適応的近傍を持つ多点探索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††

連続最適化問題に SA を適用する場合，近傍の設計が重要になる．近傍はユークリッド空間内での距離に相当し任意に決められるため，問題ごとに多くの予備実験を行い最適な近傍幅を求める必要があった．ここでは多点探索の SA を用い，近傍幅の設計のためのチューニングが軽減できる手法を提案する．提案する手法は，複数の探索点の位置と探索点間の距離の情報をもとに近傍を定義し，近傍内に一様分布または正規分布の近傍構造を発生させ，エネルギー関数の値をもとに選択を行い次状態を生成する．また SA の特徴である受理判定は従来から用いられている Metropolis 基準をもとに多点探索に適した受理基準を新しく提案する．提案手法を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．

Multi-point Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood

Keiko Ando,† Mitsunori Miki†† and Tomoyuki Hiroyasu††

When SA is applied to continuous optimization problems, the design of the neighborhood used in SA becomes important. A lot of experiments are necessary to determine an appropriate neighborhood range in each problem, because the neighborhood range corresponds to the distance in the Euclid space and is decided arbitrarily. We proposed a Multi-point Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood (MSA/AN) for continuous optimization problems, which determines the appropriate neighborhood range automatically. The proposed method provides the neighborhood range from the distance and the design valuables of two search points, and generates candidate solutions using a probability distribution based on this distance in neighborhood, and selects the next solutions from them based on the energy. In addition, a new acceptance judgment is proposed for multi-point SA based on the Metropolis criterion. The proposed method shows a good performance in solving typical test problems.

1. はじめに

近年，省資源や省エネルギーなど最適化が必要とされる課題が多くなってきており，それにともないシステムの最適化が重要となっている．最適化問題とは，与えられた制約条件のもとでその評価関数を最大または最小にする最適解を求める問題のことをいい，実世界の多くの場面で見られる．

最適化問題は，設計変数が連続値である連続最適化問題と設計変数が離散値である組合せ最適化問題に分類できる．前者の問題は，主に目的関数の勾配情報をもとに設計変数の値を連続値で変更しながら探索を進め，最適解を求めることが多い．一方，後者の問題では，問題が大きくなるにつれ解空間が爆発的に増大するために最適解を求めることが困難になるため，発見的手法（ヒューリスティック法）である遺伝的アルゴリズム（GA）やシミュレーテッドアニーリング（SA）などの技法が用いられる[1)]．

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でも最適値をほとんど求めることができるという大きな利点がある[2)〜4)]．

SA は組合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[5)]．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 が有効であるといえる．

† 同志社大学大学院工学研究科
Graduate School of Engineering, Department of Knowledge Engineering, Doshisha University
†† 同志社大学工学部
Department of Knowledge Engineering, Doshisha University

SA で重要となるパラメータは，近傍と温度である．組合せ最適化問題の場合では，隣接する 2 つの要素を入れ替えるなどして近傍を生成する．近傍の構造は問題に応じて決めることができるため，温度スケジュールの調節が最も重要となる．

一方，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悪くなる．そのため，連続最適化問題に SA を適用する場合，適切な近傍幅を決めることは難しい．

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 らは解摂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[6]．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ュミレーテッドアニーリング（SA/AAN）を提案した[7),8]．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という優れた利点がある．しかしながらこれらの手法は，目標受理率の設定が必要となり，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，すべての問題に対してこの値が不変であるかどうかは明らかでない．

このように，近傍調節にパラメータチューニングが必要になる理由として，現状態からある距離の範囲内を近傍とし，その範囲内に次状態を生成するという従来からの SA の近傍生成方法に原因があると考えられる．近傍を定めるために距離が必要となるため，必ず最適な距離を決定するためのパラメータチューニングが必要となるためである．

そこで本研究では，探索点を複数用いることにより，近傍生成に必要なパラメータチューニングの負荷を大幅に軽減できる手法として適応的近傍を持つ多点探索 SA（Multi-point Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood: MSA/AN）を提案する．提案手法は，近傍幅を距離によって定義するのではなく，探索点を複数用い，その探索点の位置情報を用いることで自動的に近傍を生成する範囲を求める．

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. 最適な近傍

SA では，一般に現在の解を中心とし，解摂動のための移動距離に関する確率分布を与えることにより近傍を定義する方法が一般的である[9]．近傍幅が大きすぎる場合は得られる解の精度が悪く，小さすぎる場合は探索の進行が遅くなるため，近傍幅の定義が難しい．そこで，最適な近傍幅は対象問題（および次元）により異なるのかを調べた．問題の特徴と最適な近傍幅の関係を考察するため，多峰性関数および単峰性の関数に対して数値実験を行った．

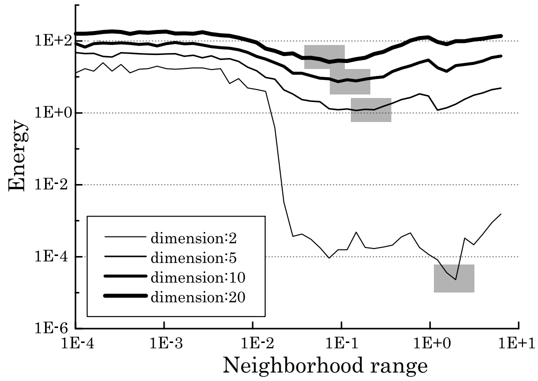


図 1 次元による最適近傍幅の違い

Fig. 1 Appropriate neighborhood range by dimension.

