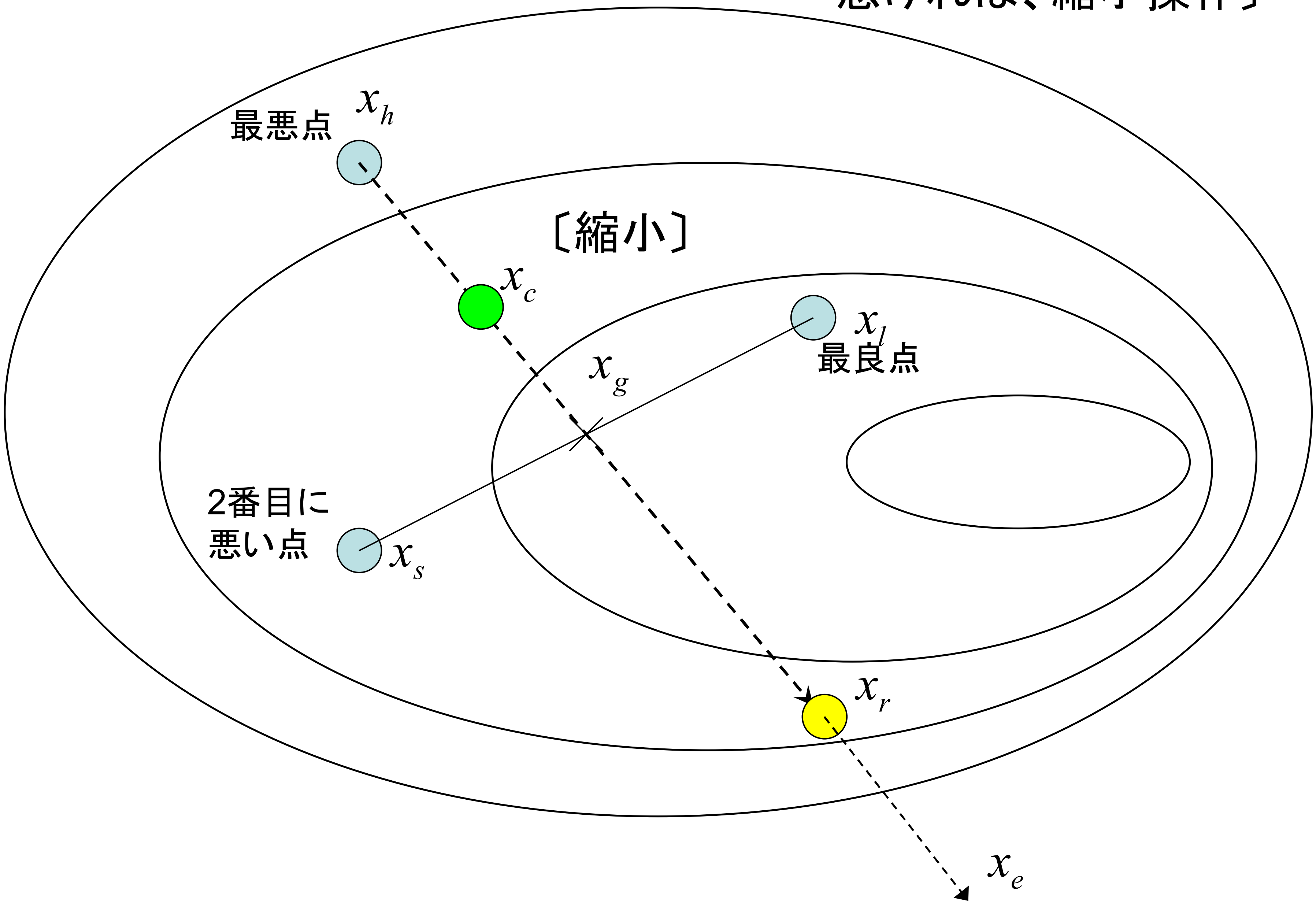
・拡大の結果が反射の結果より悪ければ、最悪点を反射点と置き換えて最初へ



〔拡大〕

滑降シンプレックス法の動作

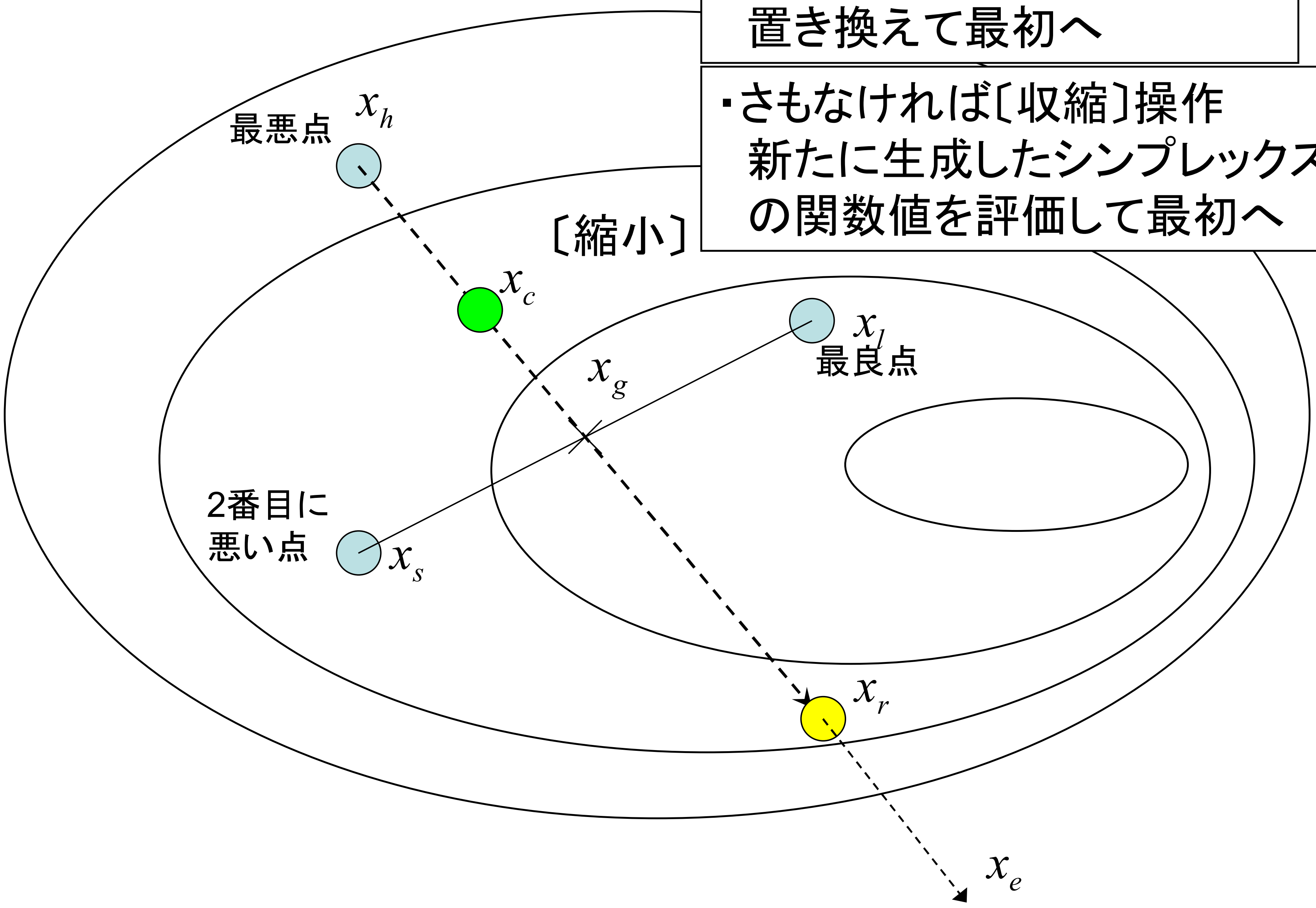
〔反射の結果が最悪点より
悪ければ、縮小操作〕



