

近傍並列シミュレーテッドアニーリング

安藤 景子[†], 三木 光範^{††}, 廣安 知之^{††}

[†] 同志社大学大学院 ^{††} 同志社大学工学部

連続最適化問題にシミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing : SA) を適用する場合、近傍の設定が重要となる。ここでは、複数の近傍幅を持つ SA を並列に実施し、ある周期において近傍を交換する、近傍並列 SA (Neighborhood Parallel Simulated Annealing : NPSA) を提案する。これにより、解が自律的に適切な近傍幅を持つことが期待できる。提案手法を 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分かった。

Neighborhood Parallel Simulated Annealing

Keiko ANDO[†], Mitsunori MIKI^{††}, Tomoyuki HIROYASU^{††}

[†] Graduate School of Engineering, Department of Knowledge Engineering, Doshisha Univ.

^{††} Department of Knowledge Engineering, Doshisha Univ.

When applying SA to continuous optimization problems, the appropriate adjustment of the neighborhood ranges becomes necessary to obtain the good performance. In this paper, We propose a Neighborhood Parallel Simulated Annealing (NPSA) for continuous optimization problems, which provides global search using the periodic exchange of different neighborhood ranges with parallel computers. The proposed approach, NPSA, automatically determines the appropriate neighborhood range, and shows a good performance in solving typical test problems.

1 はじめに

SA (Simulated Annealing) 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に有効なアルゴリズムである。SA では、最小化すべき目的関数はエネルギーと呼ばれ、任意の非線形性を持った目的関数をほとんど処理できるという大きな利点がある^{1, 2, 3)}。

SA は組み合わせ最適化問題に有効な手法であるが、複雑な連続最適化問題にも用いられており、近年、タンパク質の 3 次元構造の同定問題をエネルギーの最小化という観点から解く場合には SA が広く用いられている⁴⁾。このように連続最適化問題であっても、目的関数の多峰性が高い複雑な連続最適化問題には、SA が有効であると言える。

SA で重要となるパラメータは、近傍と温度である。連続最適化問題に SA を適用する場合、近傍はユークリッド空間内での距離に関係し、自由に決めることが可能である。一般的に、近傍幅が小さすぎる場合には局所解に陥りやすくなり、近傍幅が大きすぎる場合には局所探索が不十分で解の精度がでなくなる。そのため、連続最適化問題に

SA を適用する場合、近傍幅の調節が非常に重要になるが、それを一意に定義することは難しいといえる。

これに対し、目的関数のランドスケープに応じて近傍を適応的に調節する研究が行われている。Corana は解振動に用いる近傍幅を受理率が 0.5 となるように、ランドスケープに応じた近傍幅調節を自動化した⁵⁾。また、著者らは任意の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) を提案した^{6, 7)}。これらの手法は、近傍幅の自動調節を行うため、問題ごとのチューニングは必要ないが、目標受理率の設定が必要となる。多くの問題ではこの値は 0.2 程度で良好な結果が得られるが全ての問題に対してこの値が不変であるどうかは明らかでない。

このため、近傍幅の自動調節のためのパラメータを必要としない手法についても検討する必要がある。本研究ではそのような手法として、近傍並列 SA (Neighborhood Parallel Simulated Annealing : NPSA) を提案する。NPSA では並列処理を行い、各プロセスに異なる近傍幅を与える。その近傍幅をプロセス間で交換することにより、近傍幅の自

動調節を行う。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 近傍並列 SA (NPSA)

2.1 近傍並列 SA (NPSA) のコンセプト

最適な近傍幅は問題ごとに異なり、設計変数の数によっても変化する。近傍幅を問題ごとに応じて適応的に決める方法は前述した様にいくつか存在する。それらの方法においては近傍幅の適応的調節のためのパラメータを与えれば、問題と探索状況に応じて適切な近傍幅が自動的に決まる。しかしながら、これらの場合でも近傍幅調節のためのパラメータである受理確率や近傍の拡大及び縮小に関するパラメータなどが必要となる。

ここでは、近傍の適応的調節を行い、かつ調節のためのパラメータをも不要とする新しい近傍調節メカニズムを提案する。この方法の基本的なコンセプトは、異なった近傍幅を持つ複数の SA を同時並列的に動作させ、一定のアニーリング周期ごとに解の持つエネルギー値に応じて近傍幅を交換することによりそれぞれの探索において適切な近傍幅が得られることを期待するものである。この手法を近傍並列 SA (Neighborhood Parallel Simulated Annealing : NPSA) と呼ぶ。