後に説明する連続最適化問題における標準的なテスト関数である多峰性である Rastrigin 関数，Rotated Rastrigin 関数および単峰性である Sphere 関数，Rosenbrock 関数に対して，探索開始時から終了時まで一定の近傍幅（固定近傍幅）とし，近傍幅は最大で設計空間の幅，最小の近傍幅としてその 10^{-5} とし，この間を指数的に 50 分割し，50 種類の近傍について実験を行った．また数値実験では，近傍構造に用いる確率分布として一様分布を用いた．

Rastrigin 関数の結果を**図 1** に示す．この図の横軸が近傍，縦軸がエネルギー値を表している．その他の 3 つの関数に関しても同じ結果が得られたため，Rastrign 関数の結果を代表として示す．

縦軸のエネルギー値はどの関数とも最適値が 0 であるため，エネルギー値は小さいほど良好な結果を示している．図 1 の灰色でマークを付けた付近は，最も低いエネルギー値を得ており，最適な近傍幅であると考えられる．この結果より，最適な近傍幅は 2 次元の場合は近傍幅 1 程度，5 次元の場合は 0.5 程度と高次元になるほど小さくなっており，次元により最適な近傍幅が異なることが分かる．

次に，対象問題により最適な近傍幅が異なるのかを調べた．**図 2** に結果を示す．この図の横軸が近傍幅，縦軸がエネルギー値を表し，20 次元の結果を示す．Rotated Rastrigin 関数は Rastrigin 関数を回転させ

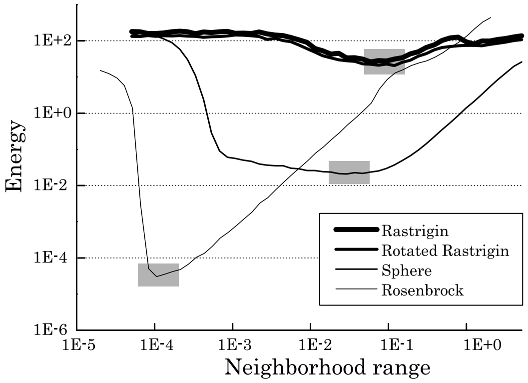


図 2　対象問題による最適近傍幅の違い
Fig. 2　Appropriate neighborhood range by problem.

た関数であり，ランドスケープの凹凸の大きさが同じであるため差が小さいが，最適な近傍幅は Rosenbork 関数は 10^{-4} 程度，Sphere 関数は 5×10^{-2} 程度，Rastrigin 関数は 10^{-1} 程度と対象問題ごとに最適な近傍幅が異なることが分かる．

3. 適応的近傍を持つ多点探索 SA（MSA/AN）

3.1 適応的近傍を持つ多点探索 SA（MSA/AN）のコンセプト

前章で，最適な近傍幅は対象問題ごとにまた，次元ごとに異なることを示した．

近傍幅はユークリッド空間内での距離に関係するため，従来の SA では，現在の探索点を中心に適切な距離の範囲内を近傍と定め，その近傍に次状態を生成する．そのため，対象問題により異なる最適な近傍幅の距離を求めるためは，適応的な手法を用いたとしても，適応的な近傍調節に用いるパラメータのチューニングが新たに必要になるといえる．

一方，GA の手法で親個体から求められる確率分布を用いて子個体を生成する手法（UNDX および BLX-α）がある．これらの手法は，親個体の位置情報から子個体を生成する範囲を確率分布として定義する方法である．本論文では，この手法を SA の近傍生成に適用することにより，近傍調節に用いるパラメータのチューニングの負荷を軽減できる手法を，SA の改良アルゴリズムとして提案する．

この手法を適応的近傍を持つ多点探索 SA（Multi-point Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood: MSA/AN）と呼ぶ．

提案手法のコンセプトは次のとおりである．すなわち，探索点が 1 点の場合は従来の SA の手法のとおり，近傍の幅を距離で与えなければならないが，GA

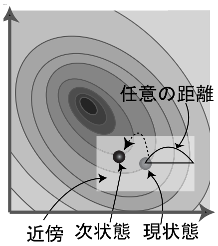


図 3　従来の近傍定義方法
Fig. 3　Conventional neighborhood range.

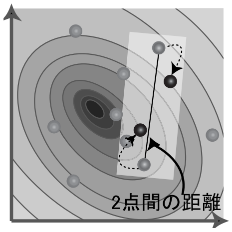


図 4　提案手法の近傍定義方法
Fig. 4　Proposal method neighborhood range.

