

## 連続最適化問題に対するコーシー分布型 SA によるアプローチ

川田 泰章<sup>†</sup> 加地 太一<sup>†</sup>

<sup>†</sup> 小樽商科大学

本研究では目的関数が複雑で多峰性を伴う連続最適化問題を解くための手法として、Simulated Annealing(SA) のアルゴリズムに基づいた手法について検討する。まず、解移動に用いる近傍に解探索における集中化と多様化双方の特徴を持つコーシー分布を適用し探索能力の向上を図る。また、SA の持つ解の収束性の悪さを powell 法を用いることで改善を試みる。さらにその冷却スケジュールについて組合せ最適化問題に用いられるパラメータの理論的な設定方法を基に調整を行う。結果、提案手法は高い探索能力を持ち、かつ良い解への速い収束を可能とするものどできた。また、ここで用いたパラメータの設定方法は連続最適化問題においても探索に有効なパラメータ値を導くものであった。

## The Approach for Optimization Problems with Continuous Variables Using Simulated Annealing with Cauchy Neighborhood Structure

KAWATA Yasuaki<sup>†</sup> KAJI Taichi<sup>†</sup>

<sup>†</sup> Otaru University of Commerce

This paper introduces an approach to solve optimization problems which has the solution spaces with continuous variables. In this approach, a method based on Simulated Annealing(SA) algorithm is proposed. Originally, SA was applied to combinatorial optimization problems. But SA is efficient for optimization problems with continuous variables in current study. This method has a neighborhood structure which is applied cauchy distribution, and has a process of execution called "powell" to lead the fast convergence to optimal solution. As the feature of this method, Cauchy distribution leads effective ability for searching solution. And also this method can give well solutions using by powell.

### 1 はじめに

組合せ最適化問題に対してメタヒューリスティクスの種々の手法が近年研究されており、このメタヒューリスティクスの代表的な手法に焼きなまし法 (SA: Simulated Annealing) [1] がある。本来、SA はこの組合せ最適化問題に対して有効な手法であるが、連続最適化問題においても目的関数の多峰性が極めて高く、複雑な挙動を示す問題となる場合には有効とされ、連続最適化問題に対する多くの研究がおこなわれている。三木らはこの多峰性の連続最適化問題に受理確率に応じて近傍の幅を調整する手法である SA/AAN を用いることで、良好な解が得

られることを示している [2]。三木らの手法を用いていくつかのベンチマーク問題を解いたところ、三木らが実験対象としている問題では精度の高い解を得ることができたが、ある一部の問題において三木らの手法では最適解付近に到達できない問題もあることがわかった。そこで、このような難しい問題をも解くことを可能とし、より探索能力の高い手法について検討していきたい。

連続最適化問題に対する手法の一つに探索の高速化をはかった手法として Szu らが提案した FastSA (Fast Simulated Annealing) [3] がある。FastSA では従来の SA よりも短時間で探索を行い、従来の SA と同等の解が得られることが示されており、

この高速化を実現する要因として近傍にコーシー分布が用いられている。このコーシー分布はその分布の形状から、分布の中心に高い確率で次状態が提案されることで解空間を局所的に探索でき、またその裾の広さからロングジャンプによる広い探索をも可能とする特徴がある。この特徴は、解の探索における集中化と多様化[4]を取り込んだ高い探索能力を秘めているものと考えられる。コーシー分布に従った近傍を用いた手法(コーシー分布型 SA) の持つ探索能力を明らかにしていきたい。また、SA は精度の高い解への収束に膨大な時間を要するという問題があるため、powell 法[5] という凸関数を最小化する手法との組み合わせによる改善でより良い解への早い収束を試みる。しかし、SA の能力を発揮するためには冷却スケジュールを決める適切なパラメータを設定しなければならず、これは対象問題ごとに有効なパラメータを多くの数値実験から求める必要があり困難を伴うものである。さらに、本研究では組合せ最適化問題で用いられるパラメータの理論的な設定方法を元にコーシー分布型 SA の冷却スケジュールの調整を試みたい。

