

適応的溫度調節機能を持つ 温度並列シミュレーテッドアニーリングプログラミング

松井勇樹^{†1} 三木光範^{†2} 廣安知之^{†3}

温度並列シミュレーテッドアニーリングプログラミング (TPSAP) は、適切な温度スケジュールを自動決定する有効な手法であり、並列数が十分大きい場合には、温度範囲を広くすることができ、温度範囲のチューニングは不要である。しかし、並列数が8程度の比較的少数の場合、温度範囲のチューニングが必要となる。本研究では、探索に有効な温度範囲を探索するメカニズムを持った適応的溫度調節機能を持つ温度並列シミュレーテッドアニーリングプログラミング (TPSAP/AT) を提案し、そして、代表的なベンチマーク問題である Santa Fe trail 問題、Simple Symbolic Regression 問題をこれらの手法に適用し、比較実験を行った。その結果、TPSAP/AT は温度範囲をチューニングした TPSAP より高性能であることを示した。

Temperature-Parallel Simulated Annealing Programming with Adaptive Temperature Range

YUKI MATSUI,^{†1} MITSUNORI MIKI^{†2}
and TOMOYUKI HIROYASU^{†3}

Temperature-Parallel Simulated Annealing Programming (TPSAP) is an effective method that decides an appropriate temperature schedule. The temperature range used in TPSAP is easy to be determined when the number of parallel processes is large enough. But, the tuning of the temperature range is necessary when the number of parallel processes is small, such as 8. We propose Temperature-Parallel Simulated Annealing Programming with Adaptive Temperature Range (TPSAP/AT) that has a mechanism searching an effective temperature range. We compared TPSAP/AT with TPSAP in Santa Fe trail and Simple Symbolic Regression problems which are benchmark problems. From this result, TPSAP/AT shows higher performance than TPSAP with the optimum temperature range.

1. はじめに

ロボットの行動を制御する行動規則や関数などのプログラムをコンピュータによって自動生成する研究が注目されている。これは、コンピュータを用いることにより、あらかじめ人が想定できない状況に対応できるプログラムを生成できることや、複数台のロボットが協調行動するような大規模・複雑なプログラムを容易に生成できるからである。

このようなプログラムをメタヒューリスティック手法を用いて自動生成する自動プログラミングの代表的な手法として、Koza により提案された遺伝的プログラミング (Genetic Programming: GP)¹⁾ がある。GP は遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA)²⁾ の遺伝子型を、木構造などの構造的表現が扱えるように拡張した手法であり、LISP の S 式のような木構造で記述できるプログラムを自動生成することが出来る。自動プログラミングにおける最適化問題として、ロボットの制御プログラム³⁾ や、株値予測⁴⁾、画像処理⁵⁾ など様々な分野に応用されているが、その際、用いられる探索手法として GP が一般的である。しかし、多くの最適化問題には、問題に適した探索手法が用いられることから、自動プログラミングにおいても、問題に応じて探索手法を使い分けることで、より効率的に最適化が行える可能性がある。

そこで GP の遺伝的オペレータである突然変異のみを用いた手法であるシミュレーテッドアニーリングプログラミング (Simulated Annealing Programming: SAP)⁶⁾ の研究が行われている。SAP は、シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA)⁷⁾ を拡張した手法であり、温度と呼ばれる制御パラメータにより改良方向だけでなく確率的に改悪方向へも遷移するメカニズムを持つ。そのため、SAP の探索性能は温度パラメータが大きく影響するため、探索に適した温度スケジュールの決定が重要となる。

温度スケジュールの決定に有効な手法の1つとして、著者らは複数の計算機を用いた温度並列 SAP (Temperature-Parallel SAP: TPSAP)⁸⁾ が提案した。温度並列 SA (Temperature-Parallel SA : TPSA)⁹⁾ では、特定の温度範囲での探索が性能に大きく影響を与える¹⁰⁾ ことから、TPSAP においても TPSA と同様に特定の温度範囲での探索が性能に大きな