の手法（UNDX および BLX-α）を適用し複数の探索点を導入することにより，探索点の位置情報をもとに次状態を生成する範囲を定義できると考えられる．つまり，近傍を距離により定義するのではなく探索点の位置情報をもとに定義する．

近傍の定義方法を**図 3** および**図 4** に示す．図 3 および図 4 の等高線は目的関数の等高線を表し，設計空間内で現状態から次状態を生成する様子を表している．図 3 は従来からの定義方法を，図 4 は提案する定義方法を示している．従来の近傍定義では距離を与えているのに対して，提案する近傍定義では複数の探索点から探索点を選択し，その位置情報（探索点間の距離）をもとに近傍を求める．

このような手法を用いると，近傍の距離を与える必要はなくなるが，探索点数を設定する必要が生じるという新たな問題が生じるといえる．**図 5** に 20 次元の多峰性関数と単峰性関数において最適な探索点数（個体数）を調べた結果を示す．この結果は近傍生成に UNDX を用いた結果である．この結果より，多峰性の関数は探索点を 300 点，単峰性の関数は探索点を 50 点とするとよいことが分かる．つまり，提案する手法は新たに探索点数というパラメータが必要となるが，探索点数は問題が多峰性であるか単峰性であるかが分かれば一意に定義することができる．対象問題が単峰性か多峰性かは，設計領域に複数個の初期点を与え，勾配法を用いて各探査点の解が収束するまで探索を行い，すべての探査点が同じ点に収束した場合は単

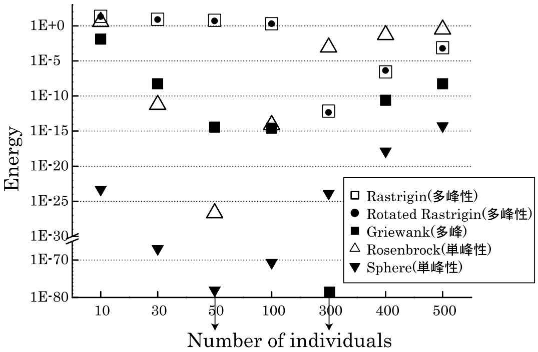


図 5 対象問題による最適探索点（個体数）の違い
Fig. 5 Appropriate number of search points (individuals) by problem.

峰性であり，複数個の点（局所解）に収束した場合は多峰性であると判断できる．

このように多点探索を用いて近傍を定義する提案手法は，従来の SA の手法に比べパラメータチューニングの負荷が軽減でき，非常に有効な手法であると考えられる．

3.2 適応的近傍を持つ多点探索 SA（MSA/AN）のアルゴリズム

MSA/AN は探索点の位置情報をもとに近傍を生成することにより，自律的に近傍を生成，調節するメカニズムを有している．

MSA/AN の近傍構造に用いる確率分布として一様分布と正規分布を用いる．一様分布を用いる場合，2 つの探索点から 2 つの次状態候補を求める方法として，遺伝的アルゴリズム（GA）で用いられている BLX-α [11] という方法がある．ここではこの方法を用いる．

一方，近傍構造に正規分布を用いる場合，3 点の探索点から 2 点の次状態候補を生成する手法として，遺伝的アルゴリズムで用いられている UNDX [10] という手法がある．正規分布を発生させる手法は多く提案されているが，UNDX は性能の高い手法であるため，ここではこの方法を用いる．

UNDX は設計変数間に依存関係がある問題に，BLX-α は設計空間に依存関係がない問題に有効的であるといわれている．

MSA/AN の手順は以下のとおりである．

(1) 初期点として，設計空間内に N 点の探索点をランダムに生成．
(2) 近傍構造として BLX-α を用いる場合
  (a) 探索点のうち，2 点をランダムに選択．
  (b) 探索点の位置情報をもとに一様分布の近傍構造を生成．
(3) 近傍構造として UNDX を用いる場合
  (a) 探索点のうち，3 点をランダムに選択．
  (b) 探索点の位置情報をもとに正規分布の近傍構造を生成．
(4) その近傍構造に従い状態候補を生成．
(5) 次状態候補から次状態を選択．
  BLX-α または UNDX により生成される確率分布に基づき次状態を近傍内に生成するが，目的関数のランドスケープを考慮させるために，次状態候補を複数個発生させその中から最も良かった状態とランダムに選んだ状態の 2 個の状態を次状態として選択する．
(6) 受理判定．
(7) 推移．
(8) 一定周期ごとにクーリング．
(9) 終了条件になるまで 2 から 7 を繰り返す．

3.2.1 受理判定について

受理判定は，次の状態 x' のエネルギー E' と現在の状態 x のエネルギー E との差分 ΔE $(= E' - E)$，および温度パラメータ T によって，次の状態への推移を受理するか否かの判定をする．通常の SA では式 (1) の Metropolis の基準[4] が採用される．温度 T は，エネルギーが増大する方向への推移確率に重大な影響を与えるパラメータである．温度が高い場合は改悪の状態への推移確率も高くなるが，反対に温度が低い場合は改善の方向に推移することが多くなる．しかし，どんな温度でも改悪の方向への推移確率がゼロになるわけではない．

$$\begin{cases} 1 & \text{if } \Delta E < 0 \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right) & \text{otherwise} \end{cases} \tag{1}$$

