

最適な受理確率を目標とする適応的近傍を持つ 温度並列シミュレーテッドアニーリング

Temperature Parallel Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood

小野 景子 (同志社大院) 正 三木 光範 (同志社大工)
正 廣安 知之 (同志社大工) 伏見 俊彦 (同志社大院)

Keiko ONO, Graduate School of Engineering, Doshisha University
Mitsunori MIKI, Doshisha University, Tatara Miyakodani 1-3, Kyo-Tanabe, Kyoto
Tomoyuki HIROYASU, Doshisha University
Toshihiko FUSHIMI, Graduate School of Engineering, Doshisha University

SA/AAN (Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood) is a SA with and adaptive neighborhood range for maintaining an optimum accept ratio, and it shows very good performance for continuous optimization problems. This paper deals with the combination of this adaptive mechanism and TPSA (Temperature Parallel Simulated Annealing). The former automatically determines the appropriate neighborhood range and the latter provides the appropriate cooling schedule automatically. The proposed approach, TPSA/AAN, shows a good performance in solving a typical test problem.

Key word: Optimization, Simulated Annaling, Temperature Parallel Simulated Annealing, Continuous Oprimization Problems, Adaptive Neighborhood

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング^{1, 2)} (以下 SA と略す) は複雑な最適化問題を解くヒューリスティック解法の一つである。SA を適用する場合、重要になるのは、温度パラメータと近傍の設定方法である。組み合わせ最適化問題では、近傍の大きさは解摂動に用いる方法を決定すると一意に定まる。そのため温度パラメータが重要になる。一方、連続最適化問題では近傍の設計が重要となる。

これに対して Corana の手法³⁾ では受理率が 0.5 になるようにし、近傍設計を自動化したが目標受理率を 0.5 とすることの妥当性は明らかではなかった。そこで、著者らは任意の目標受理率を与えることのできる新しい近傍設計を考え問題に適応する摂動近傍を持つシミュレーテッドアニーリング (SA/AAN: Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood)⁴⁾ を提案した。ただし、温度スケジュールについては一般的な指数クーリングを用いていた、

一方、温度並列 SA (Temperature Parallel Simulated Annealing: TPSA)^{5, 6)} は並列処理との高い親和性を有しているだけでなく、SA において問題となる温度スケジュールの決定が原理的に不要であるという極めて優れた特徴を有している。そこで本研究では、SA/AAN に温度並列 SA を適用する方法、すなわち、問題に適応する摂動近傍を持つ温度並列シミュレーテッドアニーリング (TPSA/AAN: Temperature Parallel Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood) を提案しその有効性を検証する。

2 受理率を 0.5 とする適応的近傍

2.1 Corana の手法

Corana が提案した SA は、無駄な探索が生じるのを防ぐため、解摂動に用いる近傍の範囲を受理率が 0.5 になるように近傍を調節する方法である。このアルゴリズムにおいて、解摂動は式 (1) で表される一様分布の近傍を考え、現在の各設計変数 x_i から、次状態の各設計変数 x'_i を次式によって生成する。

$$x'_i = x_i + rm \quad (1)$$

ここで、 r は $[-1, 1]$ の一様乱数である。また、 m は近傍レンジを決定するパラメータである。このパラメータ m を式 (2) を用いて決定する。ここで p は、近傍レンジを変更する間隔 N の間に解摂動が受理された回数 n から、 $p = n/N$ と計算される。また、 c はスケールパラメータである。本研究では Corana と同様に $c = 2, N = 8$ としている。

$$\begin{cases} m' = m \times g(p) \\ g(p) = 1 + c \frac{p-p_1}{p_2}, & \text{if } p > p_1 \\ g(p) = \left(1 + c \frac{p_2-p}{p_2}\right)^{-1}, & \text{if } p < p_2 \\ g(p) = 1, & \text{otherwise} \\ p_1 = 0.6, p_2 = 0.4 \end{cases} \quad (2)$$

2.2 Corana の手法の問題点

Corana の手法を用いることにより、連続関数に SA を適用した場合の近傍設計が自動化される。しかし、目標

とする受理率を 0.5 とする根拠は示されていなかった。これに対し三木ら⁷⁾は、近傍の大きさを固定した SA (固定近傍 SA) と受理率を 0.5 にする SA の性能を比較した⁴⁾。その結果、固定近傍 SA では、適切な近傍幅を与えることにより、受理率 0.5 に調節した場合より良好な結果が得られた。したがって、受理率を 0.5 に調節することが必ずしも良いとは考えられないことが分かった。

