

3D-03

連続/離散的最適化問題に対する適応的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^{††} 窪田 耕明^{††} 吉田 武史^{††} 實田 健[‡][†]同志社大学工学部 ^{††}同志社大学大学院 [‡]同志社大学工学部学生

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング [1](以下 SA と略す) は複雑な最適化問題を解くヒューリスティック解法の一つである。SA を適用する場合、重要になるのが、温度パラメータと近傍の設定方法である。

連続最適化問題では近傍の設計が重要となり、エネルギー関数値が近傍内で極端に変化しないように目的関数ごとに近傍を調節する必要がある [2]。これに対して、Corana の手法 [3] では受率率が 0.5 になるように近傍設計を自動化した。しかし、目標受率率を 0.5 とすることの妥当性は明らかではない。

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 (SA/AAN: Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood) を提案する。

一方、組み合わせ最適化問題では、近傍の大きさは解摂動に用いる方法を決定すると一意に定まる。そのため温度パラメータが重要になる。これに関し、近年の研究において、SA の解探索性能が非常に良好となる一定温度 (以下、重要温度) が存在することが明らかとなっている [4]。

そこで本研究では、代表的な離散問題である巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem: TSP) を対象として、重要温度に着目し、温度スケジュールのうち最高温度を自動決定する適応的シミュレーテッド・アニーリング (Adaptive SA/Maximum Temp.: ASA/MAXT) を提案する。

2 連続最適化問題

2.1 受率率を 0.5 とする適応的近傍の問題点

Corana が提案した SA [3] は、無駄な探索を防ぐため、一様分布を元とした解摂動に用いる近傍の範囲

Adaptive Simulated Annealing

[†] Mitsunori MIKI (muniki@mail.doshisha.ac.jp)[†] Tomoyuki HIROYASU (tomo@is.doshisha.ac.jp)^{††} Keiko ONO (keiko@mikilab.doshisha.ac.jp)^{††} Koumei KUBOTA (southern@mikilab.doshisha.ac.jp)^{††} Takeshi YOSHIDA (undyery@mikilab.doshisha.ac.jp)[‡] Takeshi JITTA (jitta@mikilab.doshisha.ac.jp)

Department of Knowledge Engineering and Computer Science, Doshisha University (†)

Graduated School of Knowledge Engineering and Computer Science, Doshisha University (††)

Undergraduate student, Department of Knowledge Engineering and Computer Science, Doshisha University (†)

1-3 Miyakodani, Tatara, Kyotanabe, Kyoto 610-0321, Japan

を受率率が 0.5 になるように調節するアルゴリズムである。

Corana の手法により、近傍設計が自動化できる。しかし、目標とする受率率を 0.5 とする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) と受率率を 0.5 にした SA の性能を比較した [5]。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、受率率を 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、受率率を 0.5 に調節する適応的近傍設計は必ずしも良いとは考えられない。

そこで、適切な受率率について検討を行う。図 1 は、Rastrigin 関数をテスト関数とし受率率を 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ると、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、そのため受率率が低下する。この低下を補うために、より近傍幅が小さくする。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。

2.2 適応的摂動近傍のための新しいアプローチ

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小さくなることから、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 より小さい受率率を実現する適応的摂動近傍のための新しいアルゴリズムを提案する。

このアルゴリズムは、式 (1) 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 (2) のように再帰的に定義し、受率率が下がりにくい時には、拡大率が十分に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

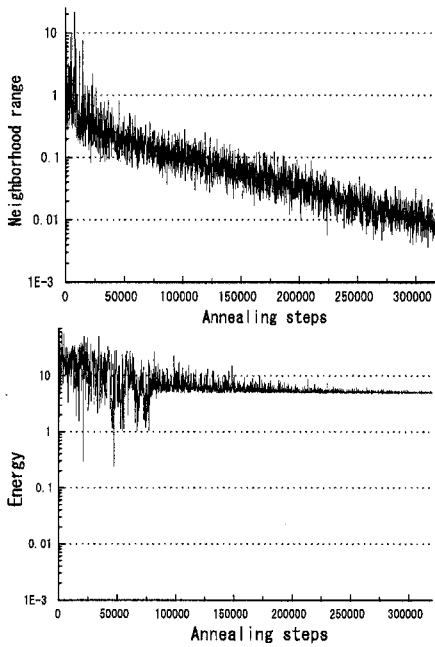


図 1: 近傍の範囲とエネルギーの履歴

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、このアルゴリズムを用いる。

$$\begin{cases} m' = m \times g(p) \\ g(p) = H_0(p'), & \text{if } p > p_1 \\ g(p) = 0.5, & \text{if } p < p_2 \\ g(p) = 1.0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} H_0 = H_0 \times H_1, \\ \text{(初期設定: } H_0 = 2.0) \\ H_1 = 2.0, & \text{if } p' > p_1 \\ H_1 = 0.5, & \text{if } p' < p_2 \\ H_1 = 1.0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