MSA/AN の場合，2 つの探索点から次状態としての 2 つの探索点を生成するため，次状態のエネルギーと比較すべきエネルギーが 2 つとなる．そのため従来の Metropolis の基準に変わる新たな受理基準が必要となる．**図 6** に提案する受理基準の概念図を示す．図 6 の縦軸はエネルギー値を横軸はパターンを表す．縦軸の $E1$，$E2$ は現在の 2 つの探索点のエネルギー値を表し，エネルギー値が高い方を $E1$ とする．次状態の候補として生成された 2 つの探索点は次に示す受理基準により 1 つずつ受理判定を行う．判定を行う探索点のエネルギー値を E，$E1$，$E2$ と E の差を ΔE_1，ΔE_2 とする．

受理基準は図 6 に示すように，以下の 3 つのパターンに分類される．

(1) 受理判定を行う探索点のエネルギー値 E は $E1$，$E2$ よりエネルギー値が低い．

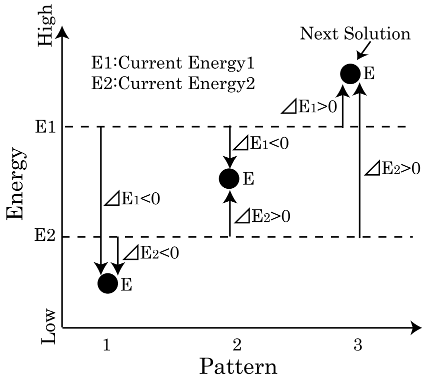


図 6 MSA/AN の受理判定
Fig. 6 MSA/AN acceptance judging.

(2) E は $E1$ よりエネルギー値は低いが $E2$ より高い．

(3) E は $E1$，$E2$ よりエネルギー値が高い．

パターン (1) の場合は，現在の 2 つの探索点より改良方向に新しい探索点が生成されたと考えられ，その探索点を受理確率 1 で受理する．

パターン (2) の場合は，$E1$ から考えると新しい探索点は改良方向に生成されているため，受理確率 1 で推移することが妥当だが，もう一方の現在の探索点のエネルギー $E2$ から考えると改悪方向に新しい探索点が生成されている．そのため改良方向への受理確率 1 と Metropolis 基準により求まる改悪方向への受理確率との代数平均を受理確率とする．

パターン (3) の場合は，現在の探索点より改悪方向に新しい探索点が生成されているため，E_1 および E_2 の改悪方向への受理確率の代数平均を受理確率とする．

式 (2) にパターン (1) から (3) をまとめた受理判定に用いる確率式を表す．

$$\left\{\begin{array}{l} 1 \\ \quad \text{if } \Delta E_1 < 0, \Delta E_2 < 0 \\ \left\{1 + \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{T}\right)\right\}/2 \\ \quad \text{if } \Delta E_1 < 0, \Delta E_2 > 0 \\ \left\{\exp\left(-\frac{\Delta E_1}{T}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta E_2}{T}\right)\right\}/2 \\ \quad \text{otherewise} \\ (\Delta E_1 = E - E1) \\ (\Delta E_2 = E - E2) \end{array}\right. \tag{2}$$

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 4 つの標準テスト関数を用いる．式 (3) に示す Rastrigin 関数[12]，式 (4) に示す Sphere 関数[13]，式 (5) に示す Rosenbrock 関数[12] および Rotated Rastrigin 関数である．Rastrigin 関数，Sphere 関数および Rotated Rastrigin 関数の最適解は原点に存在し，そのときの関数値は 0 である．Rosenbrock 関数の最適解は (1, . . . , 1) に存在し，そのときの関数値は 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 個の局所解を持つ多峰性の関数であり，設計変数間に依存関係のない関数である．一方，Shere 関数，Rosenbrock 関数は単峰性の関数であり，Shpere 関数は設計変数間に依存関係がなく，Rosenbrock 関数は設計変数に依存関係がある関数である．Rotated Rastrigin 関数は式 (3) の Rastrigin 関数を原点を中心に 45 度回転させて作成した関数である．

$$\begin{aligned} & f_{\mathrm{Rast}}(\vec{x}) \\ & \quad = (N \times 10) + \left[\sum_{i=1}^{N}\left(x_i^2 - 10\cos(2\pi x_i)\right)\right] \\ & \text{定義域：} -5.12 < x_i \leq 5.12, \\ & \text{最適解：} (x_1, \ldots, x_N) = (0, \ldots, 0), \\ & \text{最適値：} f = 0 \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned} & f_{\mathrm{Sphere}}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \\ & \text{定義域：} -5.12 < x_i \leq 5.12, \\ & \text{最適解：} (x_1, \ldots, x_N) = (0, \ldots, 0), \\ & \text{最適値：} f = 0 \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned} & f_{\mathrm{Rosen}}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{N}\left[100(x_1 - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2\right] \\ & \text{定義域：} -2.048 < x_i \leq 2.048, \\ & \text{最適解：} (x_1, \ldots, x_N) = (1, \ldots, 1), \\ & \text{最適値：} f = 0 \end{aligned} \tag{5}$$