## 2 連続最適化問題

最適化問題の一つとして設計変数が連続である連続最適化問題がある。連続最適化問題の最も単純なケースは単峰の凸関数の最小化であり、このような問題にはある解における勾配情報などを利用して最小化を行うことができる。しかし、現実において直面する問題はその目的関数が多峰性で複雑な場合があり、勾配情報だけでは最適解を得ることがとても困難なものである。本研究で対象とするのはこのような複雑な問題であり、このような問題に対して多くの研究がおこなわれている。例えば、タンパク質の構造分析や画像、音声などの信号処理にたいする SA の適用が行われている。本研究ではこの連続最適化問題に対して有効なアルゴリズムの開発を目標とし、対象問題として次に示す 2 つのベンチマーク関数の最小化問題を扱うこととする。

### (1) Alpine 関数

Alpine 関数は以下の式で表される。

$$f_A(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n |x_i \sin x_i + 0.1 x_i| \quad (1)$$

また、最適解および最適値は以下の通りである。

$$\begin{aligned} \text{最適解: } \mathbf{x}^* &= (0, 0, \dots, 0) \\ \text{最適値: } f_A(\mathbf{x}^*) &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

ただし、本研究では  $n = 2$  とする。

### (2) Rastrigin 関数

Rastrigin 関数は以下の式で表される。

$$f_R(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n [x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i) + 10] \quad (3)$$

また、最適解および最適値は以下の通りである。

$$\begin{aligned} \text{最適解: } \mathbf{x}^* &= (0, 0, \dots, 0) \\ \text{最適値: } f_R(\mathbf{x}^*) &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

ただし、本研究では  $n = 2$  とする。

## 3 SA/AAN

連続最適化問題に対する手法として三木らは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: Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood) [2] を提案している。これは、解摂動における解の受理率が目標とする解の受理率になるように近傍の幅を調節するメカニズムを取り入れた手法である。

SA での解探索において、探索序盤で近傍の幅が過小のときは、その温度の高さとコスト変化の小ささから受理率が 0.5 以上と大きくなり、改善と改悪の比率がほぼ等しくなる。また、探索終盤で近傍の幅が過大のときはコストの変化が大きく解の改善となる機会が少なくなり受理率が低くなる。三木らはこのような探索における近傍の幅と受理率の変化に着目し、目標となる受理率によって近傍幅を自動的に調整するアルゴリズムを構築している。このアルゴリズムは探索を 3 段階に分けて行い、目標とする解の受理率を達成する近傍を生成する。まず、探索の一段階目では近傍調整が corana が提案した受理率を 0.5 となるよう近傍の幅を調整するアルゴリズムで行われる。探索の序盤では温度が高いため 0.2 という低い受理率を達成することは困難である。そのため、まずは受理率 0.5 となるよう近傍を調整し、温度を下げるのである。次に、受理率が 0.5 を達成した後から探索の二段階

目が行われる。二段階目では、受率率0.5を達成した近傍幅に近傍を固定し探索を行う。SAにおいては固定された近傍のまま探索を続けることで自ずと受率率が下がるという特徴があるため、ここでは固定された近傍によって受率率が0.2と下がるまで探索を行うのである。この二段階目を終えたとき、受率率を0.2に保ちながら探索を行える状態となる。そして、三段階目で解の受率率が0.2となるよう近傍の調整を行う。なお、三木らは最終的に解の受率率を0.2程度に保ち探索を行うとき、精度の高い解が得られるとしている。

このようにSA/AANでは解摂動の受率率をもとに近傍の幅を調節して解摂動を行う。受率率が目標とする受率率よりも大きければ近傍の幅を大きくし、小さければ近傍の幅を小さくするように調節される。また、近傍の拡大幅も受率率によって調整する仕組みを持ち、この仕組みによって問題に応じて適応的に近傍幅を調整できるとしている。このように、問題と解の受率率の状況によって近傍幅を適応的に自動調節できること、そしてこれによって精度の高い解が得られることにSA/AANの大きな特徴がある。

本研究では、このSA/AANを用いて上述ベンチマーク問題を解いてみた。その結果、三木らの示したRastrigin関数において精度の高い解の値を得ることができ、その解も最適解付近へと到達していた。しかし、Alpine関数では最適解付近へ全く到達できていないことがわかった。

