

複雑な実最適化問題への実践的アプローチ

Practical approach to a complicate real optimization problem

市川 親司

Chikashi ICHIKAWA

Abstract: Quantitative assessment of searching ability of several heuristic search algorithms is an import issue in solving real-world optimization problems. In this study, we investigate a method for choosing an appropriate optimizing method between genetic algorithms and simulated annealings. We applied the proposed selection method for solving the optimum design of gain flattering filters for optical communication, and it is found SA to be the best method in this problem.

1 緒言

近年、エンジニアリング・デザインの分野で種々の複雑な最適化問題を解く必要性が大きく高まっている。一方では、最適化のための手法として、従来の数理計画法に基づく方法以外に、遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm : GA)^{1) 2)} やシミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing : SA)³⁾ などのヒューリスティック解法も実用的な最適化問題に使われ始めている。

たとえば、GA は、渋滞する飛行場で、各航空機に最適タキシング (地上滑走) 計画の策定⁵⁾ やエレベーターの最適制御⁷⁾、および組立工場の最適配置⁶⁾ などの実最適化問題に適用され、大きな効果を挙げている。

また、SA はタンパク質の構造解析^{8) 9)} やマーケットの最適セグメント化¹⁰⁾ などに適用され、GA と並んでヒューリスティック解法の代表的手法となっている。

しかしながら、未知の複雑な最適化問題を解く際に、数多くの最適化手法のうち、どの手法を選べばよいのかという問題についてはこれまであまり言及されていない。本研究では、こうした観点から、これまで系統的に解かれていない複雑な実最適化問題として光通信の利得等化フィルタの最適設計問題を対象とし、どのような最適化手法を選択するのが良いのかを効率的に見出すアプローチを検討した。

2 最適化手法の特徴と実問題への応用

最適化問題を解くための最適化手法の研究は数多く行われており、現在では多種多様な最適化手法が存在する。

次節からは、数理計画法として最急降下法、次元分割一定幅山登り法、確率的山登り法を、ヒューリスティック解法として、ランダムサーチ、SA、および GA について、その概要と特徴を述べる。ここで対象とする最適化問題は局所解が多い複雑な問題であるため、ニュートン法など 2 回導関数を基礎とする手法では解が発散することが多く、ここでは検討対象として除外した。

2.1 最急降下法

最急降下法は初期点 x を定め、その点における勾配ベクトル $\nabla f(x)$ を求めて、探索点を決定する手法である¹¹⁾。点 x における勾配ベクトルとは、微分が可能な関数 $f(x)$ に対して、 $f(x)$ の偏微分係数を要素とする n 次元ベクトルのことをいい、関数 $f(x)$ の傾きが最大となる方向を示す。なお、微分不可能な関数に対しては、数値微分を行う。

2.2 次元分割一定幅山登り法

一般に山登り法は、解を良好な方向へ変化させる手法と定義される。したがって、最急降下法などの解を良好な方向へ変化させる手法であれば、すべて山登り法とよぶことができる。本研究では、山登り法の中でも次元ごとに設計変数を変化させる次元分割一定幅山登り法を用いる。

次元分割一定幅山登り法とは、設計変数値をそれぞれ微量 $+\delta$ と $-\delta$ を変化させることで探索を進める手法である。つまりそれぞれの設計変数において、 $f(x + \delta)$ と $f(x - \delta)$ を比較し良好な解を示せば、その点を解とする。現地点から $\pm\delta$ 移動させた点、および現地点の中で最も良好な解を次の解とする。多次元の場合では、すべての設計変数ごとにこの操作を行う。この時、どの方向に対しても評価がよくならなければ、その地点での値が最適解となる。この手法の探索終了条件は、すべての設計変数において、解に変化がなくなった時点とする。

2.3 確率的山登り法

確率的山登り法とは、解近傍の周辺でランダムサーチを繰り返す、解が良好な方向に遷移した場合にその遷移を受取るアルゴリズムである。現在の解から、各次元ごとに一定の近傍幅の範囲の中で、ランダムに値を変化させ、解が現地点よりも良好である場合には、変化させた値を解とする。一方、良好でない場合には現地点を解とする。多次元の場合であっても、同じような探索を設