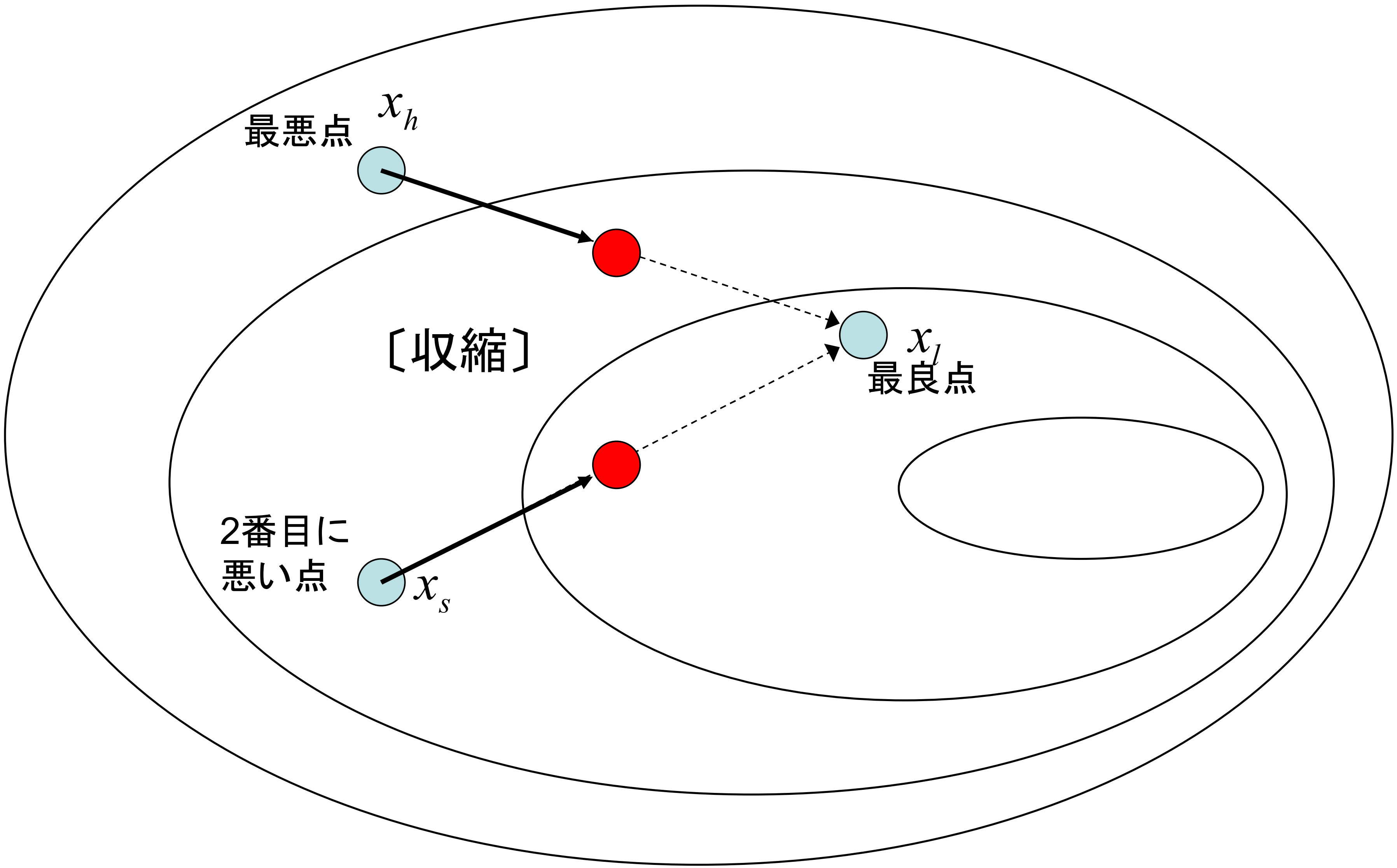
滑降シンプレックス法の動作

・縮小の結果が最悪点より良ければ、最悪点を縮小点と置き換えて最初へ

・さもなければ〔収縮〕操作
新たに生成したシンプレックスの関数値を評価して最初へ



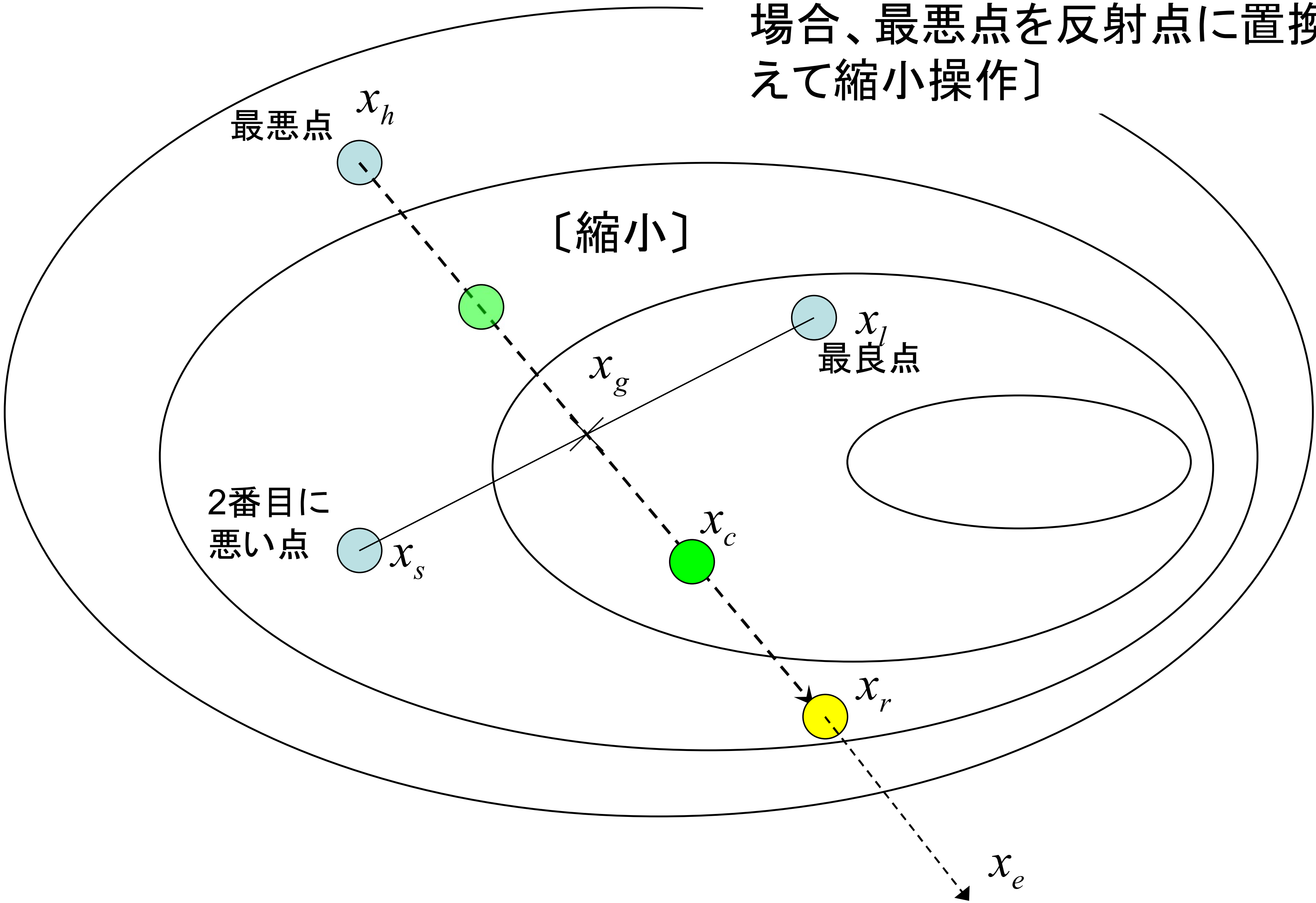
