

適応的シミュレーテッドアニーリング

Adaptive Simulated Annealing

小野 景子

Keiko ONO

Abstract: 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

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。組み合わせ最適化問題では、近傍の大きさは解振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。一方、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⁾ では受理率が 0.5 になるように近傍設計を自動化した。しかし、目標受理率を 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を調べ、問題に適応する振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。

2 受理率を 0.5 とする適応的近傍の問題点

Corana が提案した SA³⁾ は、無駄な探索を防ぐため、一様分布を元とした解振動に用いる近傍の範囲を受理率が 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、目標とする受理率を 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) と受理率を 0.5 にした SA の性能を比較した⁴⁾。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、受理率を 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、適切な受理率について検討を行う。Fig. 1 は、Rastrigin 関数をテスト関数とし受理率を 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。Fig. 1 より受理率を 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、Fig. 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、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、そのため受理率が低下する。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、受理率を 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。

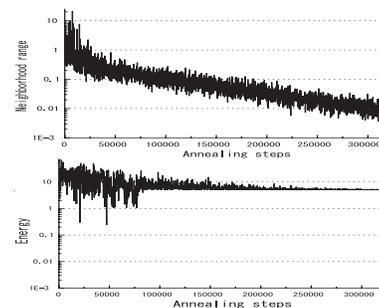


Fig. 1 History of Energy and Range(Rastrigin)

3 適応的振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 では受理率は最終的には非常に小さくなることから、受理率を 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、受理率を 0.5 より小さい受理率を実現する適応的振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。

4 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⁵⁾、Griewank 関数⁶⁾、Rosenbrock 関数⁶⁾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 Table 1 に示す。なお、詳細なパラメータ設定法は文献⁴⁾を参照されたい。

Table 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 Fig. 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と比較すると正しい評価にならないからである。

Fig. 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、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所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。

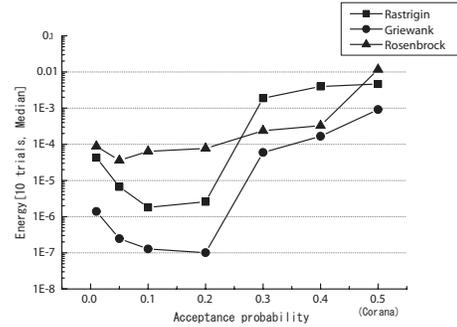


Fig. 2 Experimental results

5 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本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。

参考文献

- 1) Kirkpatrick, S., Gellett 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) 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)
- 5) 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).
- 6) Whitley, D., Mathias, K., Rana, S. and Dzubera, J.: Evaluating Evolutionary Algorithms, Artificial Intelligence, Vol. 85, pp. 245-276 (1996).