2.2 近傍並列 SA (NPSA) のアルゴリズム

NPSA は周期的に全プロセスの同期をとって、各プロセスの近傍幅を自律的に調節するメカニズムを持つ。NPSA のアルゴリズムを図 1 に示す。

図 1 に示すアルゴリズムは並列処理を行う場合、全プロセスが行う処理である。NPSA における各プロセスの近傍幅の初期値として、最大近傍幅を設計空間の幅、最小近傍幅をその 10^{-5} とし、その中間の近傍幅は指数的に等間隔に割り振る。その後、各近傍幅で一定期間 (近傍幅交換周期) 探索を行う。なお、最小近傍幅については、対象とする最適化問題の設計変数の精度に関係する。一般的には、探索空間の 10^{-5} 程度が妥当と考えられる。

同期時には、各プロセスが持つエネルギー値に対してソートをし、良好な解探索を行なっているプロセスから順に小さな近傍幅を割り当てる操作を行なう。こうすることにより、相対的に良好な解探索を行なっているプロセスはその解付近の局所探索をさらに進めることができる。また、局所解に陥っているプロセスは、最終的に大きな近傍幅が割り当てられ、大域探索によって局所解から抜け出すことが可能となる。このように、各プロセスは他のプロセスと協調し、探索に応じて適応的に近傍幅を調節する

NPSA では、同期を並列プロセスの近傍幅交換周

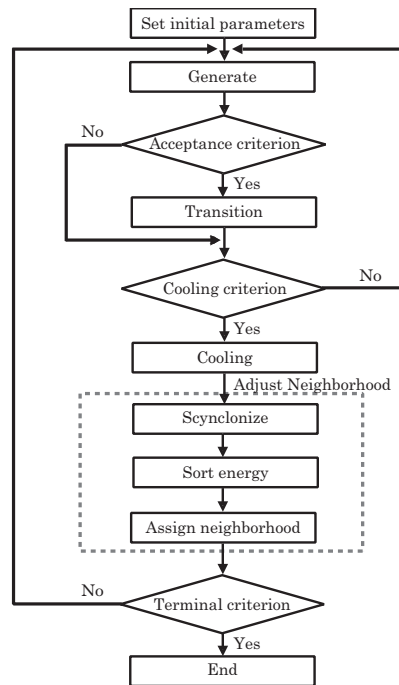


図 1: NPSA のアルゴリズム

期時にのみ行なうため、並列化効率が高く、NPSA の各プロセスでは解探索が独立に連続して行われるため、SA の最適解への収束性も保証される。

3 提案手法の有効性の検証

3.1 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 (Rastrigin 関数⁸⁾、Griewangk 関数⁹⁾ および EggHolder 関数¹⁰⁾) を用いる。Rastrigin 関数、Griewangk 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。Rastrigin 関数は局所解が格子状に存在し、2 次元の場合、100 個の局所解を持つ設計変数間に依存関係のない多峰性の関数である。Griewangk 関数は設計変数間に中程度の依存関係を持ち、大域的には単峰的な関数のようであるが、局所的に無数の局所解を持つ関数である。一方、EggHolder 関数は多峰性で極めて複雑なランドスケープ持っている関数であり、最適解、その時の関数値は設計空間の次元に依存し、その値は既知でないが、ここでは最小値を求める未知の問題として考え、提案手法の有効性の検証に用いる。

3.2 パラメータ設定

問題に適応する近傍幅を持つ SA の性能を評価するために、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。NPSA における各プロセスの近傍幅は最大近傍幅を設計

空間の幅，最小近傍幅をその 10^{-5} とし，その間の近傍幅は指数的に割り振った．

なお，詳細なパラメータ設定法は文献⁷⁾を参照されたい．なお，乱数は rand48 を用いた．この乱数は，Martin Birgmeier らによって作成された 48 ビットの線形擬似乱数生成関数で発生させる¹¹⁾．

表 1: パラメータ (Rastrigin, Griewank)