#### 4 コーシー分布型SA

SA/AANではAlpine関数において最適解付近へと全く到達できないという問題があった。また、SA/AANの受率率を調整するという操作は、本来のSAの特徴、すなわち温度を下げながら探索が進むにつれて受率率が減少し、それと共に解が最適解へと収束するというSAの特徴とは異なるものである。そこで、SAの特徴的な冷却スケジューリングを活かした純粋なSAでアルゴリズムを構築し、かつ近傍構造を工夫することによってこの問題を解決できるようなアルゴリズムの構築を行いたい。このSAのアルゴリズムの全体を図1に示す。SAのアルゴリズムではまず、初期解および制御パラメータである温度、初期温度における解移動の反復数の初期設定を行う。ここで、アルゴリズム1行目の $x$ が現在の解、 $Opt$ は探索における最も良い解を保持した暫定解を示し、 $T$ は現在の温度、 $R$ は図の3行目におけるループの反復回数すなわち各温度において定められた解移動の反復数である。

```

1:  $x :=$  初期解;  $Opt :=$  初期解;  $T := T_{init}$ ;
    $R := R_{init}$ ;
2: while 終了基準 do begin
3:   for  $i := 1$  to  $R$  do begin
4:      $y :=$  ランダムに選ばれた解 in  $N(x)$ 
5:      $\Delta = f(y) - f(x)$ ;
6:     if  $\Delta \leq 0$  then
7:        $x = y$ ;
8:       if  $f(y) < f(Opt)$  then  $Opt = y$ ;
9:     else
10:      if  $exp(-\frac{\Delta}{T}) \geq \text{random}[0,1)$ 
        then  $x := y$ ;
11:    end;
12:     $T := T * \text{phi}$ ;
13:     $R := R * \text{tau}$ ;
14:  end;
15: return  $Opt$ ;

```

図 1: SA のアルゴリズム

そこで $R$ 回だけ解 $y$ を提案することを繰り返し、解 $x$ を受率基準に従って更新する。終了基準は温度がある低い温度以下になることや、提案される解の受率率が小さくなることなどを基準として設定される。また、4行目の解 $y$ は $x$ の近傍 $N(x)$ からランダムに選ばれた解の次状態であり、提案解 $y$ のコスト $f(y)$ と解 $x$ のコスト $f(x)$ からコスト差 $\Delta$ が求められる。なお、近傍 $N(x)$ とは現在の解 $x$ に対して何らかの微動を与えることによって得られる解 $x$ の次状態の集合である。 $R$ 回の反復を終えると、温度 $T$ と反復数 $R$ を更新する。これは12行目、13行目に示されるようにそれぞれ、温度 $T$ に減少率 $\text{phi}$ を乗じること、反復数 $R$ に増加率 $\text{tau}$ を乗じることで行われる。最後に、終了基準を満たした後、8行目に示される探索において得られた最も良い解を保持した暫定解 $Opt$ を出力し探索を終える。この $Opt$ がSAによってもとめられた近似解である。

ここで、SAにおける解の受率基準は解コストが改善される場合は必ず次状態へ移動し、改悪される場合でも温度が高い状態またはコスト差が小さい状態であれば移動を許容することを示しており、SAは解移動にコスト差と温度が深く関与した仕組みを持っていることがわかる。このように、SAを適用したアルゴリズムの構築において、次状態を決める近傍の構造および冷却スケジュールを決める4つ( $T_{init}$ ,  $R_{init}$ ,  $\text{phi}$ ,  $\text{tau}$ )のパラメータ、終了基準の設定が必要となり、これらの設定が良いアルゴリズムの構築に重要なファクターとなってくる。

次に本研究で扱う近傍について考察した

い。まず近傍の構築に際して、集中化と多様化という二つの概念 [4] について述べる。SA のようなメタ戦略の多くは、「良い解どうしは似通った構造を持っている」という概念に基づいて設計されており、この概念が成立しているならば良い解に似た解の中により良い解が存在するという考え方がある。集中化とは、この考えにのっとり良い解を得たときその解と似た構造の解を重点的に局所的な探索を行い、良い解を得ようとする考え方である。しかし、解空間には最適解に近い値をとる局所解が存在するため、誤って局所解の周辺を積極的に探索してしまい最適解を得ることができないという危険もある。また、同じ解を何度も参照してしまうという危険もある。これに対して、探索の中で既に得られた解とは違う構造の解を参照するなどして、解空間を広く探索することで局所解に陥らないようにしようとする考え方が多様化である。最適化におけるアルゴリズムでは、その探索が集中化または多様化のどちらにそったものとなるかは次状態を生成する近傍の構造によって左右される。そのため、集中化と多様化を実現できる近傍の構造を構成することが重要となる。

