

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

三木 光 範[†] 廣 安 知 之[†] 小 野 景 子^{††}

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。従来は受理率が 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、目標とする受理率が 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、適切な目標受理率が 0.5 よりかなり小さいことを明らかにし、そのような受理率が実現可能な新しい高性能な適応的メカニズムを近傍調節ルールに組み込むことに成功した。

Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood

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

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

最適化問題は、設計変数が連続である連続最適化問題と設計変数が離散的である組合せ最適化問題に分類できる。前者の問題では、主として目的関数の勾配情報をもとに連続的な探索を行うことで最適解を求めることが多い。一方、後者の問題では全数探索は組合せ爆発により困難であり、一般には汎用的な確率的アルゴリズムによって準最適解を求めることが多い。それらは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) などである。

SA (Simulated Annealing)¹⁾ は、金属の焼き鈍しという処理にヒントを得て開発され、組合せ最適化問題に有効なアルゴリズムである。ここでは、最小化すべき目的関数はエネルギーとよばれ、現在の解の近傍に確率的に次の解候補を発生させ、もしエネルギーが減少していたらその解に遷移し、そうでなくても温度と

いうパラメータを基にしたある確率でその解に遷移するというメカニズムを持っている。これにより、単純な最急降下法が局所最適化しか与えないのに対して、SA では温度パラメータの調節により、大域的最適解を得ようとするものである。

SA は組合せ最適化問題に有効な解法であるが、複雑な連続最適化問題にも広く用いられてきた^{2),3)}。たとえばタンパク質の 3 次元構造の同定問題を系のエネルギー最小化という観点から解く場合⁴⁾ には SA は最もよく利用されているが、その場合、設計変数は分子結合における回転角となり、この問題は連続最適化問題となる。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きわめて高く、複雑な最適化問題となる場合には SA は有効な解法となる。このため、SA は組合せ最適化問題のみならず、連続最適化問題にも応用可能な汎用的手法といえる。

SA では近傍と温度の調節によって解の精度が決まる。組合せ最適化問題では近傍生成の方法は、たとえば隣接する 2 つの要素を入れ替えるなどの摂動操作となる。この場合、隣接要素だから摂動によるエネルギー変化は少ないということではなく、近傍の範囲と生

[†] 同志社大学工学部
College of Engineering, Doshisha University
^{††} 同志社大学大学院
Graduate School, Doshisha University

じるエネルギーの変化の間には相関は生じない．このため、組合せ最適化問題では近傍の構造を適当に決めると、あとは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．そして、一般的に、その近傍が小さい場合にはエネルギーの変化は小さく、大きい場合にはエネルギーの変化も大きい．しかも、その変化はエネルギー関数に大きく依存する．このため、連続最適化問題に SA を適用する場合、近傍の範囲の調節が非常に重要な課題となる．したがって、連続空間を対象として考える場合には、温度を受理処理だけでなく、生成処理にも用いることが多い³⁾．こうした考え方により、高い温度では、現在の解から一気に遠い地点への推移を受理し、低い温度では、現在の解から比較的近い地点に推移することになる．しかしながら、こうした近傍範囲の調節は目的関数であるエネルギー関数のランドスケープを考慮しておらず、このため最高温度における近傍範囲をどのようにして決定するかという問題が残る．

これに対して、Corana らの手法⁵⁾ は解摂動に用いる近傍の幅を受理率が 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理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、問題に適應する摂動近傍を持つシミュレートドアニーリング (SA/AAN: Simulated Annealing with Advanced 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. 受理率を 0.5 とする適応的近傍

2.1 Corana らの手法

Corana らが提案した SA⁵⁾ 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．

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

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) に示す受理率 p によって変化する関数 $g(p)$ を用いて決定する．