Function	Rastrigin	Griewank
Max.(Initial) temperature	10	20
Min.(Final) temperature	0.01	0.001
Markov Length	320	960
Cooling rate	0.8	0.726
Number of processors	32	
Min. neighborhood range	Max. range $\times 10^{-5}$	

表 2: パラメータ (EggHolder)

Function	EggHolder
Max.(Initial) temperature	10
Min.(Final) temperature	0.01
Markov Length	960
Cooling rate	0.8
Number of processors	32
Min. neighborhood range	Max. range $\times 10^{-5}$

4 実験結果および考察

4.1 NPSA の性能

数値実験では，本論文で提案した NPSA の有効性を最も標準的で性能の高い PSA と比較し，検証を行う．テスト関数には，Rastrigin 関数，Griewank 関数および EggHolder 関数の 2 次元，3 次元，5 次元を用いる．Rastrigin 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，Griewank 関数に適用した場合の結果を図 3 に，EggHolder 関数に適用した場合の結果を図 4 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平均値でなく中央値で比較する方が位置母数の推定量として頑健であるからである．縦軸にエネルギー値を，横軸に次元数を示している．

図 2, 3 および 4 より，Rastrigin 関数，Griewank 関数，EggHolder 関数ともに NPSA は PSA より良好な結果を示していることが分かる．

4.2 NPSA の有効性

NPSA と PSA の近傍履歴とエネルギー履歴を比較し，NPSA の有効性を考察する．対象問題には 2 次元の Rastrigin 関数を用いた．図 5 に NPSA のエネルギー履歴，図 6 に PSA のエネルギー履歴を示す．これらの結果はある 1 試行の最良解に関する履歴であり，横軸にアニーリングステップ数，縦軸にエネルギー値を示している．

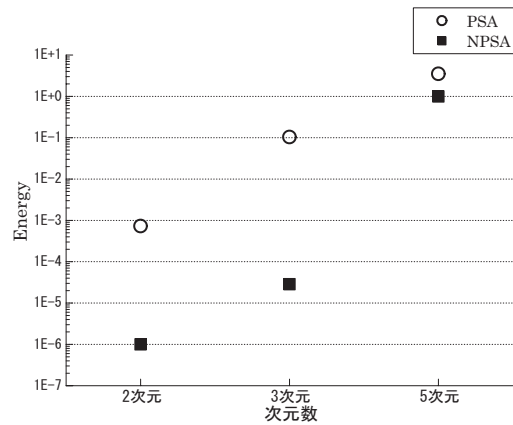


図 2: 手法による性能比較 (Rastrigin)

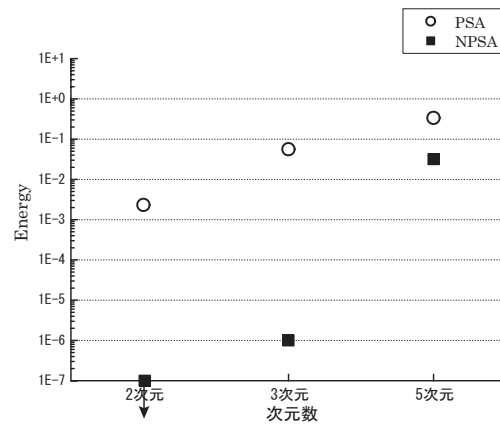


図 3: 手法による性能比較 (Griewank)

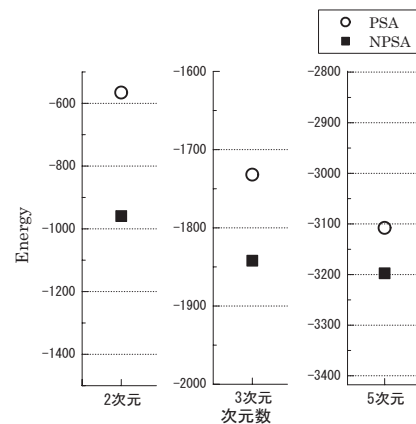


図 4: 手法による性能比較 (EggHolder)

