

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

三木 光 範[†] 廣 安 知 之[†]
小 野 景 子^{††} 伏 見 俊 彦^{††}

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、著者らがすでに提案している最適な受理確率を目標とする適応的近傍を持つ SA(SA/AAN) が有効である。本論文では、並列計算機を用いて組み合わせ最適化問題を解く場合に有効な並列アルゴリズムの 1 つである温度並列シミュレーテッドアニーリング (TPSA) に SA/AAN を組み込んだ手法を提案する。提案手法は各プロセス (プロセッサ) が担当する各温度において、適応的な近傍拡大率を持つ近傍を用いて探索するため、関数のランドスケープに適応した探索が行うことが可能である。一方、TPSA は温度スケジュールが不要であるという特徴がある。そのため本論文で提案する手法は、温度、近傍ともに関数のランドスケープに合わせ自律的な調節を行うことができるという優れた特徴を持つことがわかった。3 つの代表的なテスト関数に適用した結果、提案手法は有効に働くことがわかった。

Temperature Parallel Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood

MITSUNORI MIKI,[†] TOMOYUKI HIROYASU,[†] KEIKO ONO^{††}
and TOSHIHIKO FUSHIMI^{††}

SA/AAN (Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood) is a SA with an 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 typical test problems.

1. はじめに

多くの組み合わせ最適化問題は、問題が大きくなるにつれ解空間が指数的に増大するために真の最適解を求めることが現実的に困難になる。こうした複雑な最適化問題に関しては発見的手法 (ヒューリスティック法) の重要性が高まっている。ヒューリスティック法は最適に近い解を実用的な計算コストで探索する技法である。このとき、実行可能性や最適性を保証することは不可能でもよく、多くの場合、ある実行可能解が最適値にどのくらい近いものかを明確にしなくてもよい。シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) もその手法の 1 つである¹⁾。

SA の基礎となる考えは Metropolis らが 1953 年に発表した焼きなましと呼ばれる加熱炉内の固体の冷却過程をシミュレートするアルゴリズムに端を発し、最適化問題、特に組み合わせ最適化問題を解く汎用近似解法の 1 つとして用いられている²⁾。SA には任意の非線形性を持ったコスト関数をほとんど処理できるという大きな利点があるが、3 つの欠点が存在する³⁾。1 つは、解探索のふるまいを制御する温度スケジュールの決定が困難であるということであり、あとの 2 つは、解摂動に用いる近傍幅の決定が困難であるということ、解を得るまでの計算時間が長いことである。

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。温度スケジュールの自動化については温度並列 SA (TPSA: Temperature Parallel Simulated Annealing)^{4),5)} という優れた方法がある。温度並列 SA 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

[†] 同志社大学工学部

College of Engineering, Doshisha University

^{††} 同志社大学院

Graduate School, Doshisha University

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。

一方、近傍はユークリッド空間内の距離に相当し任意に大きさを決めることが可能である。一般的に近傍幅が小さい場合にはエネルギーの変化は小さく、近傍幅が大きい場合にはエネルギーの変化が大きい。そのため、連続最適化問題に SA を適応する場合、近傍幅が非常に重要になる。しかし、最適な近傍幅は目的関数のランドスケープに大きく依存するため、最適な近傍幅を一意に定義することは難しいといえる。それに対し、Corana は解摂動に用いる近傍幅を受理率が 0.5 となるように調節することで、目的関数のランドスケープに応じた近傍調節を自動化した⁶⁾。しかし、Corana の手法で目標受理率を 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、最適な受理確率を目標とする適応的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)⁷⁾ を提案した。その結果、目標受理率を 0.5 とする Corana の手法は自律的に近傍幅を決定出来る長所があるが、得られた解の精度は良好ではないことがわかった。また、目標受理率を 0.1 から 0.2 にすることで、良好な解が得られることもわかった。

SA/AAN を用いることで目標受理率が 0.1 から 0.2 となる近傍幅を自動的に生成することが出来たが、温度スケジュールについてはあらかじめ適切なものを与える必要があり、自動化出来ていなかった。

そこで本研究では、温度並列 SA に SA/AAN を適用する方法、すなわち、問題に適應する摂動近傍を持ち、かつ温度スケジュールを自動化出来る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. 近傍幅を自動化した従来の TPSA

2.1 温度並列 SA (TPSA)

温度並列 SA^{4),5)} は、SA の並列化手法の 1 つであるが、これまでに提案されてきた他の手法と大きく異なる特徴を持つ。それは、従来の SA では逐次アルゴリズムであるが、並列アルゴリズムであるが、温度スケジュールというものを設定する必要があった。温度並列 SA は、その温度スケジュールの設定が自動化できるという点で、従来の並列 SA とはまったく異なっている。