†1 同志社大学大学院工学研究科

Graduate School of Engineering, Doshisha University

†2 同志社大学理工学部

Department of Science and Engineering, Doshisha University

†3 同志社大学生命医科学部

Department of Life and Medical Sciences, Doshisha University

影響を与えると考えられる。そこで、本研究では適応的溫度調節機能を持つ溫度並列 SA (Adaptive Temperature-Parallel SA : ATPSA)¹¹⁾ における探索に有効な溫度範囲を自律的に探索するメカニズムを TPSAP に組み込んだ適応的溫度調節機能を持つ TPSAP (Temperature-Parallel Simulated Annealing Programming with Adaptive Temperature Range : TPSAP/AT) を提案し、ベンチマーク問題に対してその有効性を示した。なお、本研究では木構造で表すことのできるプログラムを対象とする。

2. シミュレーテッドアニーリングプログラミング (SAP)

SAP⁶⁾ とは、金属の焼き鈍しを模倣した進化的最適化手法である SA を木構造が扱えるように拡張したプログラム探索手法であり、GP における突然変異をベースに探索を行う。

SAP は、GP の突然変異と同様に、現在の解から次解候補を生成する。そして、溫度と呼ばれる制御パラメータによって次解候補へ確率的に遷移することにより、局所解を持つ問題に対しても最適解を得ることが期待できる。以下に詳細を示す。

(1) 生成処理

現在の解に対してランダムに挿入点を選択し、挿入点を根とする部分木を削除する。その部分にランダムに生成した部分木を挿入し、新しく生成した次解候補の評価値を得る。

(2) 受理判定, 状態遷移

新しく生成した解候補を受理するか判定を行う。判定には、溫度 T および現在の解と新しい解候補の評価値の差分 ΔE を用いた Metropolis 基準 (式 (1)) を用いる。

$$P = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta E \leq 0 \\ \exp(-\frac{\Delta E}{T}) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

(3) クーリング

1 と 2 を繰り返して行うことをアニーリングと呼び、ある一定期間アニーリングを行った後に、式 (2) を用いて溫度を下げる。

$$T_{next} = \gamma T_{current} \quad (0.8 \leq \gamma < 1) \quad (2)$$

3. 対象問題

テスト問題は、自動プログラミングの代表的なベンチマーク問題である Santa Fe trail 問題¹⁾ および Simple Symbolic Regression 問題¹⁾ とする。Santa Fe trail 問題は解の評価に

影響を及ぼさないノードが発生する問題である。一方、Symbolic Regression 問題は全てのノードが解の評価に影響を及ぼす問題である。

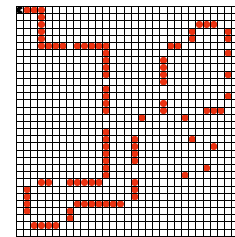


図 1 Santa Fe trail 問題
Fig. 1 Santa Fe trail problem

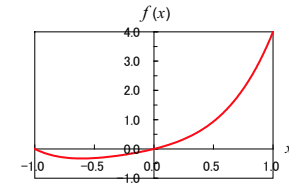


図 2 Simple Symbolic Regression 問題の
目的関数の概形
Fig. 2 The target function for the simple symbolic
regression problem

3.1 Santa Fe trail

Santa Fe trail 問題とは、1 匹の人工蟻が図 1 に示す 32×32 のマス目上に配置された餌を、限られたエネルギー内でできるだけ多く獲得するプログラムを生成する問題である。人工蟻は餌上を通ることにより餌を獲得することができ、終端記号が 1 つ実行されるごとにエネルギーは 1 消費する。人工蟻の初期エネルギーは 400 である。

この問題に用いる非終端記号は {if_food_ahead, progn2, progn3}, 終端記号は {MOVE, RIGHT, LEFT} とした。if_food_ahead は引数を 2 個持ち、人工蟻の 1 マス前方に餌があれば第 1 引数、無ければ第 2 引数を実行する。prognN は引数を N 個持ち、第 1 引数、第 2 引数、..., 第 N 引数の順に実行する。