本研究で扱う連続最適化問題の近傍構造は、一般に現在の解に対して何らかの確率分布に従った乱数を発生させることによって次状態を生成するといった手法がとられる。従来の SA が対象としていた組合せ最適化問題では、例えば巡回セールスマン問題に対する SA の解の近傍は、解を構成する隣接する都市を入れ替えることや、二つの都市の間に別のある都市を挿入するといったことで操作的に近傍を構成することができる。しかし、連続最適化問題は解の設計変数が連続なため隣接する要素を入れ替えるといった操作的な近傍構造の構成を行うことができない。そのため、近傍の構造はユークリッド空間内での距離に関係した近傍の範囲を設定することによって構成される。

はじめに基本的な近傍の構造として一様分布と正規分布があげられる。まず、一様分布は与えられた範囲  $[a, b]$  における値の生起確率がすべて等しい分布である。次に、正規分布に基づく近傍を考えたい。正規分布は次の確率密度関数をもつ確率分布である。

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (5)$$

ここで  $\mu$  は平均であり、 $\sigma$  は標準偏差である。正規分布の形状は釣り鐘状をしており、平均  $\mu$  の直線を境に左右対称の形状をして

いる。通常、組合せ最適化問題の近傍はこの正規分布の形をとるものと考えられている。しかし、一様分布を含め、正規分布に従った近傍は連続最適化問題では探索能力に限界があるという結果を得ている。そこでより探索能力に優れた近傍を考えたい。高速化を取り入れた近傍としてコーシー分布を用いることを考えた Szu らの FastSA (Fast Simulated Annealing) [3] がある。FastSA は SA の時間の高速化を図った手法である。通常、SA の冷却スケジュールは温度減少が次の式でなされるとき最適解への収束が保証されている。ここで、 $T(t)$  は温度の  $t$  番目の温度、 $T_0$  は初期温度を表す。

$$T(t) = \frac{T_0}{\log(1+t)} \quad (6)$$

しかし、このスケジューリングでは膨大な計算時間が必要であり実用的ではない。これを FastSA では次の式に示される温度減少で冷却を行い、時間の高速化を計っている。

$$T(t) = \frac{T_0}{1+t} \quad (7)$$

この時間の高速化を実現している要因のひとつがコーシー分布による近傍である。このコーシー分布は次の確率密度関数を持つものである。

$$f(x; x_0, \gamma) = \frac{1}{\pi\gamma \left[1 + \left(\frac{x-x_0}{\gamma}\right)^2\right]} \quad (8)$$

ここで  $x_0$  は分布の最頻値を与える位置母数、 $\gamma$  は半値半幅を与える尺度母数である。また、コーシー分布は期待値や分散が定義されない性質がある。コーシー分布の概観を正規分布の概観とともに図 2 に示す。そのコーシー分布の形状は、分布の頂点が鋭く、また分布の両裾が正規分布に比べ長く広がっている。すなわち、最頻値  $x_0$  付近の値の生起確率が高く、また、両裾の値の生起確率が 0 に近づきにくいという特徴がある。したがって、分布の中心である最頻値付近に高い確率で次状態が提案されることで解空間を局所的に探索できるという集中化に従った特徴、また、その裾の広さからロングジャンプを可能として大域的にも探索できるという多様化に従った特徴を持つ探索能力が期待できる。

そして、コーシー分布に従った近傍を構築するには、最頻値  $x_0$  に現在の解  $x$  を設定し、 $\gamma=1$  として、 $x$  を中心にコーシー分布