図 1 は温度並列 SA の概念図であり、通常の SA と

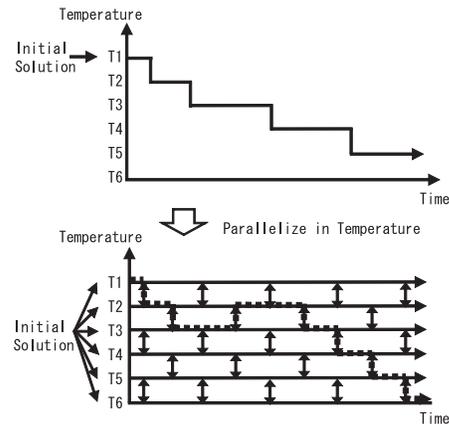


図 1 逐次 SA と温度並列 SA

Fig. 1 Sequential SA and temperature parallel SA

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。効率的な最適化を行うためには、この温度スケジュールを適切に設定することが重要な課題である。一方、下側に示した温度並列 SA では、各プロセッサに解を 1 つずつ与え、互いに相異なる一定温度で同時並列的にアニーリングを行うことを考える。図では、 T_1 から T_6 までの 6 つの異なる温度を持つプロセスが並列的に実行されている様子を示している。このとき、逐次アルゴリズムで温度 T を温度 T' に減少させることに対応して、この並列アルゴリズムでは温度 T のプロセッサから温度 T' のプロセッサへ解を渡すことを考える。

このとき、並列アルゴリズムでプロセッサ間の解の交換を行うタイミングを設定することは、逐次アルゴリズムで温度スケジュールを設定することに相当する。そこで、プロセッサ間の解の交換を確率的に行わせて自動化し、温度スケジュールを不要にすることが考えられる。すなわち、確率的な解の交換が、良い温度スケジュールを選び出してくれることを期待することになる。図 1 では、最高温度からスタートした解が一度 T_3 に到達した後、再び T_2 に加熱され、その後また冷却されるという様子を破線矢印で示している。

温度並列 SA における異なる温度を持つプロセッサ間の解の交換は、図 1 に示すようにある温度に対して、1 つ上の隣接温度との交換と 1 つ下の隣接温度との交換を交互に行う。隣接温度間での解の交換は式 (1) で計算される確率に従って行う。

$$P_{EX}(T, E, T', E') = \begin{cases} 1, & \\ \text{(if } \Delta T \cdot \Delta E < 0) & \\ \exp\left(-\frac{\Delta T \cdot \Delta E}{T \cdot T'}\right) & \\ \text{(otherwise)} & \end{cases} \quad (1)$$

ただし, $\Delta T = T' - T, \Delta E = E' - E$ である.

2.2 適応的近傍を持つ温度並列 SA (TPSA/AN)

Corana が提案した SA⁶⁾ 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. TPSA/AN⁷⁾ は, 温度並列 SA に近傍幅を受理率 0.5 になるように調節する Corana の手法 (ここではこれを SA/AN: Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood と呼ぶ) 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. 従来の温度並列 SA との違いは, 近傍幅を受理率を基にして適応的に変化させる処理を加えたことである.

このアルゴリズムにおいて, 解摂動は式 (2) 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.

$$x'_i = x_i + rm \quad (2)$$

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 (3) 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 はスケールリングパラメータである. Corana は $c = 2, N = 8$ を用いている.

$$\begin{cases} m' = m \times g(p) \\ g(p) = 1 + c \frac{p-p_1}{p_2}, & \text{if } p > p_1 \\ g(p) = \left(1 + c \frac{p_2-p}{p_2}\right)^{-1}, & \text{if } p < p_2 \\ g(p) = 1, & \text{otherwise} \\ p_1 = 0.6, p_2 = 0.4 \end{cases} \quad (3)$$

文献 7) より TPSA/AN は固定近傍を持つ逐次 SA (SA/FN: Simulated Annealing with Fixed Neighborhood), 固定近傍を持つ温度並列 SA (TPSA/FN), および適応的近傍を持つ逐次 SA (SA/AN) より良好な性能を示すことが報告されている. これは 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ためだと考えられる. しかし, Corana の手法は, 目標とする受理率を 0.5 とする根拠は示されていないという問題点が残っていた. これに対し三木ら⁸⁾ 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⁷⁾. 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わかった.