2.3 新しい適応的近傍の設計 (SA/AAN)

適応的近傍を用いない一般的な SA では受理率は最終的には非常に低くなることから、受理率を 0.5 に保つ方法では、近傍が小さくなりすぎ、局所解に陥ることがわかる。そこで、小さな受理率を実現することの出来る新しい適応的近傍アルゴリズム (SA/AAN: Simulated Annealing with Advanced Adaptive Negihborhood)⁴⁾ を提案した。

このアルゴリズムは、式 (3) に示す階段関数を用いて受理率から近傍幅を決定する。すなわち、受理確率が目標値の上限より大きい場合には近傍を H_0 倍し、目標値の下限より小さい場合は近傍を半分に減らす。この時、近傍幅を増加させる拡大率 H_0 を、式 (4) のように再帰的に定義し、受理率が下がりにくい時には、拡大率が十分に大きな値になるようにした。すなわち、拡大率の初期値を 2.0 とし受理確率が目標値の上限より大きい場合は拡大率を 2 倍に増加させる。このメカニズムにより拡大率はいくらかでも大きな値をとれることになる。

ただし、アニーリング初期には温度が高いため、近傍幅が設計領域全域まで拡大しても、指定された小さな受理率を実現することが出来ない。このため、アニーリング初期には、受理率が 0.5 になるように近傍を調節し、その後、固定近傍でアニーリングを行い、受理率が指定された値まで減少した後、このアルゴリズムを用いる。ここで p は、近傍の範囲を変更する間隔 N の間に解摂動が受理された回数 n から、 $p = n/N$ と計算される。また、ここで p' は、近傍幅のパラメータ (H_0) を変更する間隔 L の間に解摂動が受理された回数 l から、 $p' = l/L$ と計算される。また p_1, p_2 は目標とする受理確率の上限値および下限値である。

$$\begin{cases} m' = m \times g(p) \\ g(p) = H_0, & \text{if } p > p_1 \\ g(p) = 0.5, & \text{if } p < p_2 \\ g(p) = 1.0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} H_0 = H_0 \times H_1, \\ \text{(初期設定: } H_0 = 2.0) \\ H_1 = 2.0, & \text{if } p' > p_1 \\ H_1 = 0.5, & \text{if } p' < p_2 \\ H_1 = 1.0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4)$$

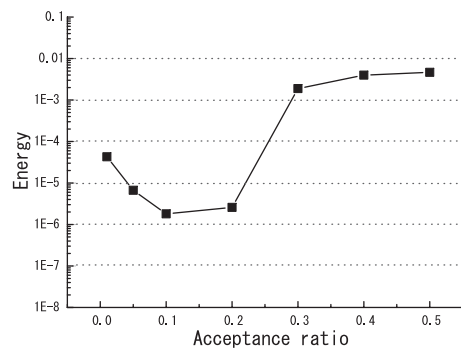


Fig. 1: Comparison with methods

Fig. 1 は、Rastrigin 関数をテスト関数とした場合において受理率を 0.5 とした手法と SA/AAN のエネルギー比較を示している。これより、受理率を 0.5 に保つ従来の方法は、良好な最適解を与えず、最適な受理確率は 0.5 よりかなり小さい値であることがわかる。

つまり、SA/AAN は最適な近傍を適応的に決定し SA の拡張アルゴリズムとして有効であることが確認できた。ただし、温度スケジュールは一般的な指数クーリングを用いているため最適な温度スケジュールの決定には多くの予備実験が必要であった。そこで、温度スケジュールの自動化が可能な温度並列 SA (TPSA) を SA/AAN に適用することを考える。

3 温度並列 SA (TPSA)

温度並列 SA⁶⁾ は、複数のプロセッサに異なる温度を与え、各プロセッサは一定温度でアニーリングを行い、一定の間隔で隣接する温度のプロセッサ間で解の交換を行う方法である。この方法の特長は、(a) 温度を解自身が決定するので温度スケジュールの自動化が図れる、(b) 時間的に一樣なので任意の時点で終了が可能であり、また、継続すれば解の改善を続けることができる、(c) 解の品質を劣化させることなく、温度数までの並列化が可能であるという点にある。