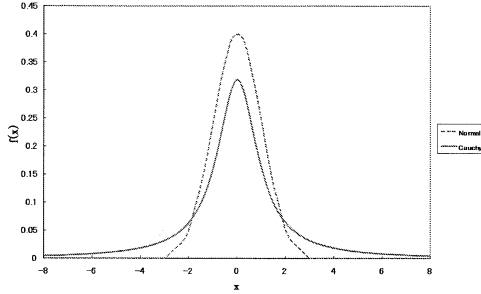


図 2: コーシー分布の概観

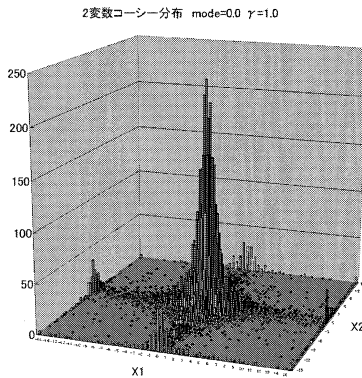


図 3: 2変数のコーシー分布の概観

に従った乱数を発生させることで生成することとした。また、2変数のベンチマーク関数に対応させた近傍は、解を  $(x_1, x_2)$  と表した時、その要素  $x_1, x_2$  のそれぞれを中心  $x_0$  に設定し独立に乱数を発生させ、 $x'_1, x'_2$  を生成し、近傍  $(x'_1, x'_2)$  とする。また、 $x_1, x_2$  どちらに対しても  $\gamma$  に同じ値を与えている。この場合の乱数のヒストグラムをコーシー分布に従った近傍の概観として図3に示す。

このコーシー分布の特徴が FastSA で示された時間の高速化のみならず、探索能力の向上を図る戦略をとるものとして、本研究では近傍にコーシー分布を扱うこととした。以降、コーシー分布を近傍に適用した SA をコーシー分布型 SA と呼ぶこととする。コーシー分布型 SA は SA の冷却スケジューリングに基づき、最適解付近へと到達できる可能性を持つアルゴリズムとして構築した。しかし、従来から SA による探索では近傍の範囲からランダムに次状態を選択する

- 1: 方向集合  $u_i$  を基底ベクトルに初期化。  
以下のステップを関数が減少しなくなるまで繰り返す。
- 2: 出発点を  $P_0$  に設定。
- 3:  $i = 1, \dots, N$  について、 $P_{i-1}$  を方向  $u_i$  に沿った最小に移動し、その点を  $P_i$  と置く。
- 4:  $i = 1, \dots, N$  について、 $u_i \leftarrow u_{i+1}$  と置く。
- 5:  $u_N \leftarrow P_N - P_0$  と置く。
- 6:  $P_N$  を方向  $u_N$  に沿った最小に移動し、その点を  $P_0$  と置く。

図 4: powell 法の基本手続き

ために解の収束には膨大な時間を要することが知られているため、この収束性の問題の改善を考たい。本研究で扱う連続最適化問題は多峰性の高い目的関数を対象としており複雑である。しかし、ある範囲を、例えば局所解付近や最適解付近を、局所的に見るとそれは単峰の凸関数として捉えることができる。そのような点では従来の手法を用いてその最小化を行うことが考えられる。このような考え方を基にした改善手法として SA と powell 法のハイブリット手法 [6] が存在する。powell 法とは  $n$  次の凸関数を最小化させるための手法の一つであり、方向集合を用いることによって最小化する方向をさだめ最小化を行い、その解からさらに方向集合をさだめ最小化を行うという手順を最小化できる方向がなくなるまで繰り返し最小点を見つけるという手法に基づくものである [5]。その基本手続きは次の図4のとおりである。ここで、 $P_0$  が現在の解であり、 $N$  は関数の次数である。2行目から5行目で最小化を行う方向を定め、6行目で最小化方向に解を移動するという手続きを繰り返し行う。本研究では、コーシー分布型 SA によって得られた近似解に対して powell 法を適用するという手法で短い時間での解の収束を可能とし、かつ、最終的に最適解への収束をも可能とするような改善を考え、コーシー分布型 SA と powell 法のハイブリット手法を提案手法とする。次節では本提案手法を実行するための冷却スケジュールについて検討する。

## 5 冷却スケジュール

SA を効果的に実行するためには適切な冷却スケジュールを設定しなければならない。この冷却スケジュールは初期温度  $T_{init}$ 、初期反復数  $R_{init}$ 、温度減少率  $phi$ 、反復数増加率  $tau$  の4つのパラメータおよび終了基準の組み合わせによって決定されるもので

あり、通常、冷却スケジュールはこれらのパラメータの組み合わせについて予備実験で求められた良い値を経験的に用いることが多い。しかし、パラメータが複数あり、ひとつのパラメータに対する候補値も複数あることから、その組合せ数は膨大なものになってしまう。そのため、各組合せに対して予備実験を行うには多くの時間を要し困難を伴う。そこで、本研究では Aarts らによって提案された組合せ最適化問題における多項式時間で SA を実行する冷却スケジュールの設定手法 [7] を基にして連続最適化問題におけるパラメータの設定方法について検討したい。なお、ここでは最高温度の設定方法、終了基準の設定方法について扱うこととする。