滑降シンプレックス法の動作



シンプレックス全体を最良点の方向へ移動 （最良点は動かない）

滑降シンプレックス法の動作

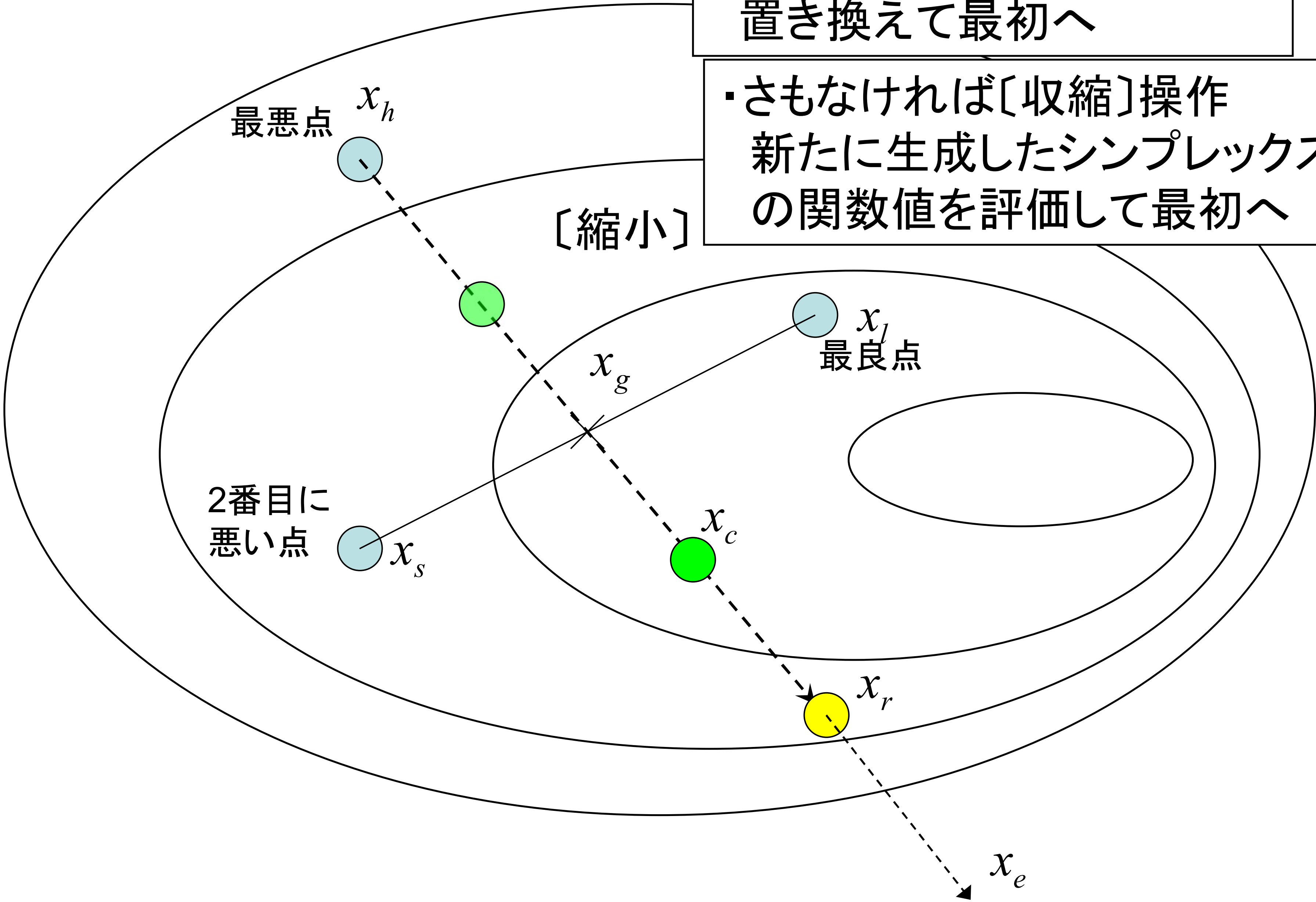
〔反射の結果が最悪点よりましだが2番目に悪い点より悪い場合、最悪点を反射点に置換えて縮小操作〕