計変数ごとに行う。この手法の探索終了条件は、解の変更が少なくなった場合である。

2.4 ランダムサーチ

ランダムサーチは、解のすべての設計空間を考えて、その中から無作為に選び出した設計解が条件に適合するか判定する手法である。ランダムサーチでは現時点の最適解と比較して、得られた関数値が良好であれば、その関数値を現時点での最良値とする。この手法の探索終了条件は評価計算回数の終了回数を設定し、それを満たした場合、もしくは解の変更が少なくなった場合である。

2.5 SA

物質を融解状態になるまで加熱し、徐々に冷却する操作を焼きなまし(アニーリング)とよぶ。この焼きなましにより、エネルギーが最も少ない状態に原子が配列し、結晶構造を形成させることができる。この物理プロセスに着想を得て、これを計算機上で模擬することにより最適化問題を解こうとする手法をSAとよぶ³⁾。局所探索法の暫定解の更新法として、目的関数を改善するものだけでなく、改悪となるものも一定の制限のもとで許すことで、局所最適解からの脱出を可能にする¹²⁾。

SAは重要な4つのプロセスからなる。

- 生成処理 (Generate)
- 受理判定 (Acceptance criterion)
- クーリング (Cooling)
- 終了条件¹⁴⁾ (Terminal criterion)

SAは、与えられた初期状態から出発して、エネルギーが確率的に小さくなるように次々と状態を変化させ、最終的には最適な状態になることが期待されるアルゴリズムである。

2.6 GA

GAは、生物の進化を模倣した最適化アルゴリズムである。GAでは状態空間上の解を個体 (Individual) として表現する。そして、個体の集合を母集団 (Population) と呼び、ある世代 (Generation) を形成している個体のうち、環境 (目的関数) への適合度 (Fitness) が高い個体ほど次の世代に高い確率で生き残るように選択 (Selection) する。さらに、それぞれの個体に対して、交叉 (Crossover)、突然変異 (Mutation) などの遺伝的オペレータを適用することによって次世代を形成する。これらの一連の操作を繰り返して行うことによって解探索を行う。探索が進むごとに、より適合度が高い個体 (最適解に近い個体) が増加し、やがて最適解が得られると期待できる。これがGAの基本的な概念である。GAは次の6つのプロセスからなる。

- 母集団の初期化 (Initialization)
- 評価 (Evaluation)
- 選択 (Selection)
- 交叉 (Crossover)
- 突然変異 (Mutation)
- 終了条件 (Terminal Criterion)

GAは、与えられた初期状態から出発して、多点探索を行い、確率的に次々と状態を変化させる。そして適合度が高いものを次世代に残し、最終的に最適な状態になることが期待されるアルゴリズムである。

2.7 各手法における総合的評価

ここでは、2.1節から2.6節で述べた各手法における総合的評価を長所と短所を述べまとめる。

● 最急降下法

長所：単峰性関数 (局所解がない関数) ならば少ない計算コストで、最適解を見つけることができる。

短所：局所最適解が複数存在する場合には、初期点により異なる局所最適解に収まってしまい大域的探索ができない。

● ランダムサーチ

長所：設計空間が小さい場合には、良好な解が得られる可能性が高い。

短所：設計空間が大きな場合には膨大な計算量が必要となる。たとえ膨大な計算をしたとしても、探索の結果が活用されないため効率的ではない。このことからほとんどの実問題に対し準最適解でさえ見付からない。

