

# 適応的近傍を持つシミュレーテッドアニーリングの性能

三木 光範<sup>†</sup>, 廣安 知之<sup>†</sup>, 小野 景子<sup>†</sup>

<sup>†</sup> 同志社大学工学部

多峰性の連続最適化問題にシミュレーテッドアニーリング (SA) を適用する場合、近傍の大きさの調節が必要になる。従来は受率率が 0.5 になるように自動調節し、しかも実験的に得られる近傍調節ルールを用いていた。しかし、目標とする受率率が 0.5 であることの適切性については、明らかではなかった。本研究では、適切な目標受率率について検討し、しかも近傍調節ルールに高性能な適応的メカニズムを組み込むことに成功した。

## Performance of Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood

Mitsunori MIKI<sup>†</sup>, Tomoyuki HIROYASU<sup>†</sup>, and Keiko ONO<sup>†</sup>

<sup>†</sup> Knowledge Engineering Dept., Doshisha University

This paper deals with a new approach in Simulated Annealing (SA), and proposes an adaptive neighborhood mechanism for continuous optimization problems. When applying SA to continuous optimizing problems with numerous local optima, the automatic control of the size of the neighborhood becomes necessary to obtain good performance. Corana proposed an adjustment method of the neighborhood size where the neighborhood is varied to keep the acceptance probability 0.5. However, the effectiveness of this goal value has not been clear. This paper investigates the existence of the appropriate value of the acceptance probability, which is very much smaller than 0.5, and proposes a new adaptive adjustment mechanism to keep this small acceptance probability.

### 1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング<sup>1)</sup> (以下 SA と略す) は、組み合わせ最適化問題に有効な汎用アルゴリズムである。一方、連続最適化問題に SA を適用する場合、解摂動に用いる近傍の設計が重要になり、近傍が解の精度に影響を与える<sup>2)</sup>。一般的に、近傍の設計は、エネルギー関数値が近傍内で極端に変化しないようにする。そのため目的関数ごとに近傍を調節する必要がある。

これに対して、Corana の手法<sup>3)</sup> は解摂動に用いる近傍の幅を受率率が 0.5 になるように調節することで、近傍設計を自動化したものである。しかし、近傍調節に用いられる受率率の変化による解の精度の違いは明らかになっていない。

本研究では、最も良い近傍設計はどのようなものかを調べ、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 (Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood) を提案する。また、代表的な数学関数最小化問題に本手法を適用し、その有効性を検証する。

### 2 受率率を 0.5 とする適応的近傍

#### 2.1 Corana の手法

Corana が提案した SA<sup>3)</sup> 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率率が 0.5 になるように近傍を調節するアルゴリズムである。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。

$$x'_i = x_i + rm \tag{1}$$

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) に示す受率率  $p$  によって変化する関数  $g(p)$  を用いて決定する。

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

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  $c = 2$  としている。

#### 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を自動化する。しかし、受率率が 0.5 になるように近傍を調節するののかという根拠が示されていない。三木らは、近

傍の大きさを固定した SA (固定近傍 SA) に受率を 0.5 にする SA の性能を比較した<sup>4)</sup>。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、受率 0.5 に調節した場合より良好な結果が得られた。従って、受率を 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。

そこで、適切な受率について検討を行う。図 1 は、後に説明する Rastrigin 関数をテスト関数とした受率を 0.5 にした場合の近傍幅とエネルギー履歴を示したものである。横軸はアニーリング回数、縦軸は近傍幅、およびエネルギーを示している。Rastrigin 関数では近傍幅が 1 程度で局所最適解から脱出することが可能である。図 1 より受率を 0.5 に保つ方法では、極めて初期の段階で近傍幅が 1 以下となり、このため局所最適解に陥ることが分かる。また、Rastrigin 関数の最小値は 0 であるが、図 1 のエネルギー履歴を見ても、局所解に陥っていることが分かる。一度、局所解に陥ると、摂動における次状態のエネルギーが高くなる場合が多くなり、そのため受率が低下する。この低下を補うために、式 (2) により近傍幅が小さくなる。すると、ますますその局所解から脱出することは困難となる。このことから、受率を 0.5 に保つ方法は、局所解に陥ることを加速することが分かった。

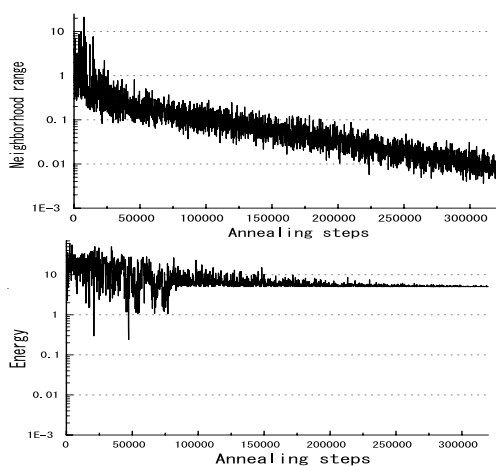


図 1: 近傍幅とエネルギーの履歴 (Rastrigin)