滑降シンプレックス法の動作

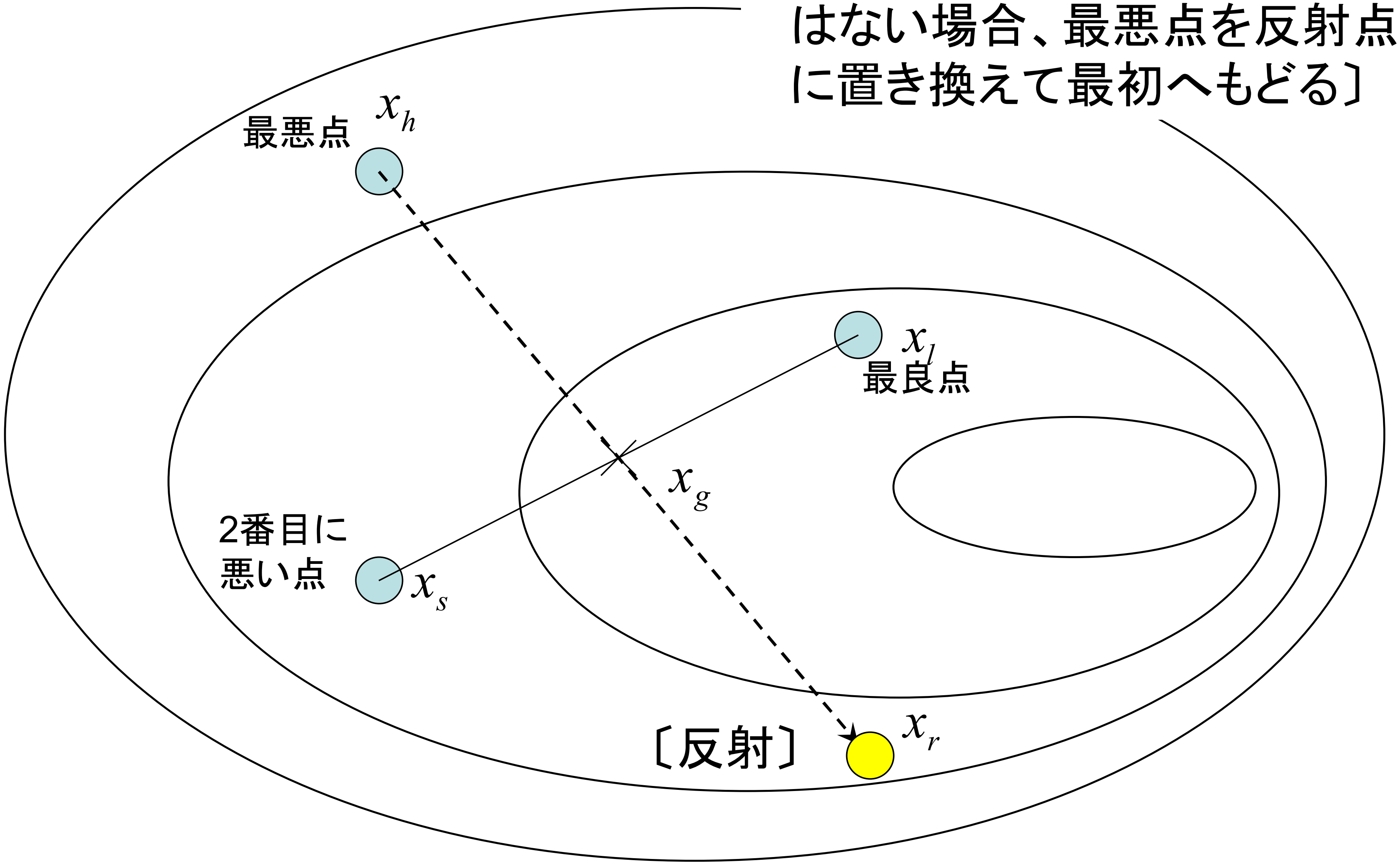
・縮小の結果が最悪点より良ければ、最悪点を縮小点と置き換えて最初へ

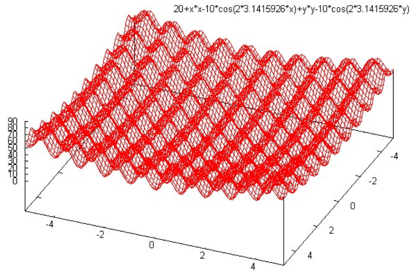
・さもなければ〔収縮〕操作
新たに生成したシンプレックスの関数値を評価して最初へ

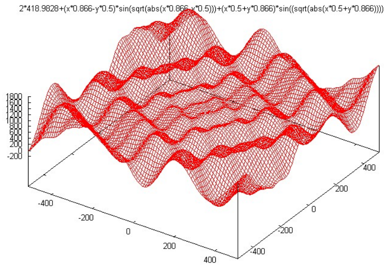


滑降シンプレックス法の動作

〔反射の結果が2番目に悪い点よりましだが最良点ほどではない場合、最悪点を反射点に置き換えて最初へもどる〕







勾配法＝勾配を下って極小値を探す方法

多峰性関数に勾配法は使えない！

【解決策】

1. ランダムに動く　→　ランダムサーチ・SA

2. 多点で探す　→　滑降シンプレックス法

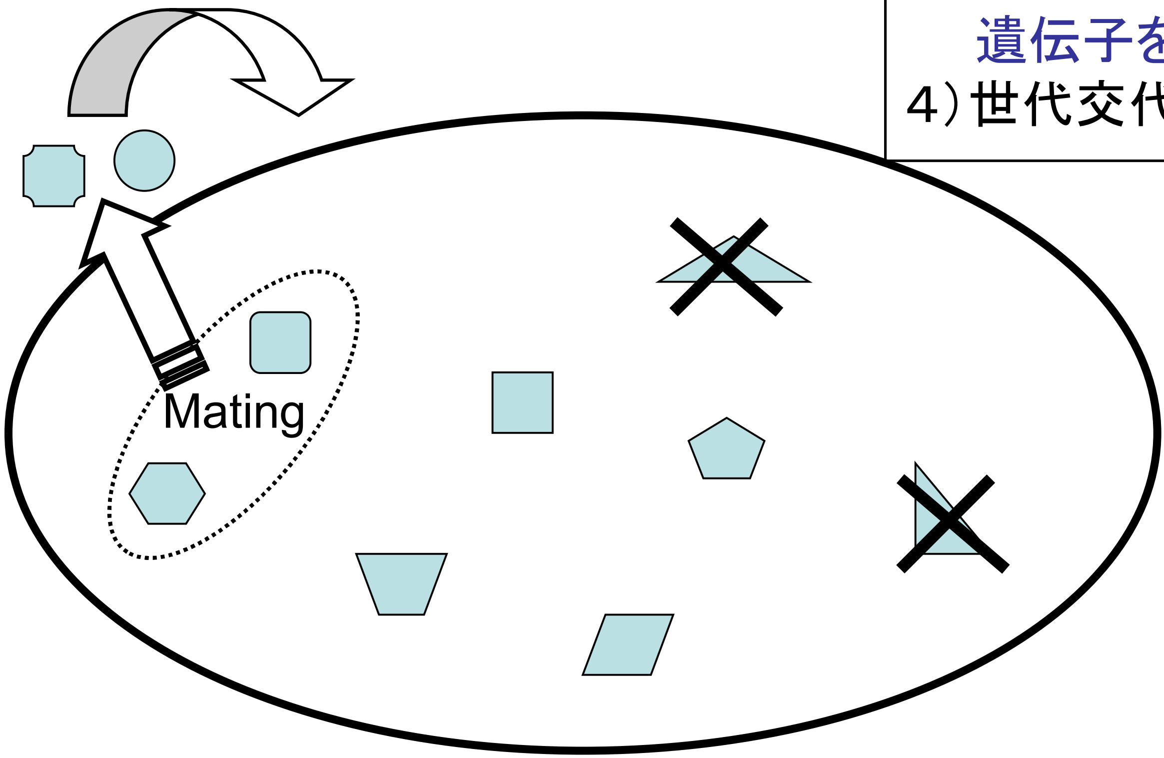
両方の特徴を併せ持つ最適化手法：遺伝的アルゴリズム

【遺伝的アルゴリズム（GA）による最適化】

生物の進化の仕組みを模倣

生物個体　→　遺伝子によるコード化
優れた個体　→　高い評価値・生存率

【一般的な処理手順】
1）設計したい物をパラメータ化　→　遺伝子
2）いろいろな個体を集めて集団を作り、
　個体を評価に応じて自然淘汰
3）生き残った個体同士で
　遺伝子を交換　→　新しい個体生成
4）世代交代を繰り返し、集団を進化



【探索の特徴】
・評価値の悪い個体でも
　生き残るチャンスが与えられる
・優れた親同士を掛け合わせる
　ことで、両親の優れた形質を
　受け継いだ子個体が生成される
・集団全体が進化していく