● 次元分割一定幅山登り法

長所：単峰性の目的関数の場合、ステップ幅 $\pm\delta$ を設定することにより、最適解を見つけることができる。

短所：最急降下法と同じく局所最適解が存在する場合には、初期点により異なる局所最適解に収まってしまい大域的探索ができない。

● 確率的山登り法

長所：次元分割一定幅山登り法に比べランダムなステップ幅で探索できるため、ローカルサーチで見つけることができる。

短所：小さな局所解がたくさんある場合には評価計算回数が近傍幅にも依存するが、大域的探索ができず、局所解が得られる可能性が高い。

- SA

長所：改善する方向への遷移も確率的に認める仕組みを持つため、温度と近傍の設定を適切に行うことにより、最適解が得られる。

短所：最適解を得るのに非常に多くの計算量を要し、特定の問題を解く場合には、いくつかの探索パラメータをチューニングする必要がある。

- GA

長所：個体集団の進化によって解探索を行うため、他の最適化手法と比較して大域的な探索が可能である。そのため解空間が非常に大きな問題に対しても有効である。また、特に離散問題に向いている。

短所：パラメータの値は解探索性能に大きく影響するため、パラメータをチューニングする必要がある。加えて多点探索のため、他の最適化手法と比較して計算負荷が高い。

これらの各手法の特徴を総合的に評価して、次章から実問題として光通信の利得等化フィルタの最適設計問題を対象とし、各最適化手法を適用する。そしてその得られた知見から、それぞれの手法に対する考察を行う。

3 GFF 設計問題

本研究で用いる実問題は、利得等化フィルタ (Gain Flattening Filter: GFF) である。GFF とは、光通信システムで中継器に用いられる光素子の一つである。近年光通信では狭帯域波長分割多重 (Dense Wavelength Division Multiplexing: DWDM) 技術¹⁵⁾により急速な高速化が実現されている。GFF は DWDM システムの中継器において、光アンプで生じた波長帯域の利得偏差を等化 (平坦化) するために用いられる。

GFF の構成法にはエタロンフィルタを用いる方法¹⁶⁾や誘電体多層膜構造を用いる方法¹⁷⁾などが提案されているが、本研究では誘電体多層膜構造¹⁸⁾を用いた GFF を対象とする。誘電体多層膜構造を用いた GFF では 1 つのフィルタ内の干渉により損失波長特性を得ることが可能であり、生産性、設計自由度の面で有利と言われている¹⁹⁾。Fig.1 に示すのは任意の屈折率¹⁾を持つ非常に薄い誘電体物質の膜が多数積層された模式図である。光は屈折率の異なる 2 つの物質の境界で反射と透過を起こす性質があるため、Fig.1 に示した構造を利用し GFF で各波長に対する利得の平坦化を図る。

GFF には光アンプの性質に応じた目標特性が与えられる。GFF 設計問題では、設計された GFF の利得特性

¹⁾一般的には高屈折率、低屈折率の 2 種類に限定した設計を行うことが多い、本研究では高屈折率層に酸化タンタル (Ta_2O_5)、低屈折率層に 2 酸化珪素 (SiO_2) という物質を用いている。

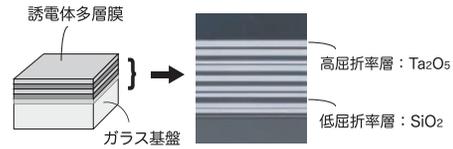


Fig. 1 GFF の構造

と与えられた目標特性との誤差を最小とすることが目的となる。

GFF の利得特性は、層数、各層の膜厚、各層の屈折率により変化する。なお本研究では層数を 30 層、屈折率を高屈折率層、低屈折率層の 2 種類に固定し、各層の膜厚の厚さを決定する実最適化問題である。例えば、実際に設計された GFF の利得特性の例を Fig.2 に示す。縦軸には利得 [dB]、横軸には各波長 [nm] を示し、目標特性に用いる波長帯域の数を 15 とする。

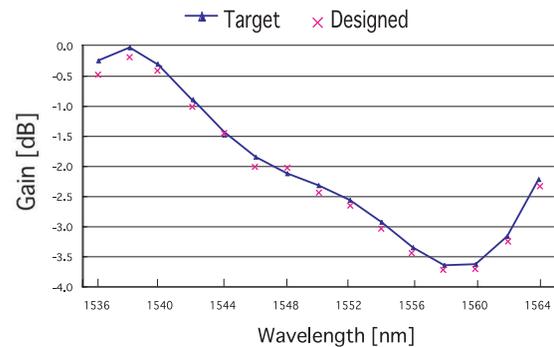


Fig. 2 目標特性および設計された GFF の利得特性の例

GFF の評価には、各波長ごとの目標特性との誤差 err_i ($i = 1, \dots, m$) の 2 乗和と、全波長帯域で生じた正の最大誤差 $max(err)$ から負の最大誤差 $min(err)$ を引いた値を用いる。ここで m は目標特性に用いる波長特性の数を意味する。各波長成分で得られた利得を $gain_i$ 、目標利得を $target_i$ とすると、 err_i 、 err はそれぞれ (1)、(2) となる。