まず、最高温度の決定方法について述べる。SA における最高温度とはその温度において提案されるすべての解の移動が受理されるような温度である。Aarts らによると、ある温度  $T$  で解の提案の系列が生成されるとすると、その温度における解の受理率  $\chi$  は次の式で近似することができる。

$$\chi \approx \frac{m_1 + m_2 \cdot \exp\left(\frac{-\Delta f^{(+)}}{T}\right)}{m_1 + m_2} \quad (9)$$

ここで、 $m_1$  はこの系列においてある解  $i$  から提案された解  $j$  への移動に対して評価値が  $f(j) \leq f(i)$  となる移動の提案数であり、 $m_2$  は評価値が  $f(j) > f(i)$  となる移動の提案数である。 $\Delta f^{(+)}$  は  $m_2$  の解の評価値が改悪される移動における評価値の改悪量  $f(i) - f(j)$  の平均値である。また、この式の変形から次の式を導くことができる。

$$T = \frac{-\Delta f^{(+)}}{\ln\left(\frac{m_2}{m_2\chi - m_1(1-\chi)}\right)} \quad (10)$$

Aarts らの手法では目標とする初期温度における解移動の受理率  $\chi_0$  を  $\chi$  に与え、 $m_0 (= m_1 + m_2)$  回の解の提案の系列を生成する。そして、そこで得られた  $m_1$  と  $m_2$  および  $\Delta f^{(+)}$  から (10) 式によって  $T$  を算出し、ここで求められた  $T$  を初期温度  $T_{init}$  に設定することが提案されている。この手法を用いて、コーシー分布型 SA においてランダムに設定した初期解から上述の系列を生成し最高温度を推定することを試みた。しかし、解空間の形状が複雑なため初期解から推定した温度では初期解から移動した後の解からの移動に対して有効に働かず、この方法で

表 1: 最高温度の推定

目標とする 受理率	推定された 最高温度	受理率 (実験値)
0.9	192.22	0.91
0.8	67.93	0.81
0.7	49.61	0.66
0.6	23.83	0.54

は最高温度での受理率の実験値が目標とする受理率  $\chi_0$  とかけ離れた値となってしまった。また、試行毎に初期解が生成された点における  $m_1$ 、 $m_2$  が大きく変化し、推定される最高温度に大きなばらつきがみられるため連続最適化問題での探索に有効な温度を求める手法として使うことは困難であった。本来、この手法が用いられる組合せ最適化問題では、ランダムに初期解を生成する場合、初期解はその評価値が解空間の評価値の平均値となるような解が生成されるため  $m_1$ 、 $m_2$  の値がほぼ均一となる。そこで、本研究では最高温度の推定に次の変更を加えた。まず、解空間の中から 100 回のランダムサンプリングを行い、サンプリングされた解のコストの平均を求め、サンプリングされた解の中から最もコストが平均値に近い解を初期解に設定することとした。次に、サンプリングで得られた 100 個の解それぞれにおいて近傍を発生させ、各解から 100 回ずつ解の移動を提案することで  $m_1, m_2$  を集計し、 $\Delta f^{(+)}$  を求めることとした。目標とする最高温度での受理率と、この手法を用いて推定した最高温度とその温度における解の移動の受理率の関係を表 1 に示す。これは各目標とする受理率について 50 回の試行を行い、得られた最高温度およびその温度での解移動の受理率の平均値である。この結果から各目標とする最高温度での受理率と実際に求められた最高温度での受理率の実験値が同等な値をとることがわかり、この推定方法が連続最適化問題にも有効に機能していることがわかる。本研究では予備実験により目標とする解の受理率  $\chi_0$  に 0.8 を設定することとした。

次に終了基準の設定方法について述べる。従来は終了基準には解の移動の総反復数や一定期間における暫定解の更新の有無などが用いられる。一方、Aarts らの終了基準は  $T \downarrow 0$  における、平衡状態のコストの期待値、すなわち図 1 の 3 行目のループにおける解提案の反復のなかで受理された解のコストの平均値を基に設定するとある。 $T \ll 1$