たった1つの解候補を改善していくよりも、
より優れた解や多様な評価を持つ複数の解を発見できる

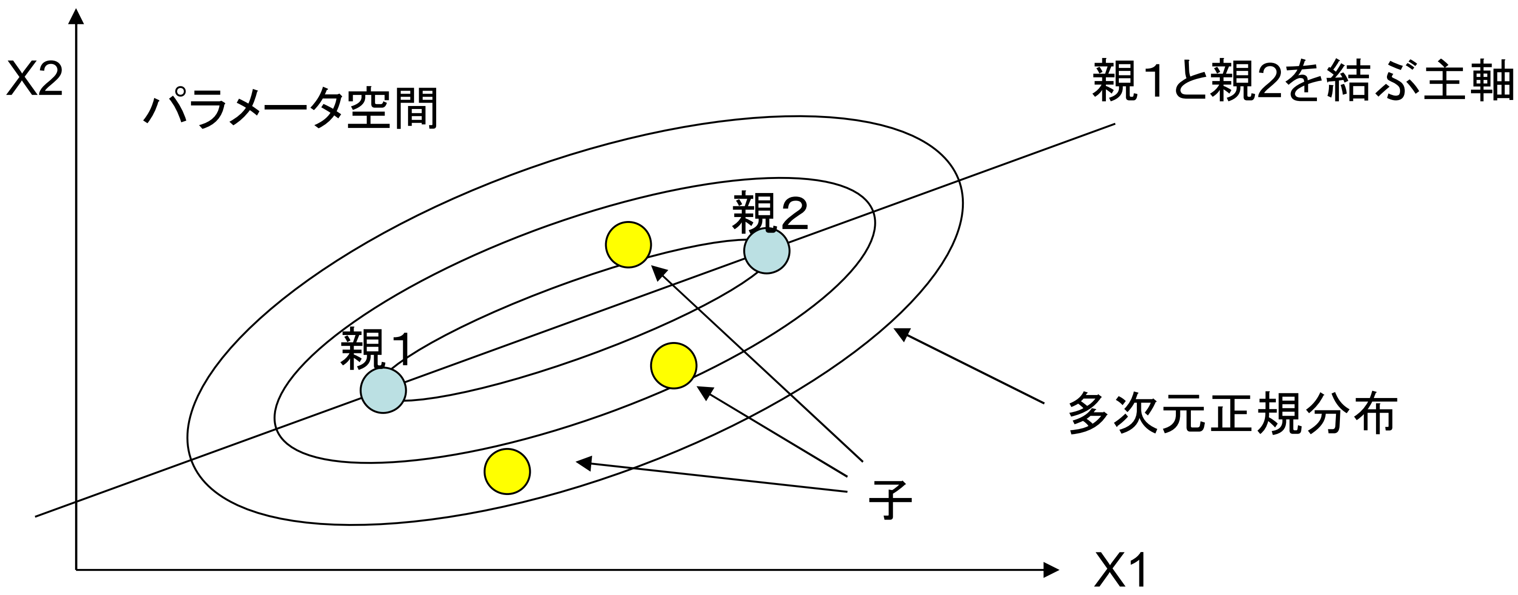
【遺伝的アルゴリズムによる最適化】

実数値 GA （RGA: Real-coded GA）

連続関数最適化問題における解候補の「形質」 ＝
解候補の類似性 ＝

２つの親個体から、「交叉」オペレーションにより
形質を継承した子個体を生成する → パラメータ空間でユークリッド幾何学的に考える

例） 正規分布交叉：UNDX



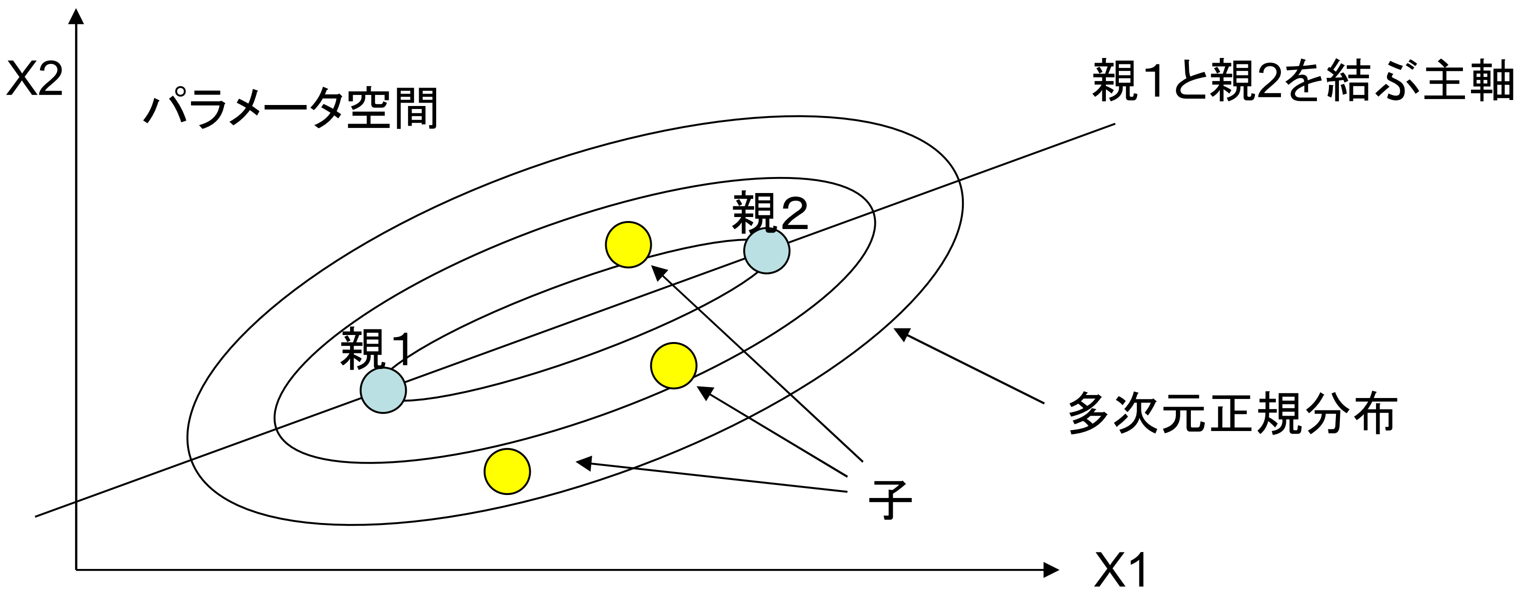
【遺伝的アルゴリズムによる最適化】

実数値 GA（RGA: Real-coded GA）

連続関数最適化問題における解候補の「形質」 ＝ パラメータ空間中の座標
解候補の類似性 ＝ パラメータ空間でのユークリッド距離

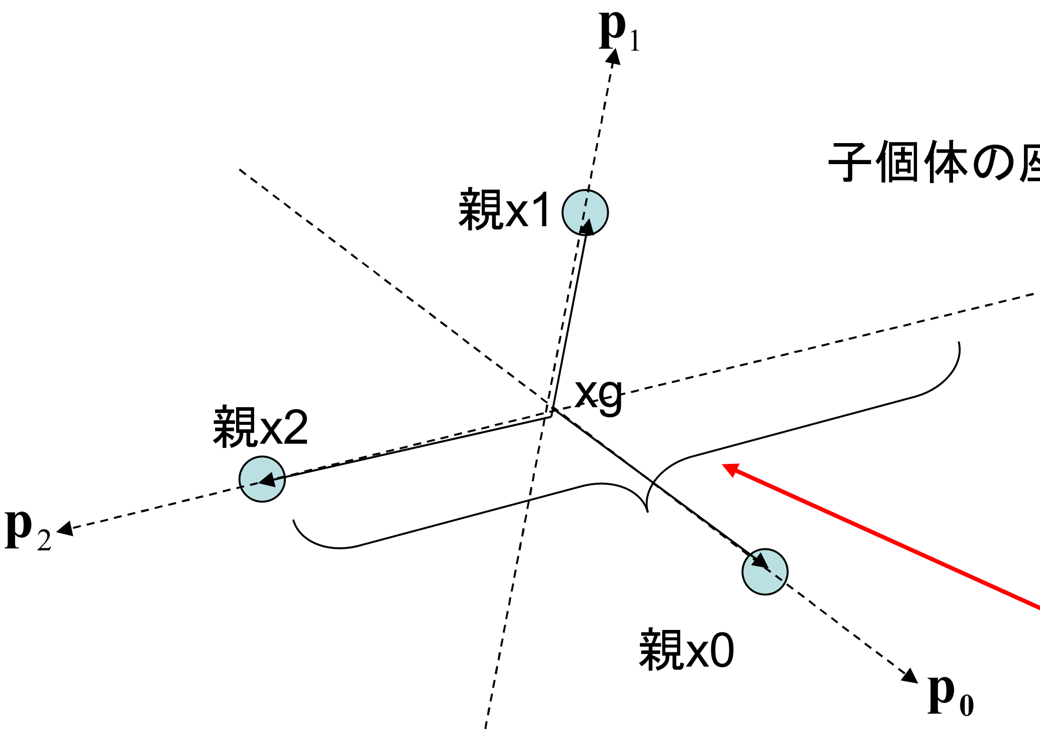
２つの親個体から、「交叉」オペレーションにより
形質を継承した子個体を生成する → パラメータ空間でユークリッド幾何学的に考える