$$err_i = target_i - gain_i \quad (1)$$

$$err = \{err_1, \dots, err_m\} \quad (2)$$

各層の膜厚 $d = \{d_1, \dots, d_n\}$ および err を用いると、本研究における GFF 設計問題の目的関数 $f(d)$ は (3) となり、これを最小化する。なお n は GFF の層数である。

$$f(d) = w_1 \sum_{i=0}^m err_i^2 + w_2 \{max(err) - min(err)\} \quad (3)$$

w_1 、 w_2 は重みであり、本研究では $w_1 = 0.99$ 、 $w_2 = 0.01$ とする。この重みは、計算より良好な結果を示した

値である．また制約条件は (4) となり，設計変数は膜厚 d_j である．

$$1.0 < d_j < 4000.0 \quad (j = 1, \dots, n) \quad (4)$$

4 GFF 設計問題への最適化手法の適用

本章では GFF 設計問題に最適化手法を適用した結果を示す．4.1 節から 4.5 節までは，各手法を適用した場合のパラメータを示し，また各手法での終了条件を示す．

4.1 次元分割一定幅山登り法の適用

まず，GFF の各層の膜厚に関する製造技術に基づく最小値としてステップ幅 $\delta = 1[nm]$ と設定する．ここでは，終了条件を次にあげる条件のいずれかを満たすときとする．

- 全次元において 3 点の探索点の中央が最良となり，解の改善が終了した場合
- 評価計算回数が 20,000 回 (=探索ステップ数が 10,000 回)²に到達した場合

4.2 確率的山登り法の適用

ここでは，前述したように適切な最小値として，近傍幅 $\Delta d_i = 1[nm]$ ($i = 1, \dots, n$) とし，終了条件を評価計算回数 500,000 回とする．

4.3 ランダムサーチの適用

ここでは (4) の範囲の中で，解の生成を行い，500,000 回まで繰り返す．ランダムサーチの終了条件を評価計算回数 500,000 回とする．

4.4 SA の適用

ここで用いたパラメータを Table.1 に示す．なお，最高温度は最大の改善を 50%の確率で受理する温度に設定し，最低温度は最小の改善をクーリング周期内で 1 回受理する温度に設定した．また終了条件を評価計算回数 500,000 回とする．

Table 1 SA におけるパラメータ

クーリング回数	32
近傍幅	1.0
近傍生成方法	一様分布
最高温度	35
最低温度	0.0001

4.5 GA の適用

ここで用いた GA は分割母集団を用いた実数値 GA である．本研究で用いたパラメータを Table.2 に示す．また終了条件を評価計算回数 500,000 回とする．

²1 ステップあたり 2 回の評価計算を行うため．

Table 2 GA におけるパラメータ

母集団	500
島数	50
染色体長	30
交叉法	2 点交叉
交叉率	1.0
突然変異率	0.09(=3/L)
移住間隔	5
移住率	0.5
近傍生成方法	正規分布
選択	トーナメント選択
トーナメントサイズ	4
各島のエリート個体数	5
最大世代数	1000

4.6 各手法の設計結果の比較

GFF 設計問題に各最適化手法を適用したところ，初期値によって得られる解は大きく異なった．このことより，GFF 設計問題が多峰性関数であることがわかる．そのため，以下では多峰性関数に対して適用可能な最適化手法として，ランダムサーチ (RS)，確率的山登り法 (Probabilistic Hill-Climbing: PHC)，SA，GA を用いることにする．Fig.3 に，GFF 設計問題に各最適化手法を適用した計算結果を示す．計算ではすべての手法で 100 試行の最悪値，平均値，中央値，最良値を調べた．縦軸は目的関数値，横軸は手法を示している．なお，比較のため確率的山登り法において探索ステップ幅を固定 (1nm) にした次元分割一定幅山登り法 (Gradual Hill-Climbing:GHC) の結果を示す．