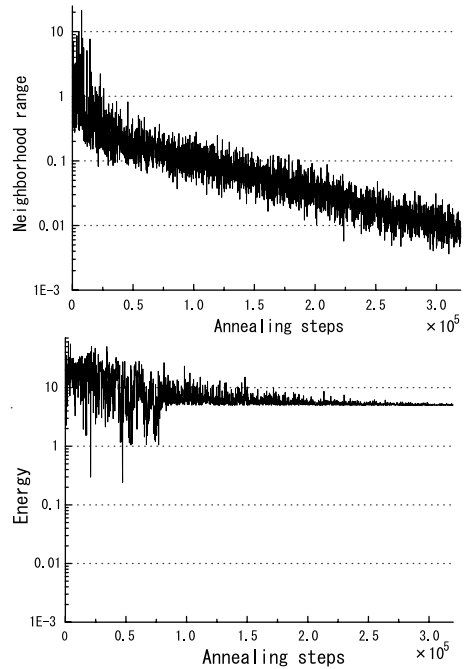


図 1 近傍幅とエネルギーの履歴 (Rastrigin)

Fig. 1 Histories of energy and neighborhood range (Rastrigin)

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

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 らと同様に $c = 2$, $N = 8$ としている．

2.2 Corana らの手法の問題点

Corana ら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い．これに対し三木らは、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よいとは考えられないことが分かった．

そこで、適切な受理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場合

において受率率を 0.5 にしたとき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 より受率率を 0.5 に保つ方法では、きわ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ると、局所解に陥っていることが分かる。いったん局所解に陥ると解振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、受率率を 0.5 に保つ方法は、局所解に陥ることを加速すると考えられる。

3. 適応的振動近傍のための新しいアプローチ

3.1 Corana らの手法の改良

適応的近傍を用いない一般的な SA では受率率は最終的には非常に低くなることから、受率率を 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分かる。そこで、受率率を 0.5 より小さな値に保つことを考える。

まず、Corana らの手法を用いて受率率が 0.3, 0.1 程度になるように式 (2) において p_1 および p_2 を変更した。たとえば、受率率 0.1 に保つ場合には、 $p_1 = 0.15$, $p_2 = 0.05$ とした。また、アニーリング開始時は温度が高いため、受率率が高くなり、小さな受率率を最初から実現することはできない。そのため、それらの受率率が実現できる温度になるまで従来の Corana らの手法（受率率を 0.5 に保つ）を用いることにした。

図 2 は受率率 0.1 を実現しようとした場合の受率率の履歴である。横軸はアニーリング回数、縦軸は受率率を示している。

受率率の全体的変化を見るため 1,000 回平均と実際の近傍調節間隔である 8 回ごとの平均受率率を示した。

ここで、アニーリング回数 10 万回までは、受率率を 0.5 に保ち、その後、目標受率率を 0.1 にした。しかしながら、この図より受率率を調節する基準となる 8 回平均の受率率は激しく変動すること、および 1,000 回平均の受率率の値は 0.1 ではなく 0.27 程度の高い値になっており、目標受率率が達成できていないことが分かる。

その原因を明らかにするために近傍幅について検討する。図 3 は、この場合の近傍幅の履歴を示したも

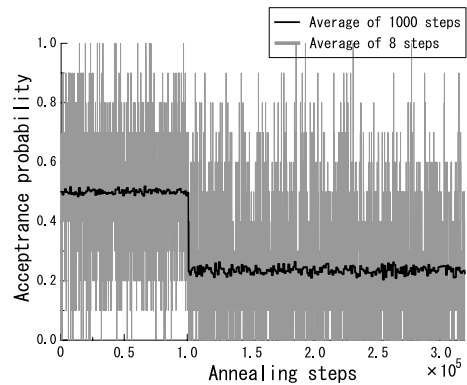


図 2 受率率の履歴 (Rastrigin)

Fig. 2 History of acceptance probability (Rastrigin).