のとき、この期待値と最適解のコストの差  $\Delta\langle f \rangle_T$  が次の式で近似できる。

$$\Delta\langle f \rangle_T \approx T \frac{\partial\langle f \rangle_T}{\partial T} \quad (11)$$

そして、次の関係式を満たすような小さな正の数  $\epsilon$  を基準として SA を終了させるとある。

$$\frac{T}{\langle f \rangle_\infty} \frac{\partial\langle f \rangle_T}{\partial T} < \epsilon \quad (12)$$

なお、平衡状態では次の関係が成り立つとされ、

$$\frac{\partial\langle f \rangle_T}{\partial T} = \frac{\sigma_T^2}{T^2} \quad (13)$$

最終的に次の式で終了基準を表すことができる。

$$\frac{1}{\langle f \rangle_\infty} \frac{\sigma_T^2}{T} < \epsilon \quad (14)$$

ここで、 $\langle f \rangle_\infty$  は  $T = \infty$  における平衡状態のコストの期待値を表し、 $\sigma_T^2$  は温度  $T$  の平衡状態におけるコストの分散を表す。 $\langle f \rangle_\infty$  は解空間に存在する解のコストの平均値で推定できることから、本研究では最高温度を推定する際に求めた 100 個の解の平均値を  $\langle f \rangle_\infty$  に設定し、各温度における反復で得られた解のコストから、その温度の反復における分散  $\sigma_T^2$  を算出することとした。(14) 式の左辺で求められる値は、現在の解と最適解とのコスト差を最適解のコストで正規化したものであり、現在の解が最適解にどれくらい近づいているかという指標となる。また、右辺の  $\epsilon$  は問題に依存することなく設定することが可能な基準であることがわかり、ここで設定した値がその他の問題においても有効に扱えることを示唆している。以降、(14) 式左辺で求められる値を終了判定値、 $\epsilon$  を終了基準値と呼ぶ。この終了判定値の特徴を考察するため、Alpine 関数に対するコーシー分布型 SA における終了判定値と暫定解のコストの振る舞いを観察した。典型的な結果を図 5 に示す。なお、Alpine 関数の最適値が 0.0 であるため、暫定解の振る舞いは最適解とのコスト差の振る舞いでもある。この図から温度の減少に伴って暫定解が保持するコストの値が減少し、同じように終了判定値も多少の振幅がみられるがその値が減少していることがわかる。また、その減少はおおよそ同様な傾向にあり、低温時には二つの値はほぼ同じ水準で推移している。このことから、終了判定値が最適解との近さを表すことを確認でき、終了

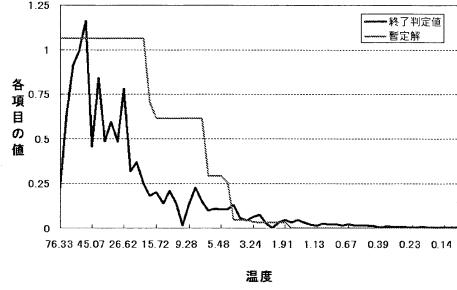


図 5: 終了判定値と暫定解の振る舞い

判定値を終了基準に設定することの有効性が伺える。そこで、終了基準値  $\epsilon$  に設定する適切な値として暫定解が最後に更新された温度における終了判定値を考え、その値を計測した。50 回の試行におけるこの終了判定値の分布を図 6 のヒストグラムに示す。この結果から、終了判定値が 0.002 を示し

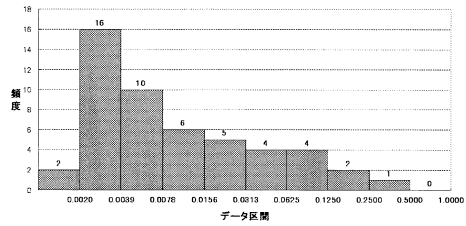


図 6: 終了判定値の分布

た温度で最後の暫定解の更新が行われることが最も多いことがわかり、0.002 を計測するまでに 9 割以上の割合で暫定解が更新されなくなることがわかる。よって、終了基準値  $\epsilon$  には 0.002 を設定することとし、終了基準を「終了判定値  $\leq \epsilon = 0.002$ 」と定めることとした。