### 3 適応的摂動近傍のための新しいアプローチ

#### 3.1 Corana の手法の改良

適応的近傍を用いない一般的な SA では受率は最終的には非常に低くなることから、受率を 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。そこで、受率をもう少し小さな値に保つことを考える。まず、Corana の手法を用いて受率が 0.3, 0.1, 0.05, および 0.01 になるように式 (2) において  $p_1$  および  $p_2$  を変更した。例えば、受率 0.1 に保つ場合には、 $p_1 = 0.05$ ,  $p_2 = 0.15$  とした。アニーリング開始時は温度が高いため、受率が高くなり、小さな受率を最初から実現する事は出来ない。そのため、それらの受率が実現できる温度になるまで従来の Corana の手法を用いることにした。

図 2 は受率 0.1 を実現しようとした場合の受率の履歴である。横軸はアニーリング回数、縦軸は受率を示している。ここで、アニーリング回数 10 万回までは、受率を 0.5 に保ち、その後、目標とする受率にした。この図より受率 0.1 ではなく 0.27 程度の高い受率になっていることが分かる。式 (2) において、 $p_1 = 0.05$  とした場合、0.27 の受率では近傍幅は増加し、これによって、受率はさらに減少するはずである。それにも関わらず、受率が減少しない。

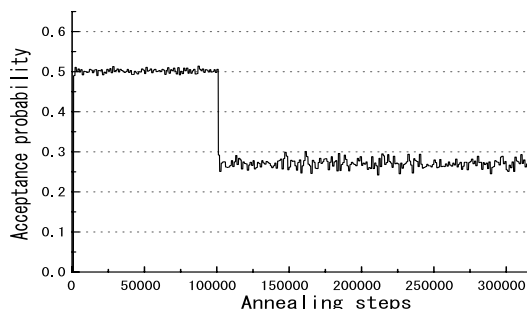


図 2: 受率 (Rastrigin)

図 3 は、この時の近傍幅の履歴を示したものである。この図よりアニーリング回数 10 万回で近傍幅は多少増加しているが、局所解の脱出に必要な幅である 1.0 には達していないことが分かる。このため、解摂動は局所解から脱出できない。すなわち、Corana の手法は受率が 1.0 の場合は近傍幅を 3 倍にするが、この拡大率では局所解からの脱

出には不十分であることが分かった。しかし、この値は問題に大きく依存しており、このため、この拡大率を適応的にする必要があると考える。

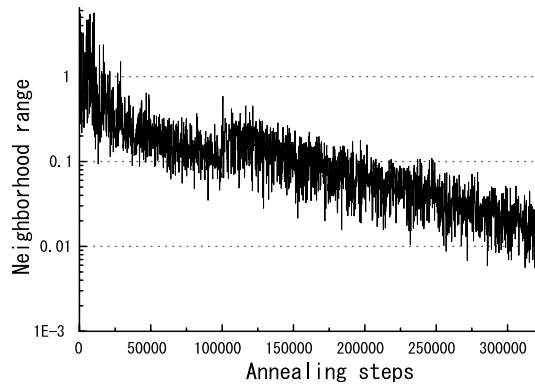


図 3: 近傍幅の履歴 (Rastrigin)

### 3.2 新しい適応的近傍の設計

Corana の手法の改良では小さな受率率を実現することが出来なかったが、ここでは、小さな受率率を実現することの出来る新しいアルゴリズムを提案する。このアルゴリズムは、式 (3) に示す階段関数を用いて受率率から近傍幅を決定する。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、受率率が下がりにくい時には、拡大率が十分な大きな値になるようにした。

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率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、受率率が 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、受率率が指定された値まで減少した後、上のアルゴリズムを用いる。

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

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

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。

## 4 対象問題

提案した手法の性能を評価するために 2 つの標準テスト関数を用いる。式 (5) に示す Rastrigin 関数<sup>6)</sup>、式 (6) に示す Griewank 関数<sup>7)</sup> である。これらの設計変数の数はそれぞれ 2 変数とした。これらの関数の最適解は原点に存在し、その時の関数値は 0 である。

$$f_R(\vec{x}) = (N \times 10) + \left[ \sum_{i=1}^N (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)) \right] \quad (5)$$

定義域 :  $-5.12 < x_i \leq 5.12$ ,

最適解 :  $(x_1, x_2) = (0, 0)$ ,

最適値 :  $f = 0$

$$f_G(\vec{x}) = 1 + \sum_{i=1}^N \left( \frac{x_i^2}{4000} \right) - \prod_{i=1}^N \left( \cos \left( \frac{x_i}{\sqrt{i}} \right) \right) \quad (6)$$

定義域 :  $-600 < x_i \leq 600$ ,

最適解 :  $(x_1, x_2) = (0, 0)$ ,

最適値 :  $f = 0$

## 5 実験結果

### 5.1 パラメータ設定

問題に適応する摂動近傍を持つ SA の性能を評価するために、式 (5)、式 (6) に示す 2 つのテスト関数について表 2 に示すパラメータを用いて比較を行った<sup>4)</sup>。