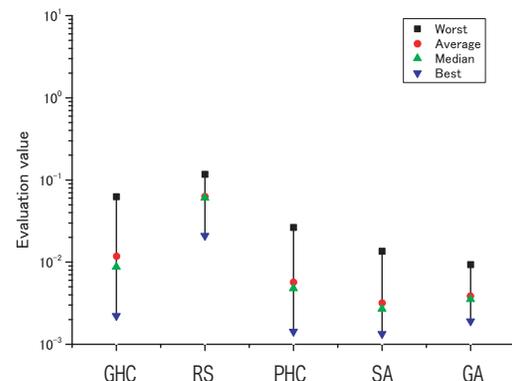


Fig. 3 最適化手法の適用結果

Fig.3 より，GFF 設計問題には，平均値と中央値によって示される解の精度では SA が優れており，また最悪値と最良値の差として示される解のばらつきでは GA が優れていることが分かった．またランダムサーチでは著しく解探索性能が悪化することも分かった．

GA は多点探索という特徴を持ち大域探索に優れていることから，解のばらつきが小さいものと考えられる．また SA では高温状態で大域探索が可能であり，低温状態では局所探索を行うことから，総合的な解探索性能が

優れているものと考えられる。

Table.3 にそれぞれの最適化手法で要した評価計算回数を示す。

最適化手法	評価計算回数
ランダムサーチ	500,000
次元分割一定幅山登り法	5,000
確率的山登り法	100,000
SA	500,000
GA	500,000

計算コストの面から見ると、次元分割一定幅山登り法の評価計算回数は平均して 5,000 回程度であり、ランダムサーチ、SA、GA の評価計算回数と比較すると 1/100 程度の計算量であった。以上を解のばらつき、解の精度、計算コストという観点からまとめると Table.4 のように整理できる。なお、確率的山登り法の終了条件は 500,000 回であるが、100,000 回で解が収束していたため 100,000 回とする。

Table 4 各視点から見た GFF に適した手法

手法	解のばらつき	解の精度	計算コスト
ランダムサーチ		x	x
次元分割一定幅山登り法			
確率的山登り法			
SA			x
GA			x

次章では各手法の結果について考察し、GFF 設計問題の性質を明らかにするとともに、他の実問題の最適化を行う際に適切な最適化手法を選択するために重要な次の性質に関する検討を行う。

- 多峰性/単峰性
- 改善の必要性
- 部分解の有無

5 GFF 設計問題における考察

Fig.3 において、GFF 設計問題では次元分割一定幅山登り法において異なる初期点から異なる解を得ていることが分かる。関数が単峰性の場合、これらの手法ではすべての初期点から同等の解を得ることができるため、GFF 設計問題は多峰性関数と考えられる。

また、次元分割一定幅山登り法や確率的山登り法でも比較的良好な解を得ていることから、GFF 設計問題には著しく目的関数値の悪い局所解は存在せず、適切でない最適化手法を用いてもある程度の解が得られる。

これに対し、ランダムサーチでは、解探索性能が著しく悪化していることも分かる。これはランダムサーチが

ローカルサーチを一切行わないため解の精度が上がらないことが原因と考えられる。このことから解の精度を上げるためローカルサーチが必要であることが分かった。

次に、SA における温度、GA における交叉率という 2 つのパラメータについて検討を行った。これらのパラメータは、関数の形状や設計変数間の依存関係などと密接に関係している。

SA において温度に関する計算を行った結果を Fig. 4 に示す。この Fig. 4 からわかるように、わずかでも温度がある場合は、温度 0 の場合³と比較して解探索性能が向上することが分かった。これにより、GFF 設計問題では最適解の近傍に相対的に小さな凹凸が存在する。