例）正規分布交叉：UNDX



多親交叉REX ［小林2007］

対象とするコスト関数の次元数 n
交叉によって生成する子個体数 n＋k



子個体の座標 $x^c = x^g + \sum_{i=1}^{n+k} \xi_i \left(x_i - x^g \right)$

親個体の
重心の座標

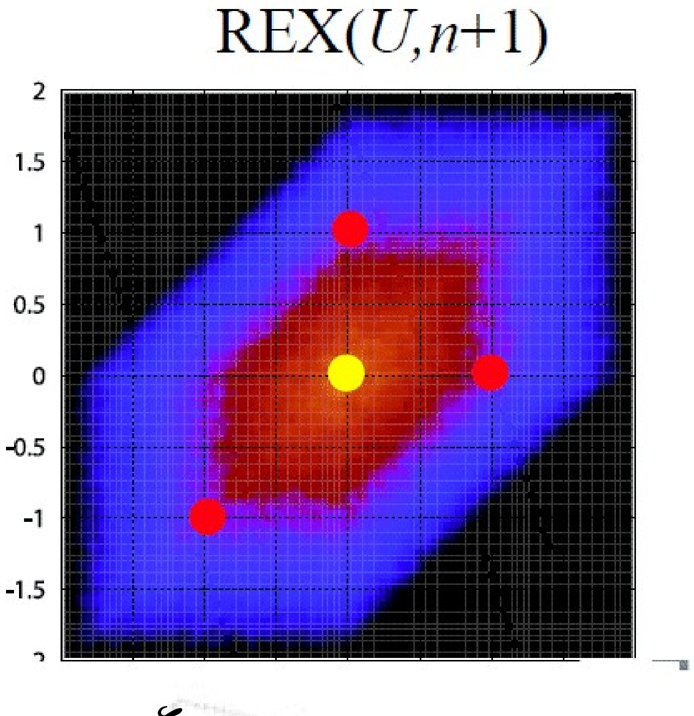
ξ_i

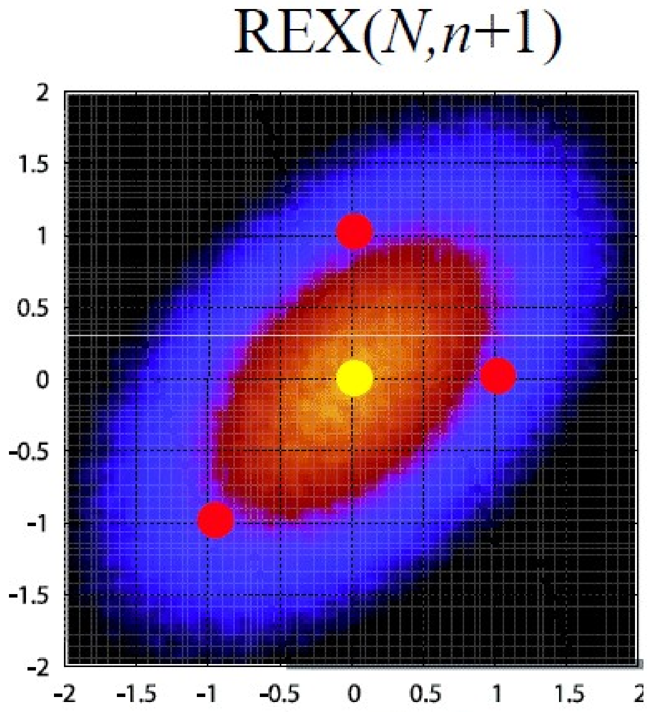
期待値0，分散 σ_ξ^2 の任意の
確率分布に従う確率変数
ただし

$$\sigma_\xi^2 = \frac{1}{n+k}$$

k＝0．5n～2．0n を推奨

多親交叉REX ［小林2007］