表 1: パラメータ

Function	Rastrigin	Griewank
Max.(Initial) temperature	10	20
Min.(Final) temperature	0.01	0.001
Markov Length	10000	30000
Cooling rate	0.8	0.726
Neighborhood adjustment interval	50	
Neighborhood range's parameter adjustment interval	200	

### 5.2 受率率の変化

図 4 は受率率の履歴を示したものである。横軸はアニーリングステップ数、縦軸は受率率である。図 4 より、提案手法では困難なパラメータ調節をすることなく、すべての目標受率率を保つことが出来る。

### 5.3 提案手法の性能

Rastrigin 関数について一定の受率率を保った場合の最小エネルギーを図 5 に示す。

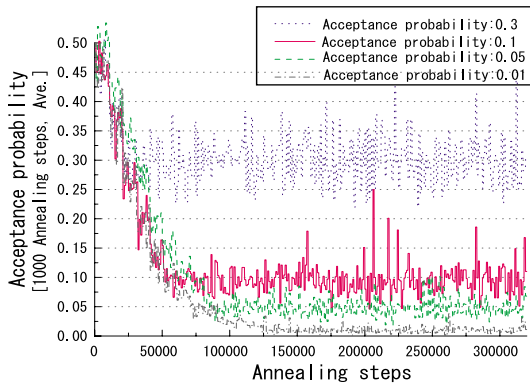


図 4: 受率の履歴 (Rastrigin)

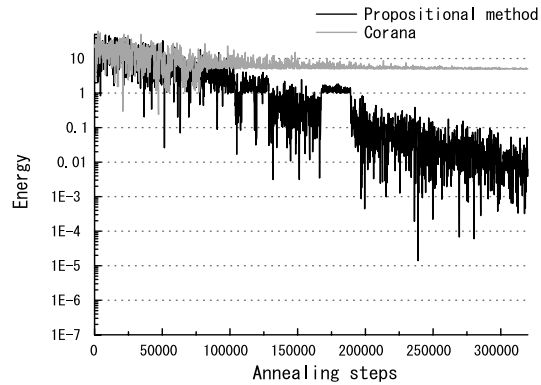


図 6: エネルギー履歴 (Rastrigin 関数)

それぞれの結果は、10 回試行の中央値である。中央値を用いた理由は、複数の局所解が存在し、それらの関数値に大きな差がある場合には平均値と比較すると正しい評価にならないからである。

図 5 より、受率を 0.5 に保つ従来の方法は、良好な精度を与えず、最適な受率は 0.1 であることが分かる。

Griewank 関数に関数に関しても、従来の方法より受率を 0.1 に保つ方が良質な解を得られることが分かった。

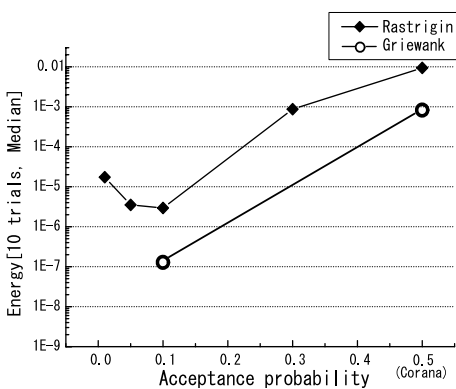


図 5: エネルギー結果

図 6 は Rastrigin 関数のエネルギー履歴で、横軸はアニーリングステップ数、縦軸はエネルギーを示している。この図より、Corana の手法は局所解に陥っているが、提案手法の場合は局所解から脱出し局所解に陥ることもなく、探索がすすんでいくことが分かる。

## 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。本研究では、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。そして実験結果より本手法がシミュレーテッドアニーリングの拡張アルゴリズムとして有効であることを確認した。

## 謝辞

なお、本研究に関しては、文部省科学省科学研究費の補助を受けた。

## 参考文献

- 1) Kirkpatrick, S., Gelett Jr. C. D., and Vecchi, M. P.: Optimization by Simulated Annealing, Science, Vol. 220, No. 4598, pp. 671-680 (1983).
- 2) 喜多一. シミュレーテッドアニーリング. 日本ファジィ学会誌, 1997.
- 3) Corana, A., Marchesi, M., Martini, C. and Ridella, S.: Minimizing Multimodal Functions of Continuous Variables with the "Simulated Annealing" Algorithm, ACM Trans. on Mathematical Software, Vol. 13, No. 3, pp. 262-280 (1987).
- 4) 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, 情報処理学会誌 Vol.42, No.2(印刷中)
- 5) 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).
- 6) Bruce E. Rosen, 中野 良平: シミュレーテッドアニーリング, Vol.9, NO.3, pp. 365-371 (1994)
- 7) Whitley, D., Mathias, K., Rana, S. and Dzubera, J.: Evaluating Evolutionary Algorithms, Artificial Intelligence, Vol. 85, pp. 245-276 (1996).