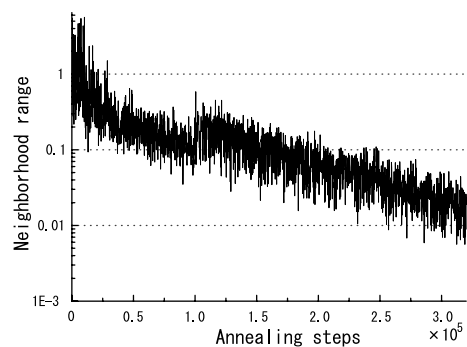


図 3 近傍幅の履歴 (Rastrigin)

Fig. 3 History of neighborhood range (Rastrigin).

のである。この図より目標受率率を 0.1 に変化させた時点（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 以上に増加していないことが分かる。このため、解振動は局所解から脱出できない。すなわち、Corana らの手法は受率率が高い場合には近傍幅を最大 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、局所解から脱出できる適切な拡大率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。

3.2 新しい適応的近傍の設計 (SA/AAN)

Corana らの手法の改良では小さな受率率を実現することができないことが分かった。そこで本研究では、小さな受率率を実現することのできる新しい適応的近傍アルゴリズム (SA/AAN: Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood) 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。すなわち、受率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。

このとき、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ときには、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できない。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。

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

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

ここで p は、近傍の範囲を変更する間隔 N の間に解振動が受理された回数 n から、 $p = n/N$ と計算される。受理率 0.1 以下をするため N は 50 とした。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 の間に解振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。

4. 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 (5) に示す Rastrigin 関数³⁾、式 (6) に示す Griewank 関数⁹⁾、式 (7) に示す Rosenbrock 関数⁹⁾ である。それらの設計変数の数はそれぞれ 2 変数とした。Rastrigin 関数、Griewank 関数の最適解は原点に存在し、そのときの関数値は 0 であり、Rosenbrock 関数の最適解は $(x_1, x_2) = (1, 1)$ に存在し、そのときの関数値は 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: $-5.12 < x_i \leq 5.12$,

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	10000	30000
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	300
Cooling rate	0.81
Neighborhood adjustment interval	50
Neighborhood range's parameter adjustment interval	200

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: $f = 0$

$$f_{Ro}(\vec{x}) = 100 (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \quad (7)$$

定義域: $-2 < x_i \leq 2$,
最適解: $(x_1, x_2) = (1, 1)$,
最適値: $f = 0$

5. 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)、(6)、および (7) に示す 3 つのテスト関数について表 1 および表 2 に示すパラメータを用いて比較を行った。なお、詳細なパラメータ設定法は文献 7) を参照されたい。

6. 乱数

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 10) を参照されたい。

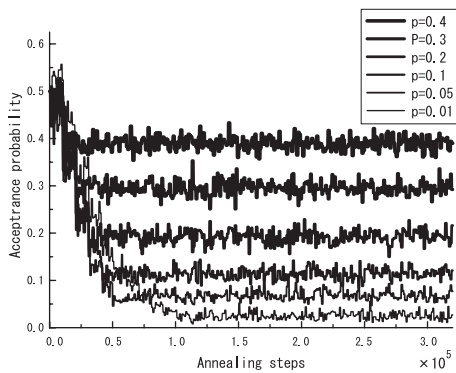


図 4 受理率の履歴 (Rastrigin)

Fig. 4 Histories of acceptance probability (Rastrigin).

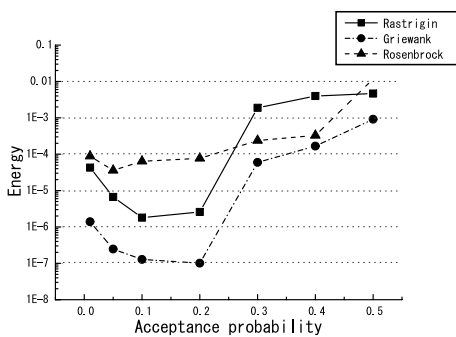


図 5 最適解のエネルギー

Fig. 5 Energies of optimum solutions.