確率変数 ξ_i が一様分布に従う場合
ただし区間 ［−a, a］ で一様で、

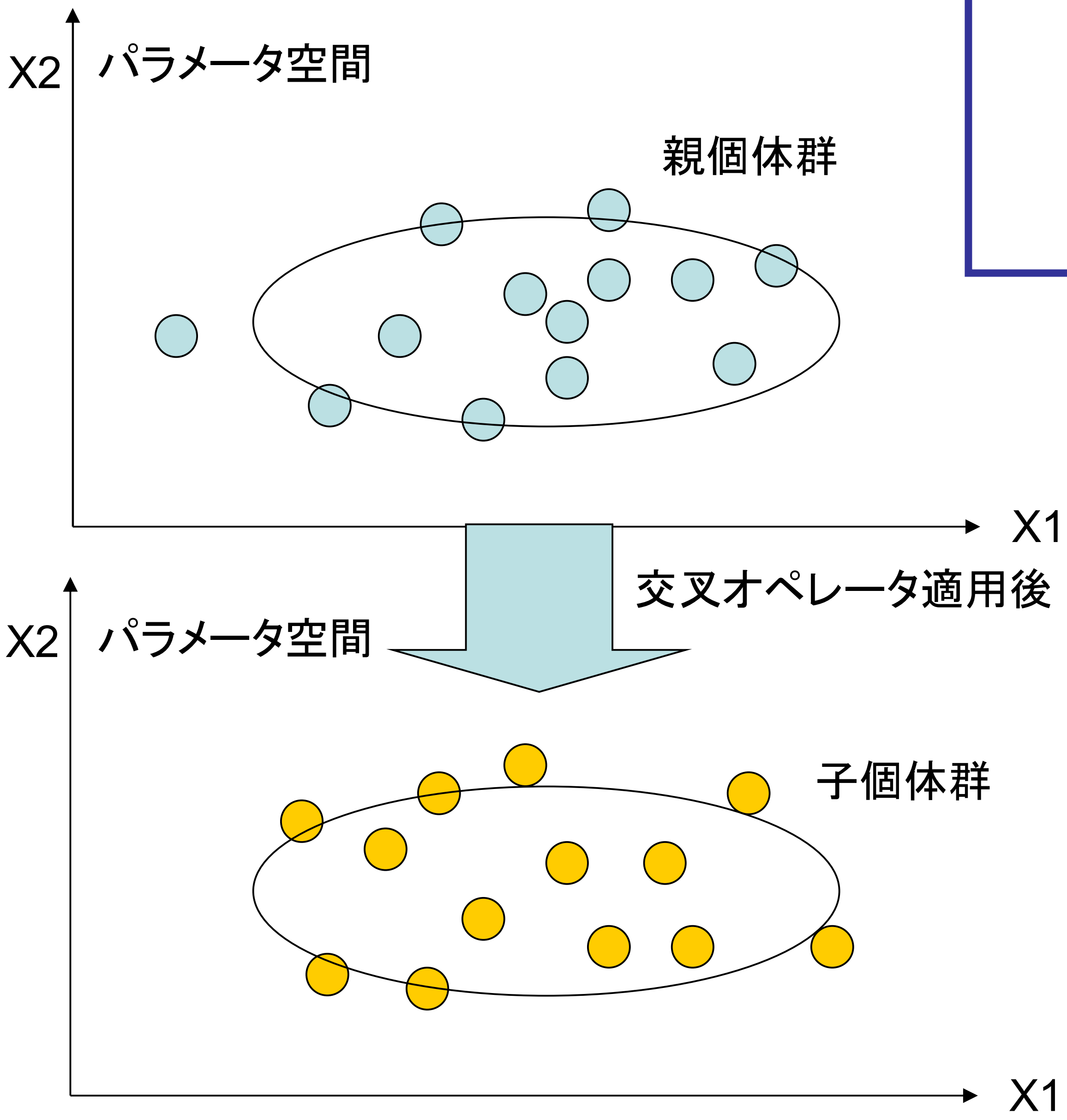
$$a = \sqrt{\frac{3}{n+k}}$$ とする。

（このとき分散 $\sigma_\xi^2 = \dfrac{1}{n+k}$ となる）

確率変数 ξ_i が正規分布に従う場合
ただし期待値0,

分散 $\sigma_\xi^2 = \dfrac{1}{n+k}$

実数値 GA の交叉オペレータにおいて求められる性質

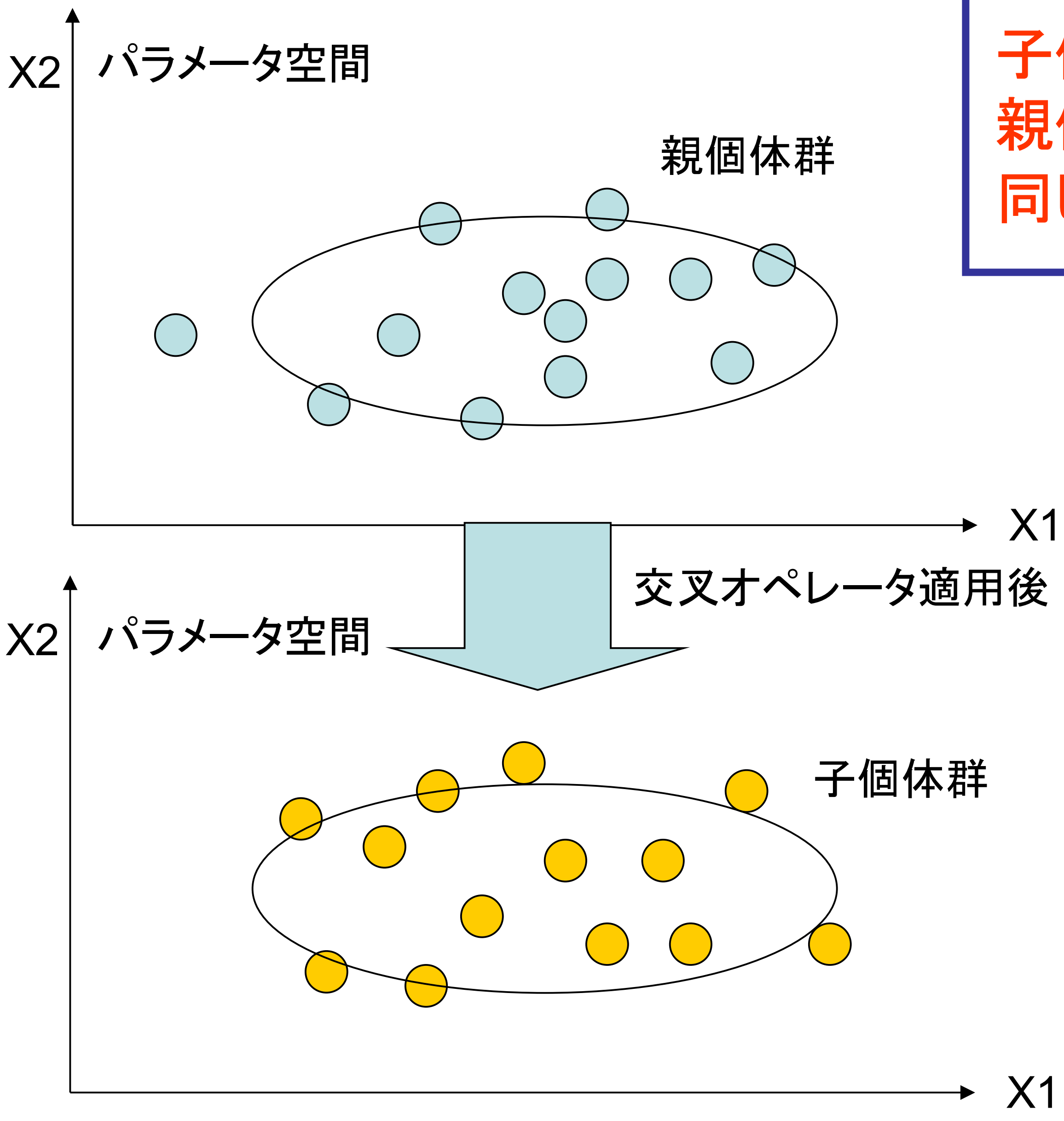


UNDXもSPXもREXも
この条件を満たしている

機能分担仮説(山村98)