4.2 パラメータ設定

本論文で提案した MSA/AN の有効性を示すため，比較手法として，SA において標準的な PSA（Parallel SA）[14]，適応的近傍を持つ SA/AAN，GA の手法である UNDX，BLX-α との性能検証を行う．UNDX，BLX-α は SA と同じヒューリスティック手法である GA の手法であり，標準的で性能が非常に高い手法である．

テスト関数には，Rastrigin 関数，Sphere 関数，Rosenbrock 関数および Rotated Rastrigin 関数の 10 次元および 20 次元を用いる．

3 つのテスト関数について用いるパラメータを**表 1**，**表 2** および**表 3** に示す．

MSA/AN におけるクーリング回数は 32 とし，PSA の並列プロセス数も同じく 32 とした．PSA に関して

は 32 並列して探索を行うため，そのクーリング周期を 1/32 倍することにより総アニーリング数（評価回数）を SA/AAN，MSA/AN および GA(UNDX，BLX-α) と同じにした．

MSA/AN および PSA に関する詳細なパラメータ設定法は文献 8) を，GA(UNDX，BLX-α) に関する詳細なパラメータ設定法は文献 10)，11) 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．この乱数の詳細は文献 15) を参照されたい．実験に用いた計算環境を**表 4** に示す．

表 1 パラメータ（MSA/AN）
Table 1 Parameters (MSA/AN).

Function	Rastrigin R-Rastrigin	Sphere	Rosenbrock
最高温度	200	1	1
最低温度	50	0.00001	0.00001
クーリング周期	12,000	6,000	8,000
探索点数（N）	300	50	50

表 2 パラメータ（PSA，SA/AAN）
Table 2 Parameters (PSA, SA/AAN).

Function	Rastrigin R-Rastrigin	Sphere	Rosenbrock
最高温度	200	1	1
最低温度	50	0.00001	0.00001
クーリング周期			
（PSA）	12,000*N/32	6,000*N/32	8,000*N/32
（SA/AAN）	12,000*N	6,000*N	8,000*N
近傍幅（PSA）	1	1	0.5
プロセス数（PSA）	32	32	32

表 3 パラメータ（GA（UNDX），GA（BLX-α））
Table 3 Parameters (GA(UNDX), GA(BLX-α)).

Function	Rastrigin R-Rastrigin	Sphere	Rosenbrock
世代数	12,000	6,000	8,000
個体数	300	50	50

R-Rastrigin:Rotated Rastrigin

表 4 計算環境
Table 4 Machine spec.

CPU（/1Node）	AMD Opteron 1.75 GHz (2CPU/1Node)
Memory（/1Node）	2 GB
#Node	241
Total Memory	470 GB
Interconnect	Gigabit Ethernet

5. 実験結果および考察

5.1 MSA/AN の性能

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 7** に，Sphere 関数に適用した場合の結果を**図 8** に，Rosenbrock 関数に適用した場合の結果を**図 9** に，Rotated 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 10** に示す．これらの結果は，30 回試行の中央値と平均値を用いている．中央値とは，データを大きい（または小さい）順に並べた場合，真ん中に位置する値のことをいう．データ数が偶数の場合は，中央の 2 つの値の平均値を中央値とする．データ数を n，測定データを X_i とした場合の定義式を式 (6) に示す．

$$Median = \begin{cases} X_m & \text{if } n = \text{odd number} \\ & (m = (n+1)/2) \\ (X_m + X_{m+1})/2 & \text{otherwise} \\ & (m = (n+1)) \\ X_i \ (i = 1, 2, \ldots, n) & \end{cases} \quad (6)$$

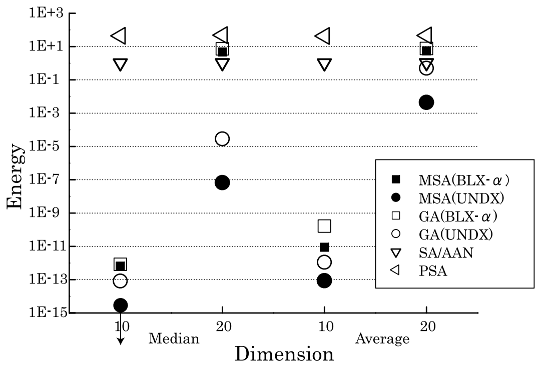


図 7 手法による性能比較（Rastrigin）
Fig. 7 Performance comparison by method (Rastrigin).

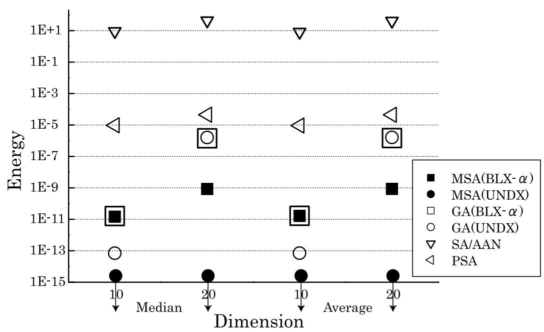


図 8 手法による性能比較（Sphere）
Fig. 8 Performance comparison by method (Sphere).