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。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。

2.3 実験結果および考察

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。用いたテスト関数は、Rastrigin

関数 [6]、Griewank 関数 [7]、Rosenbrock 関数 [7] である。それらの設計変数の数はそれぞれ 2 変数とした。用いたパラメータを表 1 に示す。なお、詳細なパラメータ設定法は文献 [5] を参照されたい。

表 1: Parameters

Function	Rastrigin	Griewank	Rosenbrock
Max.(Initial) temperature	10	20	1.0
Min.(Final) temperature	0.01	0.001	0.001
Markov Length	10000	30000	300
Cooling rate	0.8	0.726	0.81

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 2 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平均値で比較すると正しい評価にならないからである。

図 2 より、受率率を 0.5 に保つ従来の方法は、良好な精度を与えず、最適な受率率は 0.1 であることが分かる。

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

Rosenbrock 関数に関しては、Rastrigin 関数、Griewank 関数に比べると受率率を低くすることによる解の精度の向上は低いが、受率率を下げることでより精度が向上している。Rosenbrock 関数は他の関数に比べ、エネルギー関数に大きな山が少なく局初解から脱出しやすい特徴を持っている。そのため受率率による解の精度差が小さくなっていると考えられる。

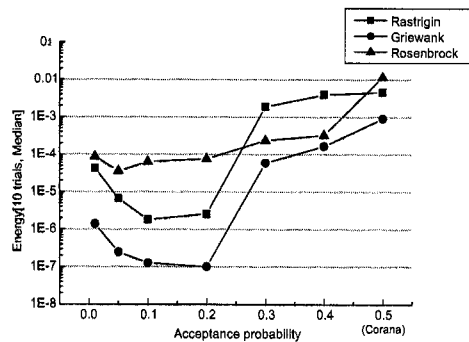


図 2: 受率確率と最小エネルギーの関係

3 離散的最適化問題

3.1 TSP に対するの最高温度

TSP を SA で解く場合の最高温度は、次の方法が一般的に用いられている。[8].

- 最高温度：最大の改悪となる状態遷移が 50% の確率で受理されるような温度

重要温度は、こうして決定される温度スケジュールの低温領域において存在していることが実験的に明らかとなった。しかしながら重要温度は問題に依存しており、各問題に適した重要温度を特定することは容易ではない。そこで本研究では、この重要温度を検知することによって最適最高温度を自動的に決定する ASA/MAXT のアルゴリズムを考える。

3.2 最高温度に関する適応的シミュレーテッド・アニーリング (ASA/MAXT)

ASA/MAXT のアルゴリズムの概要を図 3 に示す。

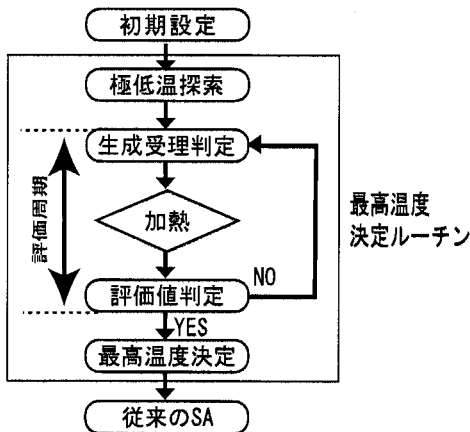


図 3: ASA/MAXT のアルゴリズム

この図よりわかるように、通常の SA を開始する前に極低温探索と、評価値を用いた重要温度探索という手順をもつ最高温度決定のルーチンが加わる。

- 極低温探索
初期解を生成後、極低温 (温度=0) で局所探索を行う。この操作により非常に早い段階で局所解に達する。局所解に到達後、通常の SA で用いていた最低温度から探索を行い、一定の割合で温度を上げていく。
- 評価値を用いた重要温度探索
極低温探索によって得られた局所解を評価基準値

とし、アニーリング中にその基準値を下回る値の受理に対して、評価基準値との差を評価値として加算する。重要温度付近では頻りに評価基準値を下回るため、評価値は高くなる。各温度で評価値を計算すると重要温度を挟んで図 4 のようになると考えられる。

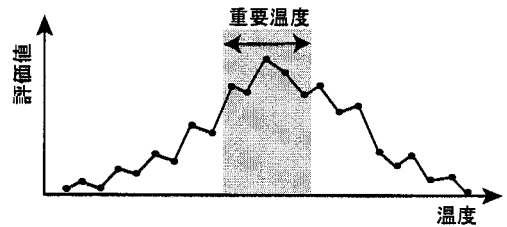


図 4: 評価値の推移

図 4 のような評価値の推移より、適切な最高温度を決定し、その最高温度から通常の SA を開始する。ASA/MAXT において加熱は重要温度を検知することが目的であるため、アニーリングステップ幅を狭くし、急速な加熱を行い、冷却は通常の SA の冷却率を用いる。ASA/MAXT の温度スケジュールと通常の SA の比較を図 5 に示す。