7. 実験結果および考察

7.1 受理率の変化

図 4 は受理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 1000 回のアニーリング数で平均した受理率である。この図より、提案手法ではすべての目標受理率を保つことができることが分かった。

7.2 SA/AAN の性能

3 つのテスト関数について一定の受理率を保った場合の最適解のエネルギーを図 5 に示す。

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。

図 5 より、いずれの関数に対しても受理率を 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分かる。Rastrigin 関数では最適な受理率は 0.1 である。

また、Griewank 関数でも最適な受理確率は 0.2 となっている。

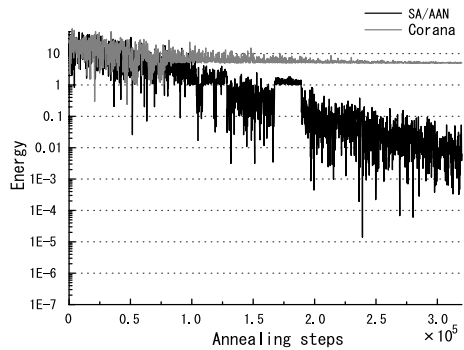


図 6 エネルギー履歴 (Rastrigin 関数)

Fig. 6 Histories of energy (Rastrigin).

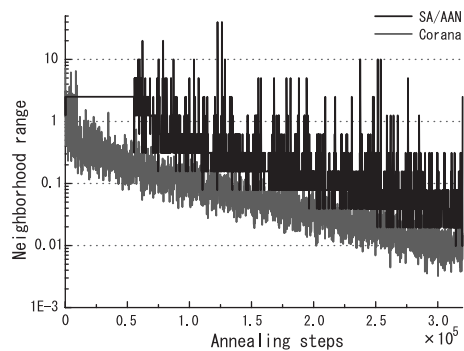


図 7 近傍幅の履歴 (Rastrigin 関数)

Fig. 7 Histories of neighborhood range (Rastrigin).

Rosenbrock 関数に関しては、Rastrigin 関数や Griewank 関数に比べると受理率を低くすることによる解の精度の向上は低いが、それでも受理率を下げることにより解の精度はかなり向上している。Rosenbrock 関数は他の関数に比べ、大きな山が少なく局所解から脱出しやすい特徴を持っている。そのため受理率による解の精度差が小さくなっていると考えられる。

7.3 SA/AAN の効果

従来の適応的近傍では良好な解を得られないにもかかわらず、SA/AAN では良好な解を得られる理由は図 6 から明らかである。

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、SA/AAN の場合は局所解に陥ることもなく、探索がすすんでいることが分かる。

この理由は近傍幅の違いによるものである。図 7 は従来の手法と提案手法の近傍幅の履歴を比較したものである。横軸はアニーリングステップ数、縦軸は近傍幅を示している。この図より従来の適応的近傍では局所解にとらわれ、そこから脱出できないのに対して、SA/AAN では局所解から脱出できないことが分かる。

と近傍幅をいくらでも大きく拡大し、局所解から脱出できる近傍幅を生成していることが分かる。

8. 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。

謝辞 本研究に関しては、文部科学省科学研究費の補助を受けた。課題番号は No.12650100 である。ここに記して謝意を表す。

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) Aarts, E. and Korst, J.: *Simulated Annealing and Boltzmann Machine*, John Wiley & Sons (1989).
- 3) Rosen, B.E., 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).
- 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. Mathematical Software*, Vol.13, No.3, pp.262-280 (1987).
- 6) 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).
- 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, pp.745-753 (2001).
- 8) 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).
- 9) Whitley, D., Mathias, K., Rana, S. and Dzubera, J.: Evaluating Evolutionary Algorithms, *Artificial Intelligence*, Vol.85, pp.245-276 (1996).
- 10) <http://www.ics.uci.edu/~eppstein/projects/pairs/>

(平成 13 年 10 月 10 日受付)

(平成 14 年 10 月 7 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, 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 年早稲田大学大学院理工学研究科後期博士課程修了。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, 並列処理等の研究に従事。IEEE, 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, 日本計算工学会各会員。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。同年, 同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。