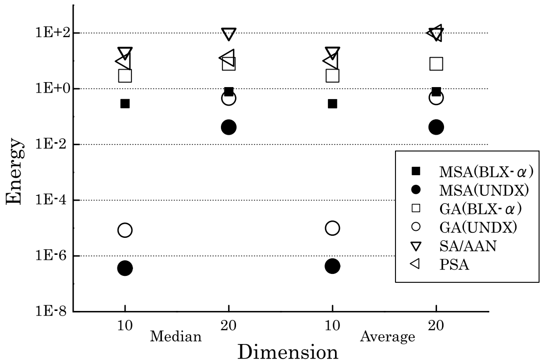


図 9 手法による性能比較（Rosenbrock）
Fig. 9 Performance comparison by method (Rosenbrock).

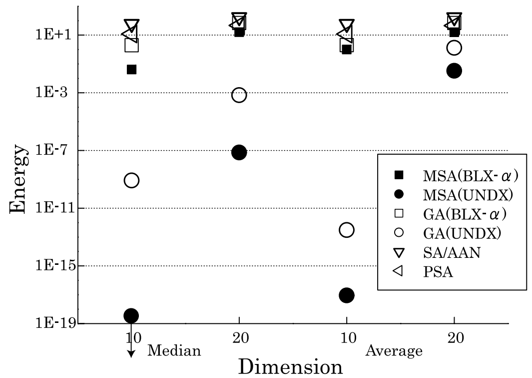


図 10 手法による性能比較（Rotated Rastrigin）
Fig. 10 Performance comparison by method (Rotated Rastrigin).

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．最適値は 0 であるため，エネルギー値が低いほど良好な結果を示す．なお，提案手法 MSA/AN に用いた確率分布の種類を括弧内に示している．

SA/AAN と MSA/AN を比較すると，図 7，図 8，図 9 および図 10 より，提案手法（MSA/AN）はどの問題および次元においても非常に高い性能を示していることが分かる．

また PSA と比較すると，PSA は Sphere 関数では他の問題より良い性能を示しているが，MSA/AN の精度には及ばないことが分かる．

次に，MSA/AN に BLX-α の分布を用いた場合（MSA/AN(BLX-α)）と GA の手法である BLX-α の結果を比較すると，すべての関数で MSA/AN(BLX-α) は GA(BLX-α) と同等，もしくは良好な結果を示していることが分かる．

MSA/AN に UNDX の分布を用いた場合（MSA/AN(UNDX)）と GA の手法である UNDX の結果を比較する．結果より，Rastrigin 関数，Sphere 関数，Rosenbrock 関数，Rotated Rastrigin 関数ともに中央値と平均値の両方とも MSA/AN(UNDX) は GA(UNDX) より良好な結果を示していることが分かる．

最後に，MSA/AN に UNDX を適用した場合と，BLX-α を適用した場合の結果を比較する．単峰性である Sphere 関数は BLX-α を適用した場合でも良好な結果を示しているが，多峰性である Rastrigin 関数および Rotated Rastrigin 関数，設計変数間に依存関係のある Rosenbrock 関数では UNDX を適用した場合の方が良好な結果を示している．

これらの結果より，MSA/AN は標準的な SA の手法である PSA や SA の適応的手法である SA/AAN より良好な結果を示しており，また，UNDX および BLX-α を用いた GA より良好な結果を示していることから，非常に性能の高い手法であると考えられる．また，MSA(BLX-α) より MSA(UNDX) の方が性能が高いことから，複雑な問題に対しては MSA(UNDX) を適用する方が有効的だと考えられる．

5.2 MSA/AN の有効性

5.2.1 探索履歴について

図 7，図 8，図 9 および 図 10 で良好な結果を示した MSA/AN(UNDX) と GA(UNDX) のエネルギー履歴（探索履歴）を比較し，MSA/AN(UNDX) の有効性を考察する．対象問題には 20 次元の Rastrigin 関数，Sphere 関数，Rosenbrock 関数および Rotated Rastrigin 関数を用いた．Rastrigin 関数に適用した場合に得られたエネルギー履歴を**図 12** に，Sphere 関数に適用した場合の結果を**図 14** に，Rosenbrock 関数に適用した場合の結果を**図 16**，RotatedRastrigin 関数に適用した場合の結果を**図 18** に示す．また，これらの関数の等高線図を**図 11**，**図 13**，**図 15** および**図 17** に示す．これらの結果は 10 試行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 12，図 14，図 16 および 図 18 より，探索開始時は両手法とも差が見られないが，探索中盤から両手法に差が生じ始め，MSA/AN(UNDX) は GA(UNDX) より早く最適解を得られていることが分かる．その理由は SA の特徴である温度が関係していると考えられる．

GA(UNDX) は，子個体を生成し，生成した子個体からランクに基づくルーレット選択を行う．そして，選択された子個体を母集団に戻すことで探索を進める．

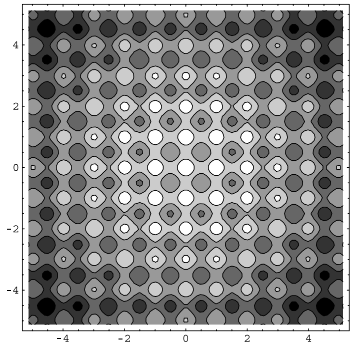


図 11 Rastrigin 関数の等高線図
Fig. 11 Contour image (Rastrigin).