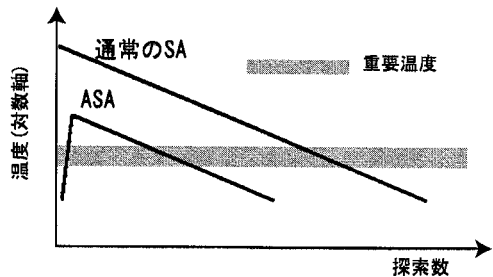


図 5: 温度スケジュール

ここでは最高温度の決定方法として以下の 2 つのタイプの実験を行い、SA の高速化を試みた。また対象問題は TSP のベンチマーク集である TSPLIB[9] を利用し、重要温度が既知である 3 つの TSP を取り上げた。

- ASA/MAXT-1: 評価値が完全に 0 になったときの温度を最高温度 (探索温度 1) とする。
- ASA/MAXT-2: 評価値の山の中で最も値が高い時の温度を最高温度 (探索温度 2) とする。

3.3 実験結果

実験では最適解が既知の3つのTSPに対しSAとASA/MAXT-1, ASA/MAXT-2を適用し,各手法で得られる最小経路長と,その最小経路長を得るまでの総探索数を比較した.パラメータは最高温以外は通常のSAと同一の値を用い,ASAにおける加熱率は通常のSAの(1/冷却率)を用いた.なお実験結果は20回試行の平均である.

表2は通常のSAの最高温度と,ASA/MAXTのアルゴリズムによって得た探索温度1,探索温度2,また実験により得られた重要温度を示している.また表3は各手法で得られた最小経路長と最適解を示している.

表 2: 最高温度と重要温度

手法	berlin52	pr152	lin318
SA	2350	23100	6620
ASA/MAXT-1	195	1124	185.5
ASA/MAXT-2	37.9	138	29.9
重要温度	44.8	131.5	23.8

表 3: 最小経路長と最適解

手法	berlin52	pr152	lin318
SA	7565	74122	42647
ASA/MAXT-1	7556	74133	42794
ASA/MAXT-2	7668	74698	43263
最適解	7542	73682	42029

次に最小経路長が得られるまでの総探索数の比較を図6に示す.図の縦軸は総探索数,横軸は各手法を示している.

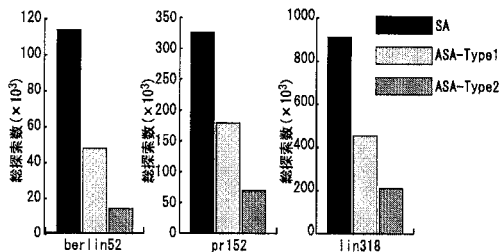


図 6: 総探索数

表3および図6よりASA/MAXT-1ではおよそ半分の探索数で,ほぼ同程度の解の精度を得ることが出来た.またASA/MAXT-2に関しては,解の精度は多少劣るが探索数は1/4以下という結果となった.解の精度が落ちた原因は,重要温度付近の探索が他の手

法より少なくなったためと考えられる.以上の結果より,従来の最高温度は必要以上に高温であり,高温部における探索は,ほとんど不必要であったことが明らかとなった.またSAにおいて解の性能を決定するのは重要温度付近のアニーリングであり,その重要温度より少し高い温度を最高温度とすると,不必要な探索をなくし効率の良い探索が行えることがわかる.

4 結論

シミュレーテッドアニーリングの高速化に関して,連続最適化問題と離散的最適化問題におけるアプローチの相違について述べ,それぞれの問題に対する適応化の新しい方法を提案した.連続最適化問題においては温度スケジュールより近傍範囲の適切な調節が重要であり,受理確率を0.1-0.2に設定する新しい方法を提案した.一方,離散的最適化問題に対しては近傍の大きさは解の摂動操作によって規定されるため,温度スケジュールが重要となる.この場合,重要な温度領域が存在し,それを見いだすことで温度スケジュールの適応化が可能となった.これらのアプローチにより,シミュレーテッドアニーリングは幅広い問題に対して適応的メカニズムを持ち,高速化が達成できた.

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] Mark F. Simulated Annealing With An Optimal Fixed Temperature. SIAM J. Optim., vol.11, No.2, pp.289-307,2000
- [5] 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 (2001)
- [6] 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).
- [7] Whitley, D., Mathias, K., Rana, S. and Dzubera, J.: Evaluating Evolutionary Algorithms, Artificial Intelligence, Vol. 85, pp. 245-276 (1996).
- [8] 小西健三, 瀧和男. 温度並列シミュレーテッド・アニーリング法の評価. 情報処理学会論文誌, vol.36, No4, pp.797-807,1995
- [9] TSPLIB, <http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/comopt/software/TSPLIB95/>