3. 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 (Temperature Parallel SA with Advanced Adaptive Neighborhood:TPSA/AAN)

著者らは, 適応的近傍を用いない一般の SA では探索終了時には受理率が非常に小さくなることから, 受理率を 0.5 に保つ Corana の手法では一定に保つ受理率が大きすぎるとして SA/AAN を提案した⁹⁾. 一方, 適応的近傍を持つ SA は温度並列 SA において極めて高い親和性を有することが報告されている⁷⁾. そこで, そこで本研究では, 温度並列 SA に適応的近傍のメカニズムである SA/AAN を適用し, 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 (Temperature Parallel SA with Advanced Adaptive Neighborhood:TPSA/AAN) を提案する.

本手法と従来の TPSA/AN⁷⁾ との違いは, 近傍調節メカニズムに SA/AAN を組み込むことにより近傍拡大率自体を適応的に変化させることにある. このアルゴリズムは, 式 (4) 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幅を半分に減らす. この時, 近傍幅を増加させる拡大率 H_0 を, 式 (5) 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.

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 を用いて, $p = n/N$ 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 を用いて, $p' = l/L$ 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.

$$\begin{cases} m' = m \times g(p) \\ g(p) = H_0, & \text{if } p > p_1 \\ g(p) = 0.5, & \text{if } p < p_2 \\ g(p) = 1.0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} H_0 = H_0 \times H_1, \\ \quad (\text{初期設定: } H_0 = 2.0) \\ H_1 = 2.0, & \text{if } p' > p_1 \\ H_1 = 0.5, & \text{if } p' < p_2 \\ H_1 = 1.0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5)$$

SA/AAN では、高温時には目標受理率を 0.5 とし、その近傍幅を固定にしたまま探索を行う。この時、温度の減少と共に受理確率も減少し、0.1 に達した時に近傍調節メカニズムが働き、その値を維持する。このアプローチを TPSA に組み込む場合には次の検討が必要である。

- 1) 各温度において目標受理率を一定とするか変化させるか。
- 2) 目標受理率を温度に対して一定とする場合、高温プロセスでは目標受理率が達成できない場合がある。

TPSA の各温度毎に目標受理率を変化させる方法は、各温度に対応する適切な目標受理率が不明であるため実現は困難である。SA/AAN の研究で明らかとなった最適な目標受理率である 0.1 から 0.2 とすることは合理的であるといえる。しかしこの場合には高温プロセスにおいて近傍幅が極端に大きくなるため、近傍幅の上限値を設計空間の大きさとした。

4. 提案手法の有効性の検証

4.1 対象問題

提案した手法の性能を評価するために 3 つの標準テスト関数を用いる。式 (6) に示す Rastrigin 関数¹⁰⁾、式 (7) に示す Griewank 関数¹¹⁾ および式 (8) に示す Rosenbrock 関数¹¹⁾ であり、いずれも $N = 3$ とした。Rastrigin 関数、Griewank 関数の最適解は原点に存在し、その時の関数値は 0 であり、Rosenbrock 関数の最適解は $(x_1, \dots, x_N) = (1, \dots, 1)$ に存在し、その時の関数値は 0 である。

$$f_R(\vec{x}) = (N \times 10) + \left[\sum_{i=1}^N (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)) \right] \quad (6)$$

定義域 : $-5.12 < x_i \leq 5.12$,
最適解 : $\min(f_R(\vec{x})) = f_R(0, 0, \dots, 0)$,
最適値 : $f_R(\vec{x}) = 0$

$$f_G(\vec{x}) = 1 + \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i^2}{4000} \right) - \prod_{i=1}^N \left(\cos \left(\frac{x_i}{\sqrt{i}} \right) \right) \quad (7)$$

定義域 : $-600 < x_i \leq 600$,
最適解 : $\min(f_G(\vec{x})) = f_G(0, 0, \dots, 0)$,
最適値 : $f_G(\vec{x}) = 0$

$$f_{Ro}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{N-1} (100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (1 - x_i)^2) \quad (8)$$

定義域 : $-2 < x_i \leq 2$,
最適解 : $\min(f_{Ro}(\vec{x})) = f_{Ro}(1, 1, \dots, 1)$,
最適値 : $f_{Ro}(\vec{x}) = 0$

4.2 パラメータ設定

TPSA/AAN の性能を評価するために、式 (6)、(7) および (8) に示す 3 つのテスト関数について表 1 および 2 に示すパラメータを用いて比較を行った。詳細なパラメータ設定法は文献 7) を参照されたい。

表 1 パラメータ (Rastrigin, Griewank)
Table 1 Parameters(Rastrigin, Griewank)

Function	Rastrigin	Griewank
Max.(Initial) temperature	10	20
Min.(Final) temperature	0.01	0.001
Markov Length	100000	300000
Cooling rate	0.8	0.726
Neighborhood adjustment interval	50	
Neighborhood range's parameter adjustment interval	200	