評価関数 E_{val} 式 (3) は、餌の総数である $F_{max}(= 89)$ から人工蟻が獲得した餌の数 F を引いたものであり、すべてのエサを獲得すれば ($E_{val}=0$)、探索が成功したとする最小化問題である。

$$E_{val} = F_{max} - F \quad (3)$$

3.2 Simple Symbolic Regression

Simple Symbolic Regression とは、未知の関数 $y = f(x)$ に対して n 個の入出力データを用いて関数 f を同定する問題である。同定する目的関数は式 (4) に示す f_{obj} である。その概形を図 2 に示す。

$$f_{obj} = x^4 + x^3 + x^2 + x \quad (4)$$

この問題に用いる非終端記号は {+, -, *, %, sin, cos, exp, rlog}, 終端記号は {x} とした。なお、%は剰余、rlog は自然対数である。

評価関数 E_{val} は、-1 から 1 の間を 0.1 刻みにした 21 個の入力に対する出力誤差の和とし、 $E \leq 0.01$ を最適解とする最小化問題とした。ここで、 $prog$ は生成されたプログラムを示す。

$$E_{val} = \sum_{i=0}^{20} |prog(x_i) - f(x_i)| \quad (5)$$

$$x_i = 0.1i - 1 \quad (6)$$

4. 温度並列 SAP における特定の温度範囲での探索

温度並列 SA (TPSA) において、特定の温度範囲で探索を行うと良好な結果が得られると報告されている¹⁰⁾。そのことから、TPSA と同様の特徴を持つ TPSAP でも、特定の温度範囲での探索を行うことで、良好な結果が得られると考えられる。そこで、TPSAP において、特定の温度範囲での探索について検証を行う。

4.1 温度並列 SAP (TPSAP)

TPSAP⁸⁾ とは、適切な温度スケジュールの決定に有効な手法である温度を並列化して計算を行う TPSA を SAP に適応した手法である。TPSAP は、複数のプロセスに異なる温度を与え、各プロセスは一定温度で並列に探索を行い、一定の間隔で隣接するプロセス間の解の交換を確率的に行う。

4.2 特定の温度範囲での探索

TPSAP において、特定の温度範囲での探索が性能に与える影響についての検証を行う。対象問題は、Santa Fe trail 問題および Simple Symbolic Regression 問題とする。評価計算回数は、Santa Fe trail 問題が 20 万回、Simple Symbolic Regression 問題が 10 万回とし、両問題共に用いる温度数（並列数）は 8、解交換周期は 40⁸⁾ とする。また、用いる最高・最低温度の温度範囲を表 1 に示す。

表 1 における最高・最低温度の温度範囲についての特徴を以下に述べる。

- typeA : SAP の探索において、一般的な温度範囲の決定方法で求めた最高・最低温度。（最高温度：解交換周期の 50% は最大改悪を認める温度，最小温度：解交換周期の 1 回は最小改悪を認める温度）
- typeB : 温度範囲が十分に広がる最高・最低温度。（ここでは、8 桁の温度範囲とした。）
- typeC : 重要温度領域を中心に $10^{-1}(= 0.1)$ の温度範囲を設定した最高・最低温度。
- typeD : 重要温度領域を中心に $10^0(= 1.0)$ の温度範囲を設定した最高・最低温度。

表 1 特定の温度範囲

Table 1 Specific Temperature Range

(a) Santa Fe trail			(b) Simple Symbolic Regression		
type	T_{max}	T_{min}	type	T_{max}	T_{min}
typeA	128.0	0.280	typeA	1579	0.008
typeB	10^4	10^{-4}	typeB	10^4	10^{-4}
typeC	4.050	3.950	typeC	0.552	0.452
typeD	4.531	3.531	typeD	1.207	0.207
typeE	11.403	1.403	typeE	10.024	0.024

- typeE : 重要温度領域を中心に $10^1(= 10)$ の温度範囲を設定した最高・最低温度。

なお、重要温度領域とは一定温度の探索において、最も良好な解を生成する温度であり、Santa Fe trail 問題では 4.0、Simple Symbolic Regression 問題では 0.5 がそれにあたる⁶⁾。また、最高・最低温度を温度数 8 で等比的に分割した際の、中点が重要温度領域となる。