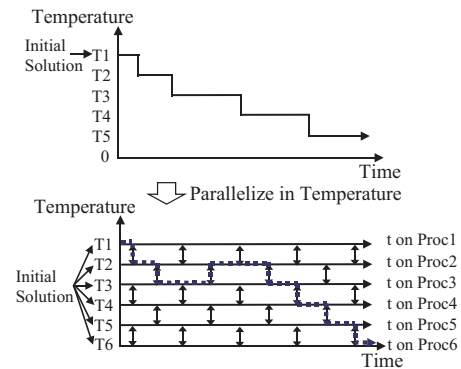


Fig. 2: Sequential SA and temperature parallel SA

Fig. 2は温度並列SAの概念図であり、通常のSAと比較している。上側に示した通常のSAでは経験的に決めた単調減少の温度スケジュールを用いるのに対して、温度並列SAでは各プロセッサは一定の温度を担当し、解が自身のエネルギーを基準として適切な温度を選ぶ。このため、温度スケジュールは不要となる。

温度並列SAにおける隣接温度での解の交換は、隣接温度間の温度差とエネルギー差を用いて確率的に行う。これによって、低温部にエネルギーの低い解が確率的に集まる。一方、各一定温度におけるSAは通常の方法で行う。なお、温度並列SAの詳細なアルゴリズムについては、文献⁶⁾を参照されたい。

4 適応的近傍を持つ温度並列SA (TPSA/AN)

TPSA/ANは、TPSAに2.1で説明したSA/ANの考え方を温度並列SAに組み込んだ適応的近傍を持つ温度並列SAである。

Fig. 3にSA/ANとTPSA/ANの得られた解の精度を示す。固定近傍レンジを持つ温度並列SA(TPSA/FN: TPSA with Fixed Neighborhood)、および固定近傍レンジを持つ逐次SA(SA/FN)と比較する。

Rastrigin関数をテスト関数とした場合の結果をFig. 3に示す。縦軸がエネルギーであり、横軸が固定近傍レンジの各値を示している。固定近傍レンジでは、全温度で同じ近傍レンジを使用し、それぞれを固定したままでアニーリングを行う。

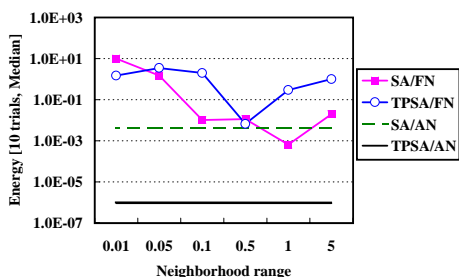


Fig. 3: Effect of the neighborhood range on the performance

この結果において、固定近傍レンジのアルゴリズムについて見ると、逐次SAでは近傍のレンジが1のときに、また、温度並列SAでは近傍のレンジが0.5のときに、最も良い解が得られていることがわかる。これによって、近傍レンジの設定は探索性能に影響を与え、その中でも適切な値が存在するということがわかる。

一方、適応的解摂動を行う逐次SA/ANは、最も適切な近傍レンジに設定したものに比べると解の品質が良くないが、その他の近傍幅に比べると良好な値になっている。このため、最適な近傍幅が未知の場合にはSA/AN

は有効な方法といえる。これに比べてTPSA/ANは、最も適切な近傍レンジを与えた逐次SAと比べても極めて良好な解を得ることができる。その理由は、複数の探索を同時並列に行っているため、1つの解が局所解に陥ったとしても全体としてそこから脱出することができるからである。

5 最適な受理確率を目標とする適応的近傍を持つ温度並列SAの提案 (TPSA/AAN)

TPSA/ANにおいて適応的近傍のメカニズムは、逐次SAよりも、温度並列SAにおいて極めて有効に機能しているといえことが分かった。そこで、適応的近傍のメカニズムであるSA/AANにTPSAを適応することを考え、最適な受理確率を目標とする適応的近傍を持つ温度並列SA(TPSA/AAN)を提案する。すなわち、TPSA/AAN=TPSA+SA/AANである。

この手法の性能を評価するために標準テスト関数であるRastrigin関数⁸⁾(最適解=0)を用いた。それらの設計変数は3変数とした。用いたパラメータをTable 1に示す。

Table 1: Parameters

Function	Rastrigin
Max.(Initial) temperature	10
Min.(Final) temperature	0.01
Markov Length	100000
Cooling rate	0.8

Fig4にSA/AANとTPSA/AANのエネルギー比較を示す。結果は、最適な受理確率を目標とする適応的近傍を持つ温度並列SA(TPSA/AAN)、適応的近傍を持つ温度並列SA(TPSA/AN)、最適な受理確率を目標とする適応的近傍を持つSA(SA/AAN)、適応的近傍を持つ逐次SA(SA/AN)についてである。これらの結果は30回試行の中央値を用いている。縦軸がエネルギーであり、横軸が手法を示している。

