

ダミー目的関数をもつ多目的確率的山登り法

Multi-Objective Probabilistic Hill-Climbing Method Using A Dummy Objective Function

三木 光範[†]
Mitsunori MIKI

廣安 知之[†]
Tomoyuki HIROYASU

日和 悟[‡]
Satoru HIWA

實田 健[§]
Takeshi JITTA

1. はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing:SA) は、最適化問題に有効な汎用近似解法である。SA では、温度パラメータの働きによって局所解から抜け出すことができるが、SA における適切な温度スケジュールの設定は容易ではない。

我々は単目的の最適化問題をダミー目的関数を用いて多目的化することで、受理確率関数の働きによって温度パラメータを用いずに局所解から抜け出すことができることを見出した。温度パラメータを用いない SA は、改悪を一切受理しないため、確率的山登り法となる。本研究では、温度を用いない SA として多目的確率的山登り法を提案する。

2. SA とは

SA[1] は Kirkpatrick らによって提案された最適化問題のための近似解法の 1 つである。システムの計画や運用などの効率化を考える場合、多くの問題が組み合わせ最適化問題として定式化できるが、実際的な問題の多くは厳密な最適解を求めるのは困難である。そこで、この種の問題は満足できる解を求める近似解法が適用されている。SA は、高温で溶融状態にある金属を徐々に冷やすことによって、もとの金属より欠陥の少ない優れた結晶構造を作る物理プロセス (焼きなまし) を計算機上に模倣した手法である。

SA における探索では、エネルギー関数の山を、温度により改悪を受理して越えなければならない。改悪の受理は式 (1) に示す Metropolis 基準によって確率的に行われる。なお、 ΔE は状態遷移におけるエネルギーの変化量を示す。

$$P_{AC} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right) \quad (1)$$

通常 SA では経験的に十分高温から探索を開始する。これは、初期温度すなわち最高温度が低すぎると、局所解から脱出することが不可能となり、最適解を得ることができなくなってしまうためである。しかし、最高温度が高すぎるとそれだけ無駄な探索が多くなり、計算効率が悪化する。

そこで、単目的の SA において、温度パラメータが解に与える影響について検証するため、高温から低温まで一定温度で解探索を行ったところ、一定温度の探索で良好な解が得られる温度領域が存在することがわかった [2]。本研究ではこのような温度を重要温度領域とよぶ。重要

温度領域は問題に固有の値となり、この温度付近で探索を行うことで、効率的な解探索が可能になる。しかし一般にこの重要温度領域を特定するには予備実験が必要となる。

3. 多目的 SA における温度パラメータ

3.1 多目的 SA とは

多目的 SA[3] と通常の単目的 SA との大きな違いは、次状態の受理判定を行う際に用いる受理確率関数にある。単目的 SA の受理確率関数は、一つの目的関数値によってその受理確率を定め、判定を行う。しかしこの受理確率関数を多目的最適化問題にそのまま用いることはできない。そこで、多目的最適化問題に適用可能な受理確率関数が提案されている。以下にそれらを示す。

Rule SL

$$P_{AC} = \min \left\{ 1, \exp \left(\frac{\sum_{j=1}^p \omega_j \Delta f_j}{T} \right) \right\} \quad (2)$$

Rule C

$$P_{AC} = \min \left\{ 1, \min_j \left(\exp \left\{ \frac{\omega_j \Delta f_j}{T} \right\} \right) \right\} \quad (3)$$

Rule W

$$P_{AC} = \min \left\{ 1, \max_j \left(\exp \left\{ \frac{\omega_j \Delta f_j}{T} \right\} \right) \right\} \quad (4)$$

ここで、 $\Delta f_j = f_j(x) - f_j(x')$ であり、 x, x' はそれぞれ現在の状態と次状態である。また T は温度、 $\omega_j (\omega_1 + \dots + \omega_p = 1)$ は目的関数 f_j に対する重みを示す。

最も代表的な受理確率関数は式 (2) に示す Rule SL である。この受理確率関数は重み係数法により複数の目的関数を単目的化し、単目的 SA で用いられる Metropolis 基準を用いて受理判定を行う。Rule C は、次状態の候補 x' が現在の解 x を支配している場合にのみ受理確率 P_{AC} が 1 となるような関数形をした受理確率関数であり、Rule W は次状態の候補 x' が現在の解 x に支配されていなければ受理確率 P_{AC} が 1 となるような関数形をした受理確率関数である。

2 目的最小化問題における各受理確率関数の $f_1 - f_2$ 平面での等高線の模式図を図 1 に示す。 x が $f_1 - f_2$ 平面上における現在の解の位置である。候解補と二つの目的関数値の差を Δf_j で表し、点 x を原点として Δf_1 軸、 Δf_2 を描いてある。