Santa Fe trail 問題および Simple Symbolic Regression 問題において、各条件に対し、30 試行した時に得られた成功率を図 3 に示す。なお、図 3 は、横軸に温度範囲のタイプ、縦軸に成功率を示す。

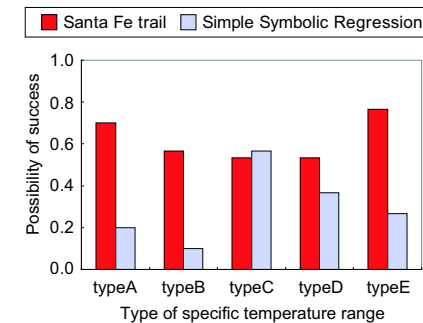


図 3 特定の温度範囲での探索

Fig. 3 Search of Specific Temperature Range

図 3 より、Santa Fe trail 問題は typeE、Simple Symbolic Regression 問題は typeC が最も良好な結果が得られた。これにより、一般的な温度設定である typeA や温度範囲が広範囲である typeB と比べ、重要温度領域を中心とした温度範囲の設定の方が良好な結果を

得られることがわかった。また、重要温度領域を中心とした温度範囲の設定の中でも、対象問題によって適切な温度範囲があることがわかった。

5. 適応的溫度調節機能を持つ TPSAP (TPSAP/AT)

前章より、TPSAP において特定の温度範囲での探索は、性能に大きく影響を与えることがわかった。しかし、特定の温度範囲の探索は、重要温度領域の発見および温度範囲の決定を行う必要があることから、予備実験や人間の経験的判断が要求されるという問題点がある。そのため、TPSAP において、探索中に適応的に特定の温度範囲を調節することで、更なる性能の向上が見込める。以上のことより、探索に有効な温度範囲を自律的に探索するメカニズムを組み込んだ適応的溫度調節機能を持つ温度並列シミュレーテッドアニーリングプログラミング (Temperature-Parallel Simulated Annealing Programming with Adaptive Temperature Range : TPSAP/AT) を提案する。

TPSAP/AT は、解の評価値とは別に、重要温度指数という値を用いることにより、重要温度領域を探索するメカニズムを持つ。以下に TPSAP/AT について詳細を示す。

(1) 初期設定

各プロセスに異なる温度を設定する。各温度は、最高温度と最低温度および最高温度と最低温度の間を使用するプロセス数で等比的に分割した温度とする。

(2) 温度を固定した SAP (生成処理, 受理判定, 状態遷移)

各プロセスが、与えられた温度を基に一定温度を温度スケジュールとした SAP で解の探索を行う。なお、SAP の解の探索は 2 章で示した生成処理, 受理判定, 状態遷移と同様の処理を行う。

(3) 重要温度指数の計算

重要温度指数 (Index) とは解の評価値とは別に、解探索による解の動きを評価する値である。全プロセスに同一の基準値 (Baseline) を設定し、各プロセスごとに受理された解が基準値より良好なエネルギーで遷移した場合、解の評価値と基準値の差を一定周期 (解交換周期) の間加算して値を算出する。重要温度指数の計算式を式 (7)¹¹⁾ に示す。ここで、 n は同期周期を表す。

$$Index = \sum_{k=1}^n (Baseline - Energy_k) \quad (7)$$

なお、基準値の値は同期周期毎に全プロセスの評価値の平均値を用いる。

(4) 交換判定, 解交換

アニーリングを一定周期 (解交換周期 k) まで繰り返した後、解の交換を行う。隣接するプロセスが持つ解の評価値 E と E' との差分 ΔE および隣接するプロセスが持つ温度 T と T' との差分 ΔT により、プロセス間で解交換を行うかどうかの判定を行う。交換判定には、式 (8)^{8),9)} を用いる。

$$P(\Delta T, \Delta E) = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta T \cdot \Delta E \leq 0 \\ \exp(-\frac{\Delta T \cdot \Delta E}{T \cdot T'}) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (8)$$