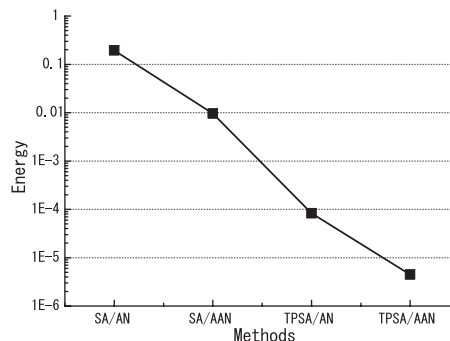


Fig. 4: Performance of the methods

この結果から、SA/AANはSA/ANより良好な結果を

示していることが分かる。また、これらの手法に TPSA を適用した TPSA/AAN と TPSA/AN との性能比較をすると、TPSA/AAN が良好であることが分かる。つまり、TPSA/AAN が最も性能の高い手法であるといえる。

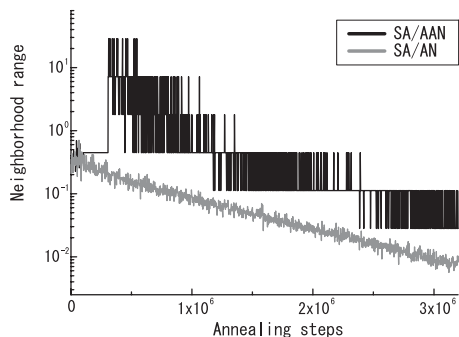


Fig. 5: Histories of Neighborhood range

Fig. 5 に SA/AAN と SA/AN の近傍履歴を示す。Rastrigin 関数はそれぞれの局所解の間隔が 1 であるために、近傍幅が 1 程度あれば局所解からの脱出が可能になる。この図より、SA/AN は局所解から抜け出せる近傍幅となっておらず、このため SA/AAN より性能が悪くなる。

Fig. 6 に TPSA/AAN の温度履歴を示す。この図より TPSA/AAN では自律的に最適な温度スケジュールになるように温度を変化させていることが分かる。TPSA/AAN と SA/AAN とでは前者がより良好な結果になった理由として、適切な温度スケジュールを実現できたためだと考えられる。

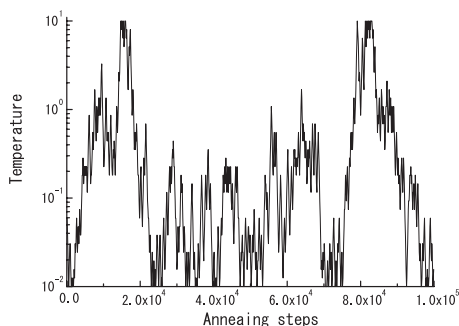


Fig. 6: Histories of Temperature

6 まとめ

シミュレーテッドアニーリングを連続最適化問題に適用する場合、近傍の大きさの調整が必要不可欠となる。前報では、これまで対象問題ごとに考えていた近傍調節を自動化する手法を提案した。その拡張アルゴリズムとして、温度スケジュールの自動化を行う TPSA/AAN を提案した。実験結果より本手法が有効であることを確認した。

参考文献

- 1) Kirkpatrick, S., Gelett Jr. C. D., Vecchi, M. P. *Optimization by Simulated Annealing*. Science, 1983.
- 2) Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M., Teller, A., Teller, E. *Equation of State Calculation by Fast Computing Machines*. Journ. of Chemical Physics, 1953.
- 3) Corana, A., Marchesi, M., Martini, C., Ridella, S. *Minimizing Multimodal Functions of Continuous Variables with the*.
- 4) 三木光範, 廣安知之, 小野景子. 適応的シミュレーテッドアニーリング. 日本機械学会 第 14 回計算力学講演会講演論文集, 2001.
- 5) 木村宏一, 瀧和男. 時間的一様な並列アニーリングアルゴリズム. 信学技報, 1990.
- 6) 小西健三, 瀧和男, 木村宏一. 温度並列シミュレーテッドアニーリング法とその評価. 情報処理学会論文誌, 1995.
- 7) 三木光範, 廣安知之, 笠井誠之, 小野景子. 適応的近傍を持つ温度並列シミュレーテッドアニーリング. 情報処理学会論文誌, 2001.
- 8) Whitley, D., Mathias, K., Rana, S., Dzubera, J. *Evaluating Evolutionary Algorithms*. Artificial Intelligence, 1996.

Source

小野景子, 三木光範, 廣安知之, 伏見俊彦: 日本機械学会 [No.02-31] 第 12 回設計工学・システム部門講演会講演論文集, pp. 113-118, (2002).