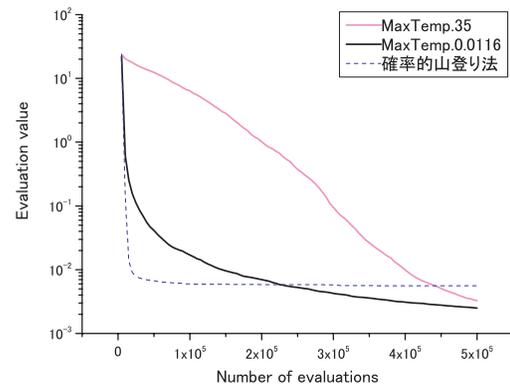


Fig. 4 温度による検討

GA において交叉率に関する計算を行った結果を Fig. 5 に示す。Fig. 5 からわかるように、交叉率 0.0 でも良好な探索を行えることから、GFF 設計問題には部分解が存在しない (= 設計変数間の依存関係が強い) ことが分かった。

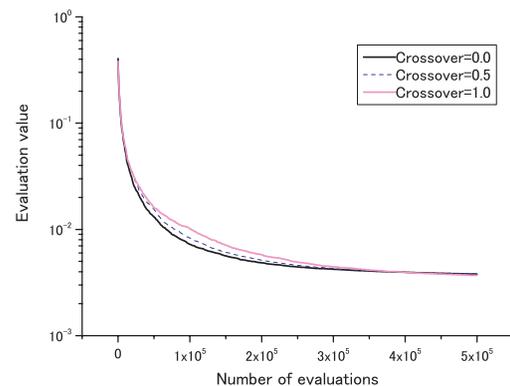


Fig. 5 交叉による検討

このように、局所解の有無、設計変数間の依存関係の有無など、目的関数のランドスケープを知ることは、最適化手法の選択のために重要なことである。そこで GFF

³温度 0 の SA とは確率的山登り法と同義である。

設計問題の特徴を視覚的に捉えるため、 x, y 軸に任意の2層の膜厚を、 z 軸に目的関数値を取った図を Fig.6 に示す。ここでは最適化された GFF の設計変数値のうち任意の2層のみを定義域である $1 \sim 4000[\text{nm}]$ まで変化させ、そのときの目的関数値を示したものである。

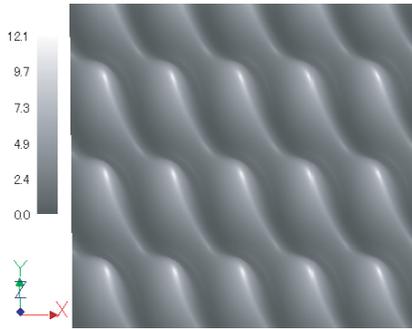


Fig. 6 GFF 設計問題の部分的なランドスケープ

Fig.6 より、大域的には多くの山と谷が存在するものの、谷の深さはほぼ同等である。また途中にくぼみなど局所解となる部分がないことから、次元分割一定幅山登り法や確率的山登り法でも解探索が十分に行えることが予想できる。またこのような図を複数観察することで設計変数間の依存関係が分かり、部分解が存在しないことが予測される。このように全次元のランドスケープが視覚化できない場合でも、任意の2次元または3次元のランドスケープを視覚化し、さらに複数の最適化手法によりランドスケープの予想をより確実なものにすることによって、GFF 設計問題以外の実問題においてもその特徴を把握できるものと考えられる。これらの計算から、GFF 設計問題には以下のような特徴があることが分かった。

- 多峰性関数であり、無数の局所解が存在する。
- しかし、著しく目的関数値の悪い局所解は存在せず、適切でない最適化手法を用いてもある程度の解が得られる。
- 最適解の近傍に相対的に小さな凹凸が存在する。
- 部分解が存在しない。(= 設計変数間に依存関係が強い。)

これらの結果より、GFF 設計問題に最適な手法は SA であり、SA のパラメータチューニングを行うことによって、最適解を得ることができると考えられる。

6 おわりに

最適化手法として、数理計画法、およびヒューリスティック解法があるが、未知の実問題に対してどの手法が有効であるかを短時間で見出すことは、重要である。その場合、最初に目的関数は、単峰性か、多峰性かを判