(5) 次周期の温度割り当て

次周期の最高・最低温度は、基準点および温度分布率から求める。以下に詳細を示す。

STEP1 基準点の温度遷移

基準点 (Basepoint) とは、最高・最低温度を等比的に分割した際の中点である。次周期の基準点は、重要温度指数を基に式 (9) を用いて算出する。なお、 γ はクーリング率とする。

$$Basepoint_{k+1} = \begin{cases} Basepoint_k & \text{if } fitness > 0 \\ Basepoint_k \times (1.0/\gamma) & \text{else if } fitness = 0 \\ Basepoint_k \times \gamma & \text{otherwise} \end{cases} \quad (9)$$

STEP2 温度分布率

温度分布率とは、最高・最低温度をプロセス数で等比的に分割できる割合である。次周期の温度分布率には、式 (10) を用いる。ここで、 R は温度分布率 ($0 < R < 1.0$)、 p はプロセス数を表す。

$$R_{k+1} = \begin{cases} (\frac{-1.0 + \sqrt{5.0}}{2.0})^{\frac{2}{p}} & \text{if } \Delta T \leq Basepoint \times 1.0 \\ R_k \times (1.0/\gamma) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

なお、温度分布率は値が大きいくほど最高・最低温度の差が小さくなる。また、最高・最低温度の最小温度差は Basepoint の温度の 1.0 倍とする。

以上により、式 (11) を用いて最高・最低温度を求める。

$$\begin{cases} \max T_{k+1} = Basepoint \times (1.0/R)^{\frac{(p-1)}{2}} \\ \min T_{k+1} = Basepoint \times R^{\frac{(p-1)}{2}} \end{cases} \quad (11)$$

6. 数値実験

6.1 実験概要

提案手法の有効性を検証するために、提案手法である TPSAP/AT および TPSAP を 3 章の各問題に適用し、比較実験を行う。評価計算回数は、Santa Fe trail 問題が 20 万回、Simple Symbolic Regression 問題が 10 万回とし、両問題共に用いる温度数は 8、解交換周期は 40^8 とする。また、TPSAP/AT に用いられるクーリング数は 32 とした。

表 2 に各手法に用いた温度パラメータを示す。なお、TPSAP/AT、TPSAP1 に用いる温度は一般的な温度設定、TPSAP2 は 4.2 節より、最も良い性能を示した温度設定とする。

表 2 温度パラメータ
Table 2 Temperature parameter

(a) Santa Fe trail			(b) Simple Symbolic Regression		
name	T_{max}	T_{min}	name	T_{max}	T_{min}
TPSAP/AT	128.0	0.280	TPSAP/AT	1579.0	0.008
TPSAP1	128.0	0.280	TPSAP1	1579.0	0.008
TPSAP2	10.024	0.024	TPSAP2	0.552	0.452

6.2 実験結果

Santa Fe trail 問題および Simple Symbolic Regression 問題において、各手法を 30 試行を行った時の成功率の履歴を図 4 に示す。なお、図 4 は、横軸に探索回数 (= 評価計算回数 / 温度数)、縦軸に成功率を示す。ただし、各手法における最良値は、全プロセス中の探索において得た最も良好な解の評価値とする。

図 4(a) より、Santa Fe trail 問題では TPSAP/AT が TPSAP1 (従来の温度設定をした TPSAP) より 2 割程度、また、TPSAP2 (温度範囲をチューニングした TPSAP) より 1 割程度の性能向上をすることがわかった。一方、図 4(b) より、Simple Symbolic Regression 問題では TPSAP/AT が TPSAP1 より 4 割程度、また、TPSAP2 より 1 割程度の性能向上をすることがわかった。以上のことから、Santa Fe trail 問題および Simple Symbolic Regression 問題の両問題に対して TPSAP/AT は従来の温度設定をした TPSAP および温度範囲のチューニングを行った TPSAP と比べ、高い性能が得られることがわかった。