交叉オペレータは
親個体群が張る
部分空間の補間的
探索に徹して、
探索領域の絞込みは
世代交代モデルに
委ねるのが望ましい

実数値 GA の交叉オペレータにおいて求められる性質



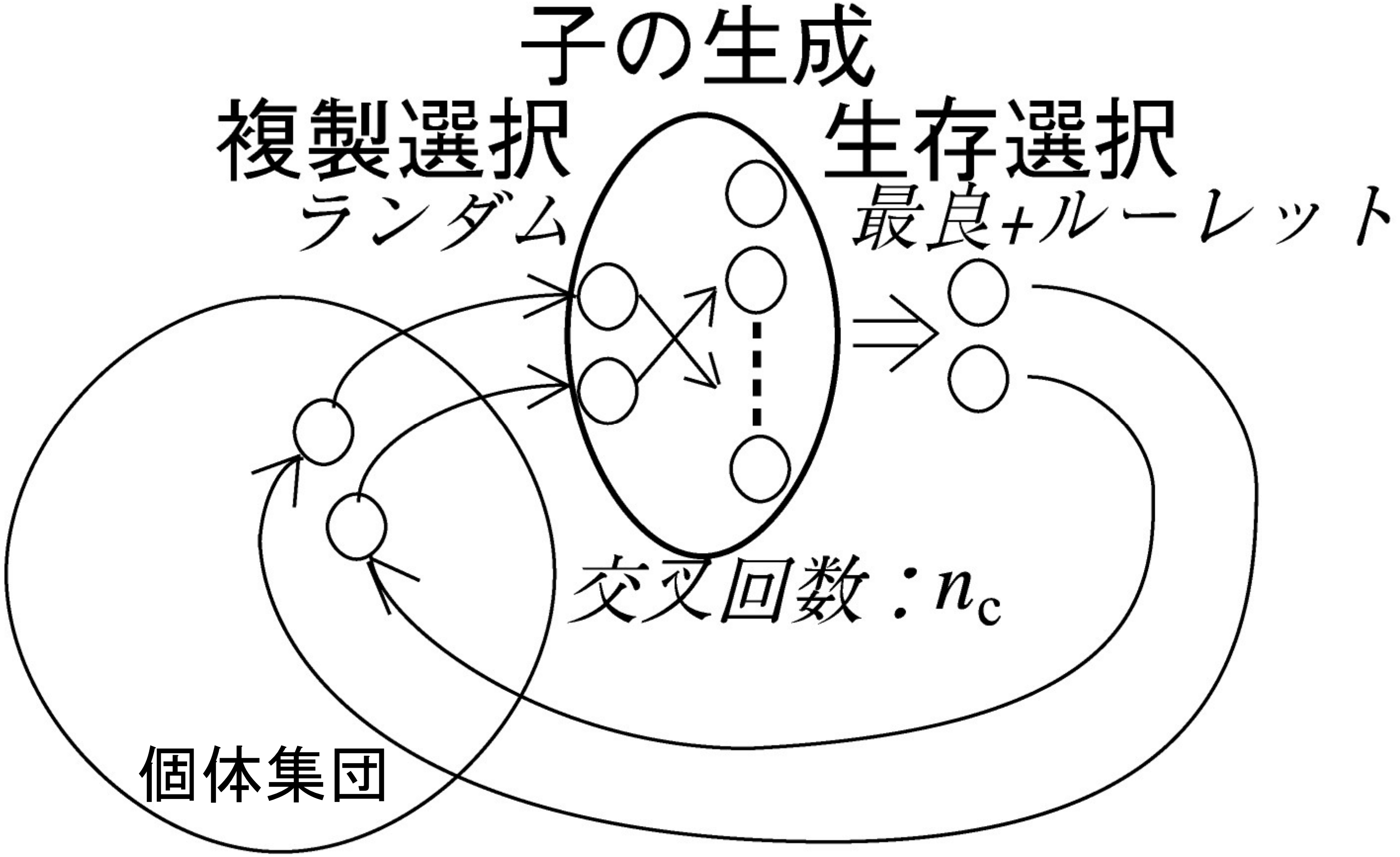
子個体群分布の統計量が親個体群の分布と同じになることが望ましい

UNDXもSPXもREXもこの条件を満たしている

機能分担仮説（山村98）

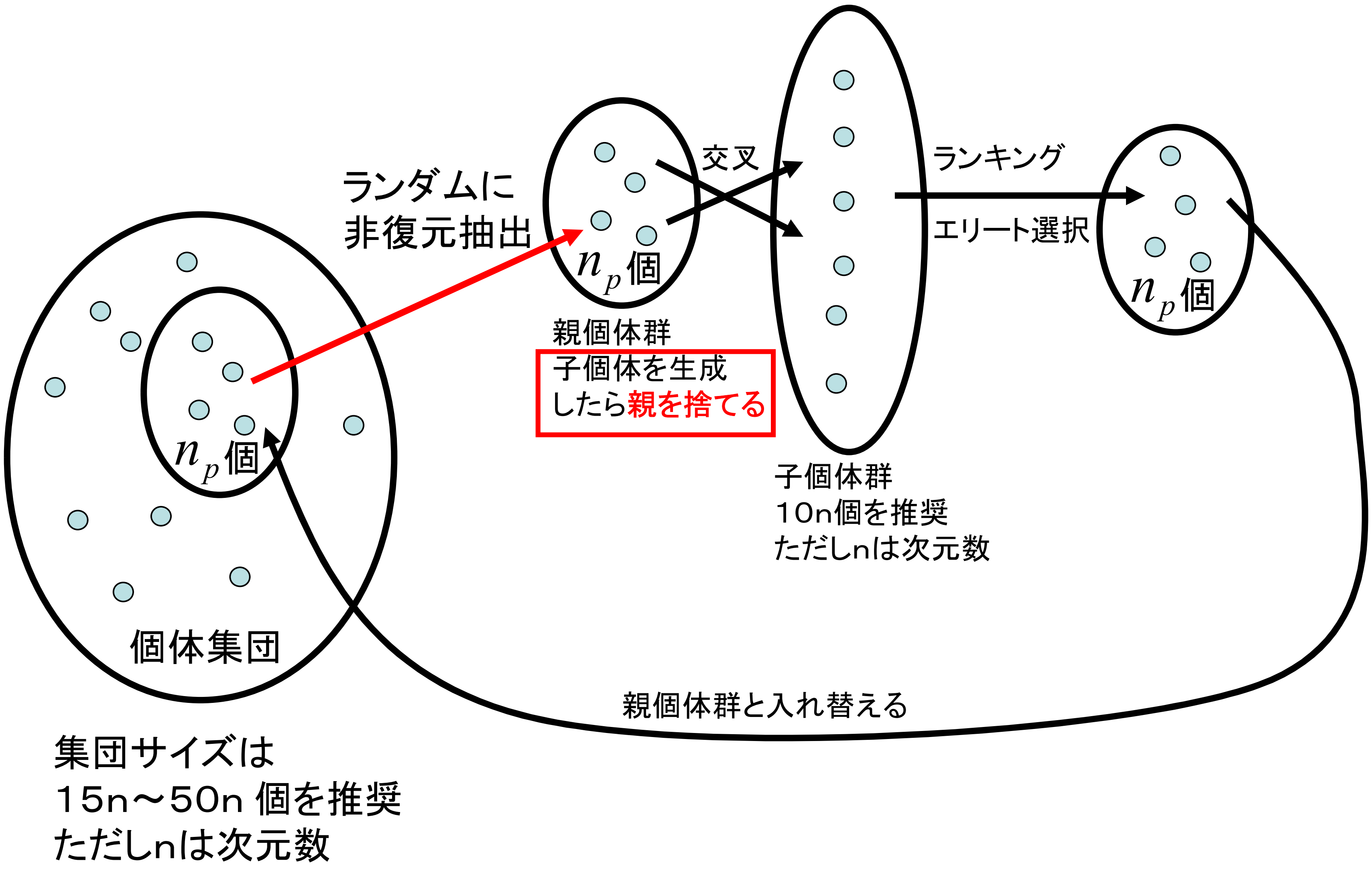
交叉オペレータは親個体群が張る部分空間の補間的探索に徹して、探索領域の絞込みは世代交代モデルに委ねるのが望ましい

世代交代モデルMGG [佐藤 97]



集団からランダムに**2個体**を選択し、何らかの交叉オペレーションによって子個体をnc個生成、両親と生成された全ての子を合わせた個体集合から、1つは最良個体、もう1つは評価値のランクに基づくルーレット選択により選び、両親個体と入れ替える

多親世代交代モデルJGG ［小林2007］



MGGと比較すると 2.5～13倍の性能アップ

数値最適化を行う遺伝的アルゴリズム：まとめ

交叉方法：　正規分布交叉(UNDX)
世代交代：　MGG

レンズ系設計の最適化
プロペラ形状の最適化
船形最適化など多数の実績

しかし今後はアルゴリズムがずっと簡単かつ強力な

交叉方法：　多親交叉REX （一様分布使用）
世代交代：　多親世代交代モデルJGG

を使用すべし

さらに洗練された究極の遺伝的手法とは？　… 大学院の講義にて説明

遺伝的アルゴリズム(GA)の適用における注意点

●数値最適化問題において適用を試みる前に、
勾配法やシンプレックス法で解けないか？
●組合せ最適化問題に適用を試みる前に、
動的計画法(DP)で解ける問題ではないか？
有効なヒューリスティクスが存在しないか？

単純な問題においては遺伝的手法は非効率的

●数値最適化と組合せ最適化の複合問題
→　遺伝的アルゴリズムは有望な選択肢

●多目的最適化問題
→　遺伝的アルゴリズムは有効

参考文献

１）長尾　智晴：　最適化アルゴリズム，昭晃堂（２０００）．

２）W.H.Press, B.P.Flannery, S.A.Teukolsky and W.T.Vetterling:
ニューメリカルレシピ・イン・シー　Ｃ言語による数値計算のレシピ，技術評論社（１９９３）．

３）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 (1999).

４）小林重信：
実数値GAのフロンティア，
人工知能学会誌Vol.24, No.1, pp.147--162 (2009)

まとめ

・多峰性コスト関数　→局所解が多数存在　勾配法×

【勾配を利用しない探索アルゴリズム】－－－－－－－－－－

・ランダムサーチ　→オールマイティ　探索性能下限

・焼きなまし法（SA）　→ランダム探索

多峰性関数に有効

・滑降シンプレックス法　→多点探索

・遺伝的アルゴリズム　→多点探索＋ランダム探索

正規分布交叉，REX，MGG，JGG

【演習問題】　2018.12.23　学籍番号　　　　　　氏名

（1）　実数値GAにおける「形質」とは何か説明せよ。
またそれら解候補の「類似性」について説明せよ。

（2）　実数値GAにおける交叉オペレータに求められる性質について説明せよ。