断する。そして単峰性であれば計算コストがかからない最急降下法などの数理計画法を用いる。多峰性であれば、ヒューリスティック解法である SA や GA を適用する。SA では、温度の影響を調べ、GA では交叉の影響を調べる。これにより、2つの手法の有効性を判断できる。ただし、用いる SA や GA は対象問題に対して、可能な限り最良の方法を用いなければならず、そうでない場合には単に、用いた手法の個別の優劣を示しただけであり、一般的な結論にならない場合があることに注意する。

本論文で示したアプローチにより、早い段階で適切な最適化手法を選択でき、かつ関数の特徴を把握できるため、未知の実最適化問題で有効な最適化手法を選択できるものと考えられる。

参考文献

- 1) 坂和 正敏, 田中 雅博, 遺伝的アルゴリズム, ソフトコンピューティングシリーズ (1995)
- 2) D.E.Goldberg .Genetic Algorithms in Search Optimization and Machine Learnign , Addison- Wesley (1989)
- 3) Jr.M.P.Vecchi S.Kirkpatrick , C.D.Gelatt , Optimization by simulated annealing , Science (1995)
- 4) Boris Naujoks , Werner Haase , Jörg Ziegenhirt , Thomas Bäck : Multi Objective Airfoil Design using Single Parent Populations , GECCO 2002 , pp.1156-1163 (2002)
- 5) Brankica Pesic , Nicolas Durand , Jean-Marc Alliot : Aircraft Ground Traffic Optimisation using a Gentic Algorithm , GECCO 2001 , pp.1397-1404 (2001)
- 6) Karim Hamza , Juan F. Reyes-Luna , Kazuhiro Saitou : Simultaneous Assembly Planning and Assembly System Design Using Multi-objective Genetic Algorithms , GECCO 2003 , pp.2096-2108 (2003)
- 7) Tapio Tyni , Jari Ylinen , Jari Ylinen : Genetic Algorithms in Elevator Car Routing Problem , GECCO 2001 , pp.1413-1422 (2001)
- 8) Yuko Okamoto : Protein Folding Problem as Studied by New Simulation Algorithms , Recent Research Developments in Pure & Applied Chemistry Vol.2 p1 (1998)
- 9) 遺伝的交叉を用いた並列シミュレートドアニーリングの検討 : 廣安知之, 三木光範, 小掠真貴, 岡本祐幸, 情報処理学会論文誌「数理モデル化と応用」 Vol.43 No.SIG07 - 009 (2002)
- 10) Michael J. Brusco, J. Dennis Cradit and Stephanie Stahl : A Simulated Annealing Heuristic for a Bicriterion Partitioning Problem in Market Segmentation , Journal of Marketing Research Vol.39 Issue:1 p99-109 (2002)
- 11) 仁木 滉, 数理計画法の基礎, 共立出版株式会社 (1996)
- 12) kita97, 喜多 一, シミュレートドアニーリング, 日本ファジィ学会誌 (1997)
- 13) Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M., Teller, A. and Teller, E., Equation of State Calculation by Fast Computing Machines, Journ. of Chemical Physics, Vol. 21, pp. 1087-1092 (1953)
- 14) Collins, N.E., Eglese, R.W. and Golden, B.L., Simulated Annealing-an annotated bibliography, publisher = "American J. Math. & Management Sci, Vol.8, No.3-4 pp. 209-307 (1988)
- 15) Donald Sterling, 赤木保之 訳. 光ファイバネットワーク技術解説, ソフトバンクパブリッシング, (2002)
- 16) 武田 他, エタロンフィルタによる光増幅器の利得平坦化, 信学学期全大 (1995)
- 17) N. Shimojoh et al, New gain equalization scheme in WDM optical amplifier repeated transmission systems , OECC'96 (1996)
- 18) 板生清 他. 光デバイス精密加工ハンドブック, オプトロクス社 (1998)
- 19) 中野 武雄, 前田 真, 馬場 茂, 任意の屈折率を持つ層からなる光学多層膜フィルタの最適設計