6.3 考察

図 4 より、TPSAP/AT は温度範囲のチューニングを行った TPSAP より高性能である

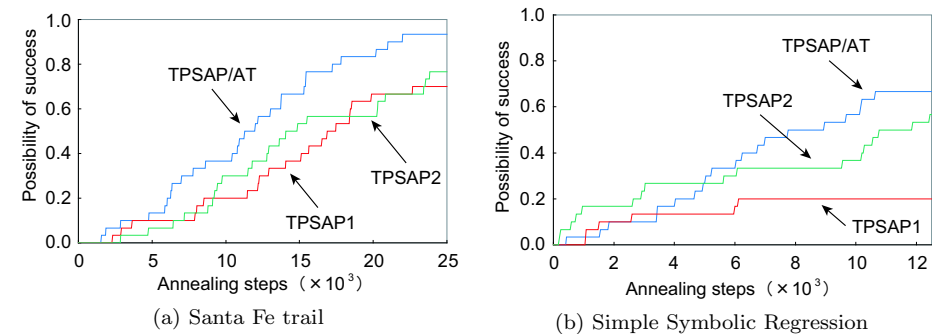


図 4 探索成功率
Fig. 4 Possibility of success

ことがわかった。これは、TPSAP/AT が探索に有効な温度範囲だけではなく、それ以外の温度にも適応的に温度調節することで、より効率的な探索が行われているためと考える。そこで、以下に最適解の温度遷移について考察を行う。Santa Fe trail 問題および Simple Symbolic Regression 問題において、TPSAP/AT、TPSAP1、TPSAP2 のある試行で得た最適解の温度の遷移履歴を図 5、図 6 に示す。なお、図 5 および図 6 は、横軸に探索回数、縦軸に温度を示す。

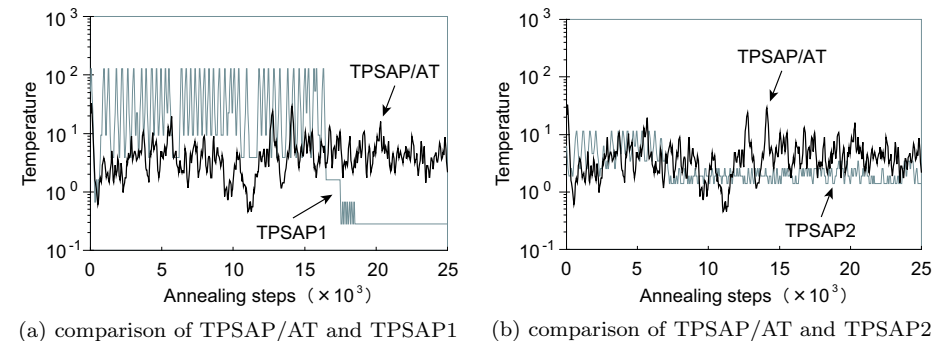
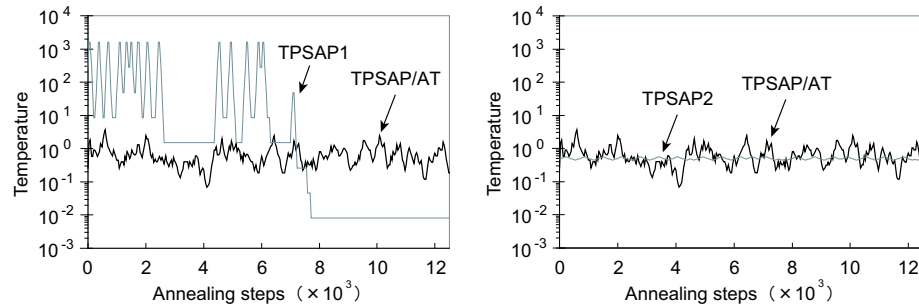


図 5 最良解の遷移履歴 (Santa Fe trail)
Fig. 5 Transition history of the best solution (Santa Fe trail)



(a) comparison of TPSAP/AT and TPSAP1 (b) comparison of TPSAP/AT and TPSAP2

図6 最良解の遷移履歴 (Simple Symbolic Regression)
Fig.6 Transition history of the best solution(Simple Symbolic Regression)