表 2 パラメータ (Rosenbrock)
Table 2 Parameters(Rosenbrock)

Function	Rosenbrock
Max.(Initial) temperature	1
Min.(Final) temperature	0.001
Markov Length	3000
Cooling rate	0.81
Neighborhood adjustment interval	50
Neighborhood range's parameter adjustment interval	200

なお、乱数は rand48 を用いた。この乱数は、48 ビットの線形疑似乱数生成関数で Martin Birgmeier によって書かれた。この乱数の詳細は文献¹²⁾ を参照されたい。

4.3 TPSA/AAN の性能

数値実験では、本論文で提案した TPSA/AAN、TPSA に Corana の手法を組み込んだ TPSA/AN、問題に適応する摂動近傍を持つ SA/AAN および Corana の手法である SA/AN の 4 つの手法の解の精度を比較し、提案手法の有効性を検証する。各手法を 3 次元の Rastrigin 関数、Griewank 関数、Rosenbrock 関数に適用した場合に得られた最小エネルギー値を図 2 に示す。これらの結果は、30 回試行の中央値を用いている。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中央値で比較すると位置母数の推定量として頑健であるからである。縦

軸がエネルギーであり、横軸が手法を示している。

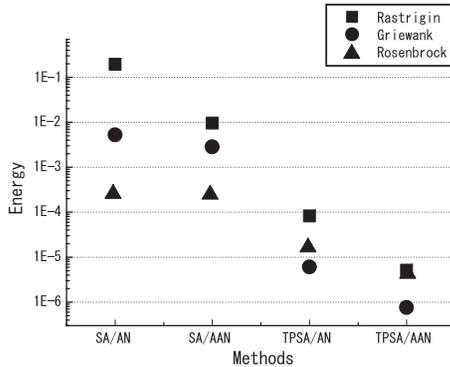


図2 最適解のエネルギー

Fig. 2 Energy of optimum solutions

図2より、Rastrigin関数、Griewank関数、Rosenbrock関数とともにSA/ANはSA/AAN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/ANとTPSA/AANとの性能比較をみると、TPSA/AANが良好であることが示された。つまり、TPSA/AANが最も性能の高い手法であるといえる。

4.4 TPSA/AANの有効性

TPSA/ANとTPSA/AANの近傍履歴、エネルギー履歴を比較し、TPSA/AANの有効性を考察する。対象問題には3次元のRastrigin関数を用いた。図3にTPSA/ANのエネルギー履歴、図4にTPSA/AANのエネルギー履歴、図5にTPSA/AAN、TPSA/ANの近傍幅履歴を示す。

これらの図はある1試行の最良解に関する履歴であり、横軸がアニーリングステップ数、縦軸は近傍幅およびエネルギー値を示している。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。

図3および図4に示すエネルギー履歴を比較すると、TPSA/AANの方がTPSA/ANよりよい解が得られていることがわかる。その理由は、図5に示す近傍幅履歴から分かる。すなわち、TPSA/ANでは近傍幅は初期の段階で1以下になり、局所解に陥っていることがわかる。これに対し、TPSA/AANでは、必要な時に近傍幅が1以上になっており、局所解から脱出することが出来る。これは、TPSA/AANが近傍拡大率自体を適応変化させるというメカニズムを持っているため、ダイナミックな近傍調節が可能になり、局所解から脱出するのに必要な近傍幅を作り出せるためだと考えられる。

5. おわりに

本研究では、TPSAに良好な解に必要な0.1から0.2の受率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 Neighborhood)を組み込んだ最適な受率率を目標とする適応近傍をもつ温度並列SA(Temperature Parallel Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood: TPSA/AAN)を提案した。そして実験結果より、提案手法は問題に適應する摂動近傍を持つSA/AANおよびTPSAにCoranaの手法を組み込んだTPSA/ANより良好な解を得られることが分かった。また、提案手法のアルゴリズムは、近傍、温度とともに自発的に調節されるために困難

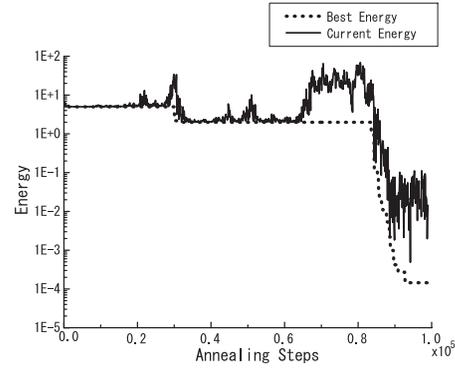


図3 TPSA/ANのエネルギー履歴

Fig. 3 History of energy(TPSA/AN)