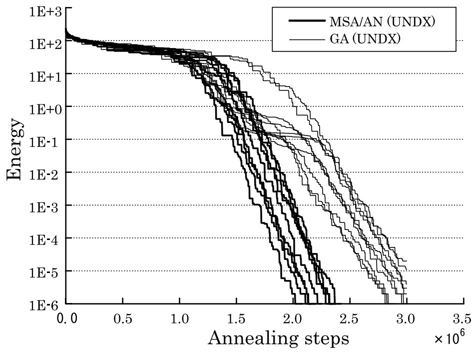


図 12 Rastrigin 関数の収束曲線
Fig. 12 Convergence curve (Rastrigin).

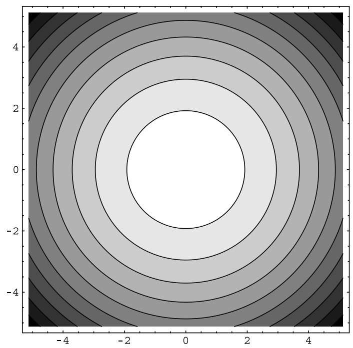


図 13 Sphere 関数の等高線図
Fig. 13 Contour image (Sphere).

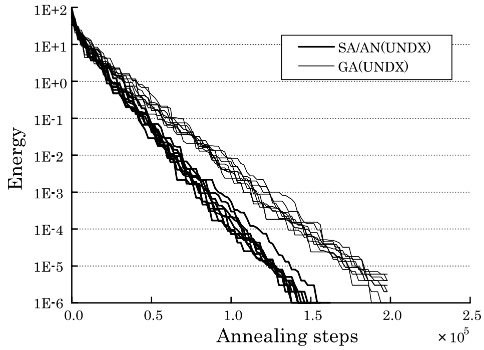


図 14 Sphere 関数の収束曲線
Fig. 14 Convergence curve (Sphere).

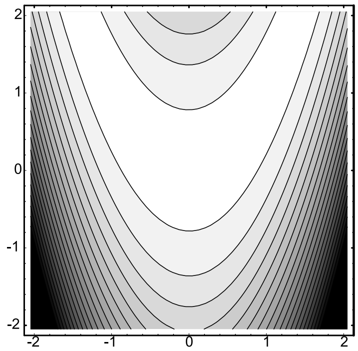


図 15 Rosenbrock 関数の等高線図
Fig. 15 Contour image (Rosenbrock).

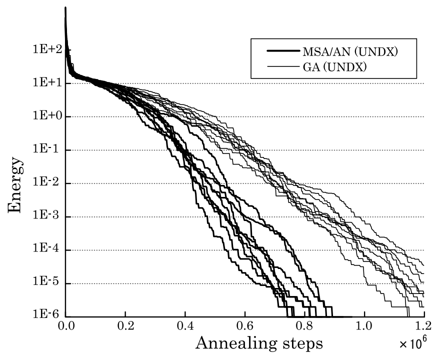


図 16 Rosenbrock 関数の収束曲線
Fig. 16 Convergence curve (Rosenbrock).

この手法では選択手法を決定した時点で，選択される個体が親個体よりエネルギーが悪くなる確率（改悪を認める確率）は固定となる．

それに対して MSA/AN(UNDX) は次状態を生成し，温度に基づき受理判定を行い，改悪方向への推移を認めながら探索を進める．探索初期は高温であるため改悪方向への推移確率が高く，探索終盤は低温であるため改悪方向への推移確率は低くなり，探索過程に合わせて改悪方向への推移が変化する．

このため，探索前半で局所解に陥った場合，MSA/AN(UNDX) の方が GA(UNDX) より改悪方向への推移を多く認めることで，局所解からの脱出が容易に行えると考えられる．一方，探索後半においては，MSA/AN(UNDX) は改悪方向への推移を認めにくくなるため，不要な改悪が生じず，結果として十分な局所探索が可能となり精度が向上すると考えられる．

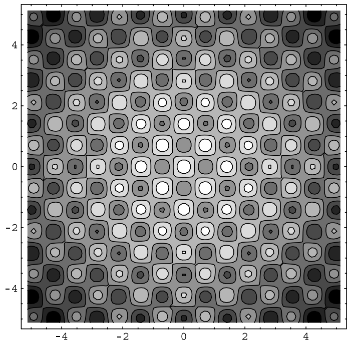


図 17 Rotated Rastrigin 関数の等高線図
Fig. 17 Contour image (Rotated Rastrigin).

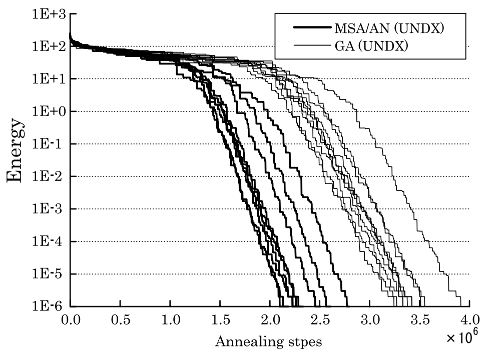


図 18 Rotated Rastrigin 関数の収束曲線
Fig. 18 Convergence curve (Rotated Rastrigin).