図5-(b)より、TPSAP/ATは温度範囲をチューニングしたTPSAP (TPSAP2)と同様の温度範囲を遷移していることがわかる。また、図5-(a)より、TPSAP/ATは探索に有効な温度範囲以外にも遷移しているが、一般的な温度設定であるTPSAP (TPSAP1)ほど高温・低温には遷移していないことから、温度範囲を適応的に調節することで、効率的に探索が行われている。また、図6-(b)より、Santa Fe trail問題に比べ、探索に有効な温度範囲が非常に狭いことから、TPSAP/ATは探索に有効な温度範囲を重点的に探索はできていない。しかし、図6-(a)より、一般的な温度設定である高温・低温の温度範囲より、TPSAP/ATが遷移している温度範囲は十分に狭く、適当な温度範囲を調節していると言える。

以上のことから、TPSAP/ATは探索に有効な温度範囲を重点的に探索するが、それ以外の温度にも遷移することによって、効率的な探索が行われている。そのため、TPSAP/ATにおける温度スケジュールの決定は非常に有効であると言える。

7. まとめ

本研究では、温度並列シミュレーテッドアニーリングプログラミング (TPSAP) において、探索に有効な温度範囲を探索するメカニズムを組み込んだ適応的温度調節機能を持つ温度並列シミュレーテッドアニーリングプログラミング (TPSAP/AT) を提案した。TPSAP/ATは解の評価値とは別に重要温度指数という値を用いることで、重要温度領域を探索するメカニズムを持つ手法である。TPSAP/ATと探索に有効な温度範囲を用いたTPSAPをベンチマーク問題で比較した結果、TPSAP/ATの方が良好な結果を得られることがわかった。

これは、TPSAP/ATが探索に有効な温度範囲だけでなく、それ以外の温度にも遷移することによって効率的に探索が行えているためである。

参考文献

- 1) JohnR. Koza. *Genetic Programming: On the Programming of Computers by Means of Natural Selection*. MIT Press, 1992.
- 2) David E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley Professional, January 1989.
- 3) Peter Nordin and Wolfgang Banzhaf. Genetic programming controlling a miniature robot. In E.V. Siegel and J.R. Koza, editors, *Working Notes for the AAAI Symposium on Genetic Programming*, pp. 61–67, MIT, Cambridge, MA, USA, 10–12 November 1995. AAAI.
- 4) Hitoshi Iba and Nikolay Nikolaev. Genetic programming polynomial models of financial data series. In *Proceedings of the 2000 Congress on Evolutionary Computation CEC00*, pp. 1459–1466, La Jolla Marriott Hotel La Jolla, California, USA, 6–9 July 2000. IEEE Press.
- 5) Jason M. Daida, Tommaso F. Bersano-Begey, Steven J. Ross, and John F. Vesecky. Computer-assisted design of image classification algorithms: Dynamic and static fitness evaluations in a scaffolded genetic programming environment. In John R. Koza, David E. Goldberg, David B. Fogel, and Rick L. Riolo, editors, *Genetic Programming 1996: Proceedings of the First Annual Conference*, pp. 279–284, Stanford University, CA, USA, 28–31 July 1996. MIT Press.
- 6) 藤田佳久, 三木光範, 橋本雅文, 廣安知之. シミュレーテッドアニーリングを用いた自動プログラミング. 情報処理学会論文誌, Vol.48, No. SIG15, pp. 88–102, 2007.
- 7) Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M., Teller, A., Teller, E. Equation of state calculation by fast computing machines. *Journ. of Chemical Physics*, Vol.21, pp. 1087–1092, 1953.
- 8) 三木光範, 廣安知之, 小畑拓也. シミュレーテッドアニーリングプログラミングの温度並列化. 情報処理学会全国大会講演論文集, Vol. 70th, No.1, pp. 1.269–1.270, 2008.
- 9) 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, Vol.36, No.4, pp. 797–807, 1995.
- 10) 三木光範, 廣安知之, 窪田耕明. 温度並列シミュレーテッドアニーリングの巡回セールスマン問題への適用と温度設定に関する考察. 同志社大学理工学研究報告, Vol.41, No.4, pp. 233–242, 2001.
- 11) 三木光範, 廣安知之, 輪湖純也, 吉田武史. 適応的温度調節機能を持つ温度並列シミュレーテッドアニーリング. 情報処理学会全国大会講演論文集, Vol.65, No.1, pp. 1.275–1.276, 2003.