以上、本節ではコーシー分布型 SA における最高温度、および終了基準の設定方法について述べた。最高温度には、最高温度での受率率が目標とする理論値と実験値とが同等となる探索に有効な温度を設定することができた。また、終了基準には最適解との近さを捉えた基準を設定することができた。なお、その他のパラメータについても調整する必要があるが、その設定値については発表当日に示したい。

表 2: Alpine 関数についての比較

手法	SA /AAN	正規分布 /BEST	コーシー /AUTO
到達回数	0	66	68
コスト	0.0006	0.047	1.02E-9
ステップ数	310000	1122635	161783

## 6 数値実験

最後に、本研究における提案手法の特徴を検討するために、先行研究であるSA/AAN、予備実験によって得られた最も良い結果を導く冷却スケジュールでの正規分布を近傍に用いたSA（正規分布/BEST）、提案手法である冷却スケジュールの最高温度と終了基準の設定の自動化を図ったコーシー分布型SA（コーシー/AUTO）の3つの手法について比較を行う。Alpine 関数に対して行った3つの手法の実験結果を表2に示す。ここで、到達回数とは100回の試行において、各試行で最終的に得られた解  $(x_1, x_2)$  の要素  $x_1, x_2$  がそれぞれの最適解の座標  $\pm 1$  の範囲に到達した試行の回数である。また、コストは得られたコストの平均値であり、ステップ数は各試行で行われた解の提案の反復数の平均を取ったものである。なお、コーシー/AUTOにおけるステップ数は初期温度を推定する際に行う解の提案数および powell 法による解移動の反復数を含んだものである。到達回数を見るとSA/AANは一度も最適解付近へと到達できず、正規分布/BESTはコーシー/AUTOと同等の到達回数だが探索に多くのステップ数を必要としていた。一方、コーシー/AUTOでは7割近くの試行で最適解付近へと到達しており、ここにコーシー分布型近傍の探索能力の高さが伺える。また、コーシー/AUTOはコストにおいてもSA/AANよりも高い精度でほぼ最適解に近い値を導いており、powell法とのハイブリット化による解の収束の効果が著しく見られた。ステップ数をみると、提案手法は他の手法よりも小さな値で処理を実行することができており、ここにコーシー分布近傍の特徴である時間の高速化が伺える。そして、これらの結果から組合せ最適化問題におけるパラメータの理論的な設定方法を基に設定した冷却スケジュールが探索を良好に進めるうえで有効に働いていることを確認でき、連続最適化問題に適用可能な方法であることを確認できた。なお、Alpine 関数以外の他の問題においても本研究の提案手法

コーシー/AUTOは先行研究と同等以上の結果を得られている。

## 7 おわりに

本研究では多峰性を伴う複雑な連続最適化問題を解く手法として、SAのアルゴリズムを基にした手法について検討した。ここでは、コーシー分布型近傍による探索能力の向上と powell 法による解の収束性の改善を図った。また、冷却スケジュールについて組合せ最適化問題におけるパラメータの理論的な設定方法を基にパラメータの調整を試みた。その結果、提案手法であるコーシー分布型SAは連続最適化問題に対する高い探索能力と良い精度の解が得られる収束性をもち、そして、速い時間で処理を行うことができる手法として構築できた。さらに、理論的な設定方法を基にしたパラメータ設定が連続最適化問題においても有効であることを確認できた。

## 参考文献

- [1] S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt Jr., M.P. Vecchi: "Optimization by Simulated Annealing", Science, Vol.220, Num.4598, pp.671-680(1983)
- [2] 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)
- [3] SZU H., HARTLEY R.: "Fast Simulated Annealing", Physics Letters A Vol.122 Num.3,4 pp.157-162 (1987).
- [4] 柳浦睦憲, 茨木俊秀: 「組合せ最適化—メタ戦略を中心として—」
- [5] William H. Press, William T. Vetterling, Saul A. Teukolsky, Brian P. Flannery, "NUMERICAL RECIPES IN C [日本語版]" (技術評論社, 1993) pp.299-306
- [6] Ya-Zhong Luo, Guo-Jin Tang, Li-Ni Zhou: "Simulated annealing for solving near-optimal low-thrust orbit transfer" Engineering Optimization, Volume 37, Number 2, March 2005, pp. 201-216
- [7] Emile Aarts, Jan Korst, "Simulated Annealing and Boltzmann Machines: A Stochastic Approach to Combinatorial Optimization and Neural Computing", John Wiley & Sons (1989)