表 5 手法による計算時間の比較
Table 5 Calculation time.

手法	計算時間
MSA/AN(UNDX)	1m43.6s
MSA/AN(BLX-α)	1m40.7s
GA(UNDX)	1m40.5s
GA(BLX-α)	1m42.1s
SA/AAN	15.8s
PSA	4.0s

5.2.2 計算時間について

次に，1 試行に必要となる計算時間について考察する．手法による計算時間の比較を**表 5** に示す．この結果は表 4 に示したスペックのマシンを用いた結果である．比較した 5 つの手法で PSA が最も計算時間が短いが，これは計算回数を等しくするため 1 ノードあたりの計算回数を (1/並列数) としたためである．

次に，MSA/AN と GA（UNDX および BLX-α）の比較を行う．MSA/AN は受理判定の処理が必要となるため GA（UNDX および BLX-α）より計算コストが少し高くなることが予想されるが，表 5 より計算時間に大きな影響を与えていないことが分かる．

また，MSA/AN と SA/AAN を比較すると，MSA/AN は計算コストが高くなっていることが分かる．これは，SA/AAN は近傍幅の調節をある周期ごとに行うのに対して，MSA/AN は近傍幅の距離を探索点の距離から求める処理が毎回必要になるためである．しかし，すでに述べたように MSA/AN は SA/AAN より性能が高いため，複雑な問題を対象とする場合は MSA/AN を適用すると有効であると考えられる．

以上のことより，性能と計算コストとのトレードオフを考え問題の規模に合わせて手法を選ぶ必要があるといえるが，MSA/AN は複雑な問題においても有効な手法であると考えられる．

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，近傍幅の調整が必要不可欠となる．本研究では，SA の改良手法として，従来の適応的近傍メカニズムで必要とされる近傍調節のためのパラメータ調節の負荷を軽減する，新しい近傍生成メカニズムを持つ適応的近傍を持つ多点探索 SA（Multi-point Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood: MSA/AN）を提案した．そして実験結果より提案手法が有効であることを確認した．

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ックス，日刊工業新聞社 (1997).
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，Vol.9, No.6 (1997).
3) Aarts, E. and Korst, J.: *Simulated Annealing and Boltzmann Machines*, John Wiley & Sons (1989).
4) 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).
5) 金久 実：ゲノム情報への招待，共立出版 (1996).
6) Corana, A., Marchesi, M., Martini, C. and Ridella, S.: Minimizing Multimodal Functions of Continuous Variables with the “Simulated Annealing” Algorithm, *ACM Trans.Mathematical Software*, Vol.13, No.3, pp.262–280 (1987).
7) 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，情報処理学会誌，Vol.44, No.1, pp.1–6 (2003).
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，情報処理学会誌，Vol.42, No.4, pp.745–753

(2001).

9) Rosen, B.E., 中野良平：シミュレーテッドアニーリング，人工知能学会誌，Vol.9, No.3, pp.365–371 (1994).

10) 小野　功，佐藤　浩，小林重信：単峰性正規分布交叉 UNDX を用いた実数値 GA による関数最適化，人工知能学会誌，Vol.14-6, pp.1146–1155 (1999).

11) Eshelman, L.: *The CHC Adaptive Search Algorithm: How to Have Safe Search When Engaging in Nontraditional Genetic Recombination, Foundations of Genetic Algorithms*, pp.265–283, Morgan Kaufmann (1991).

12) Whitley, D., Mathias, K., Rana, S. and Dzubera, J.: Evaluating Evolutionary Algorithms, *Artificial Intelligence*, Vol.85, pp.245–276 (1996).

13) http://www.ft.utb.cz/people/zelinka/soma/func.html

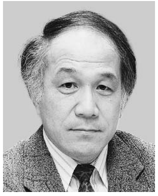
14) Robert, A.: *Simulated Annealing Parallelization Techniques*, John Wiley & Sons (1992).

15) http://www.ics.uci.edu/eppstein/projects/pairs

(平成 17 年 11 月 11 日受付)
(平成 18 年 5 月 9 日再受付)
(平成 18 年 7 月 7 日再々受付)
(平成 18 年 7 月 19 日採録)

安藤　景子（学生会員）

1978 年生．2003 年同志社大学大学院工学研究科修士課程修了．同年（株）トヨタコミュニケーションシステム入社．2005 年同志社大学大学院工学研究科博士後期課程入学．並列処理，最適設計，シミュレーテッドアニーリング等の研究に従事．



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．著書に『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，人工知能学会，日本機械学会，計算工学会，日本航空宇宙学会等各会員．通産省産業技術審議会委員等歴任．超並列計算研究会代表．

廣安　知之（正会員）

1997 年早稲田大学大学院理工学研究科後期博士課程修了．早稲田大学理工学部助手を経て，1998 年同志社大学工学部助手．2003 年より工学部知識工学科助教授．進化的計算，最適設計，並列処理等の研究に従事．IEEE，電子情報通信学会，計測自動制御学会，日本機械学会，超並列計算研究会，日本計算工学会各会員．