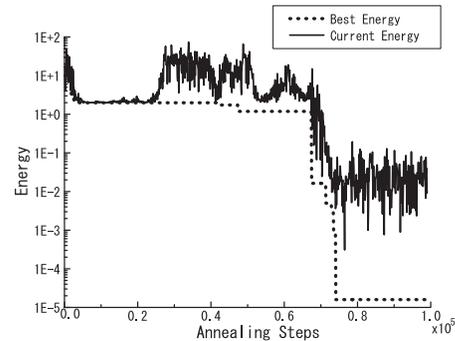


図4 TPSA/AANのエネルギー履歴

Fig. 4 History of energy(TPSA/AAN)

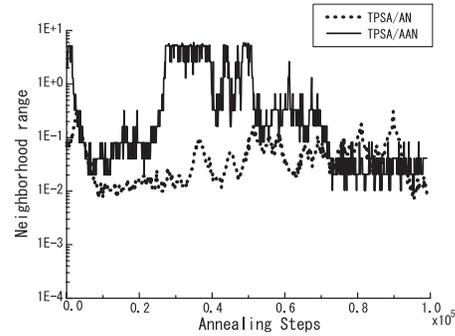


図5 近傍履歴

Fig. 5 History of neighborhood range

なパラメータ調節の負荷が軽減出来き、非常に得るところは大きいといえる。以上の結論より、本研究によって、温度並列SAにSA/AANを組み込むことにより、近傍・温度スケジュールの自動化が可能になり、連続最適化問題をSAに適用する場合の拡張アルゴリズムとして有効であるといえることができる。

参考文献

- 1) Reeves, C.R. 編, 横山, 奈良ら訳. モダンヒューリスティクス. 日刊工業新聞社, 1997.
- 2) Aarts, E., Korst, J. *Simulated Annealing and Boltzmann Machines*. John Wiley & Sons, 1989.

- 3) Ingber, L. *Simulated Annealing: Practice versus Theory*. Journal of Mathl. Comput. and Modelling, 1993.
- 4) 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.
- 5) 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.
- 6) Corana, A., Marchesi, M., Martini, C., Ridella, S. *Minimizing Multimodal Functions of Continuous Variables with the*.
- 7) 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.
- 8) 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.
- 9) 三木光範, 廣安知之, 小野景子. 最適な受理確率を目標とする適応的近傍を持つシミュレーテッドアニーリング. 情報処理学会論文誌, 2003.
- 10) Rosen, B. E., 中野良平. シミュレーテッドアニーリング - 基礎と最新技術 -. 人工知能学会誌, 1994.
- 11) Whitley, D., Mathias, K., Rana, S., Dzubera, J. *Evaluating Evolutionary Algorithms*. Artificial Intelligence, 1996.
- 12) <http://www.ics.uci.edu/eppstein/projects/pairs/>.
(平成 00 年 00 月 00 日受付)
(平成 00 年 00 月 00 日採録)

三木 光範 (正会員)

1950 年生. 1978 年大阪市立大学大学院工学研究科博士課程修了, 工学博士. 大阪市立工業研究所研究員, 金沢工業大学助教授を経て 1987 年大阪府立大学工学部航空宇宙工学科助教授, 1994 年同志社大学工学部教授. 進化的計算手法とその並列化, および知的なシステムの設計に関する研究に従事. 著書は「工学問題を解決する適応化・知能化・最適化法」(技法堂出版)等多数. IEEE, 米国航空宇宙学会, 情報処理学会, 人工知能学会, システム制御情報学会, 日本機械学会, 計算工学会, 日本航空宇宙学会等会員. 超並列計算研究会代表. 通産省産業技術審議会委員.

廣安 知之 (正会員)

1997 年早稲田大学理工学研究所後期博士課程修了. 現在, 同志社大学工学部専任講師. 創発的計算, 進化的計算, 最適設計, 並列処理などの研究に従事. IEEE, 情報処理学会, 電気情報通信学会, 計測自動制御学会, 日本機械学会, 超並列計算研究会, 日本計算工学会等会員. E-mail: tomo@is.doshisha.ac.jp

小野 景子

1978 年生. 2001 年同志社大学工学部知識工学科卒業. 2003 年, 同志社大学大学院工学研究科修士課程卒業. 並列処理, シミュレーテッドアニーリング等の研究に従事.

伏見 俊彦

1979 年生. 2002 年同志社大学工学部知識工学科卒業. 同年, 同志社大学大学院工学研究科修士課程入学. 並列処理, シミュレーテッドアニーリング等の研究に従事.