る履歴であり，横軸にアニーリングステップ数，縦軸にエネルギー値を示している．

図 5 および 6 より NPSA が PSA よりよい解が

得られていることが分かる。また、PSAは最適解領域での探索が十分でないのに対して、NPSAは局所解から抜け出し、最適解領域で十分な探索が来ていることが分かる。

その理由は図7に示す近傍幅履歴から明らかである。図7は横軸にアニーリングステップ数、縦軸に近傍幅を示している。PSAは近傍の交換を行わず、予備実験より求めた最適な近傍幅である1で固定とした。PSAは最適な近傍幅で探索を行っているが、図6よりこの近傍幅では、最適解領域に探索点が入ってもすぐに抜け出してしていることが分かる。探索終盤になり温度が下がっても、最適解領域での局所探索が出来ていないと考えられる。一方、NPSAは近傍幅交換時に各プロセスの探索点の解をソートし、エネルギー値が大きい解には大きい近傍を与え、エネルギー値が小さい解には小さい近傍を与えるという、近傍幅を適応的に変化させるメカニズムを持つため、最適解領域に入っている解では局所探索を、局所解領域に入っている解では大域的探索が行える。そのため、効率のよい探索が可能となっていると考えられる。

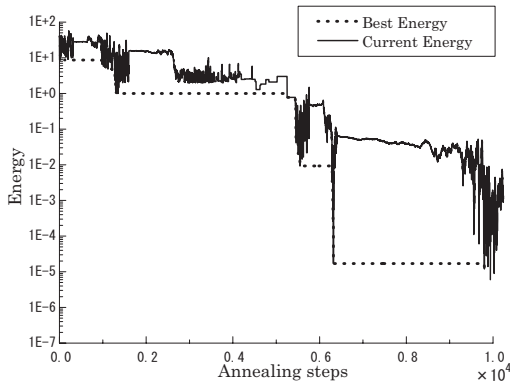


図 5: エネルギー履歴 (NPSA)

5 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、近傍幅の調整が必要不可欠となる。本研究では、従来の適応的近傍メカニズムで必要とされる多くの近傍調節のためのパラメータを減らし、かつ、処理時間の短縮が期待できる新しい適応的近傍並列アルゴリズム (NPSA: Neighborhood Parallel Simulated Annealing) を提案した。そして実験結果より提案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。

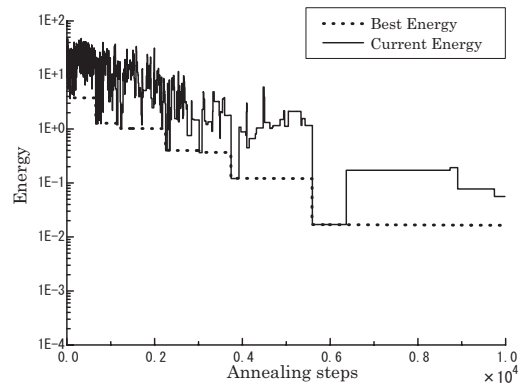


図 6: エネルギー履歴 (PSA)

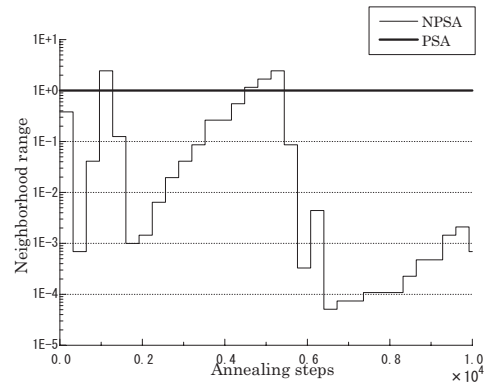


図 7: 近傍幅履歴

参考文献

- 1) 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).
- 2) Aarts, E. and Korst, J.: Simulated Annealing and Boltzmann Machines, John Wiley & Sons, (1989).
- 3) 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).
- 4) 金久実: ゲノム情報への招待, 共立出版 (1996).
- 5) 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).
- 6) 三木 光範, 廣安 知之, 小野 景子: 最適な受取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, 情報処理学会誌 Vol.44, No.1, pp1-6 (2003).
- 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, 情報処理学会誌 Vol.42, No.4, pp745-753 (2003)
- 8) 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).
- 9) Whitley, D., Mathias, K., Rana, S. and Dzubera, J.: Evaluating Evolutionary Algorithms, Artificial Intelligence, Vol. 85, pp. 245-276 (1996).
- 10) <http://www.ft.utb.cz/people/zelinka/soma/func.html>
- 11) <http://www.ics.uci.edu/eppstein/projects/pairs>