Rule C のように解が改善となる方向への探索を優先するような受理確率関数の場合、パレート最適フロント

[†]同志社大学工学部

[‡]同志社大学工学部学生

[§]同志社大学大学院学生

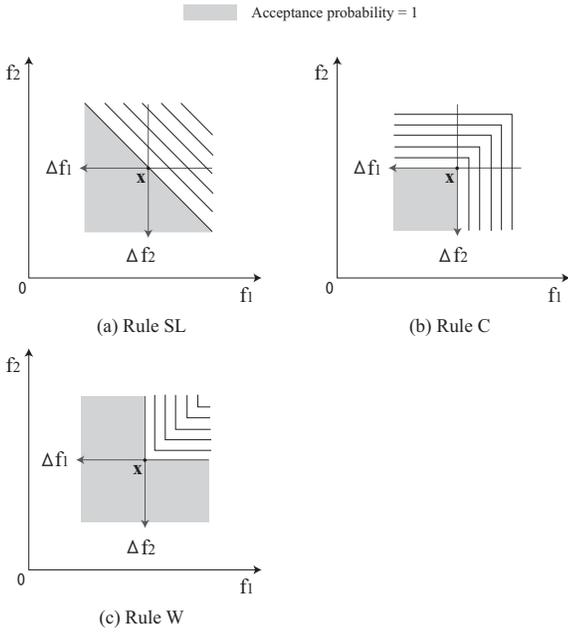


図 1: 受理確率関数

に対する収束性の向上が期待されるが、解が局所解に陥る可能性が高くなる。一方 Rule W のように解が改悪となる方向への探索を優先するような受理確率関数の場合、パレート最適フロントに対して、幅広い解探索が期待されるが、収束性が悪化する可能性が高くなる。本研究では比較的安定して良好な解探索が行えるとされる Rule SL を使用する。なお、重み w_j は $[0,1]$ の範囲からランダムに決定する。

3.2 多目的巡回セールスマン問題 (MOTSP)

本研究では代表的な組合せ多目的最適化問題である、多目的巡回セールスマン問題 (Multi-Objective Traveling Salesman Problem: MOTSP) を対象とした。本研究で扱う MOTSP は以下のように定式化される。

$$\min f(\mathbf{x}) = \begin{cases} f_1(\mathbf{x}) = c_1^{\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{x}^{(1)}} + \sum_{i=1}^{n-1} c_1^{\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(i+1)}} \\ f_2(\mathbf{x}) = c_2^{\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{x}^{(1)}} + \sum_{i=1}^{n-1} c_2^{\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(i+1)}} \\ \vdots \\ f_J(\mathbf{x}) = c_J^{\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{x}^{(1)}} + \sum_{i=1}^{n-1} c_J^{\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(i+1)}} \end{cases}$$

subject to $\mathbf{x} \in \mathfrak{S}\{1, 2, \dots, n\}$ (5)

ここで、 n は都市の数を表し、決定変数ベクトル $\mathbf{x} = (\mathbf{x}(1), \mathbf{x}(2), \dots, \mathbf{x}(n))$ によって n 都市の巡回路を決定している。また、 $c_j^{i,j}$ は目的 J における都市 (i, j) 間のコストを表す。決定変数ベクトル $\mathbf{x} = (\mathbf{x}(1), \mathbf{x}(2), \dots, \mathbf{x}(n))$ は目的によらず共通である。したがって、MOTSP は都市数が同じ複数の異なる単一目的 TSP の巡回路長を、同時に最小化する問題であるといえる。

MOTSP における近傍構造は、巡回路の 2 本の枝を交換する 2-change[4] を用いた。ただし、評価する目的が

複数存在するため、2-change を適用する際に、交換する 2 本の枝のうち少なくとも 1 本はもとの枝よりも短くなるような実装は行っていない。

3.3 MOTSP における多目的 SA の重要温度領域

本研究では MOTSP に対し、高温から低温まで一定温度の多目的 SA を適用し、MOTSP における多目的 SA の重要温度領域について検証を行った。実験ではまず、広範囲の温度について検証するため、経験的に $1E-2$ から $1E+2$ までの間を等比的に 5 分割した温度に温度 0 を加えた計 6 パターンで、一定温度の多目的 SA を行った。

目的関数に対する重みは f_1 に対する重み w_1 を $[0,1]$ の範囲からランダムに決定し、 f_2 に対する重み w_2 は $w_2 = 1 - w_1$ とした。探索点は 10 点とし、終了条件は各探索点において都市数 \times 3200 回探索が行われた時点とした。kroac100 において得られた非劣解集合に対し、優越個体割合 [5] (Ratio of Non-dominated Individuals: RNI-2) によって評価した結果を図 2 に示す。図 2 中の円グラフは、左側の割合が円グラフの上部に示した温度で探索した場合の優越度合いを、右側の割合がグラフ右に示した温度で探索した場合の優越度合いを示している。

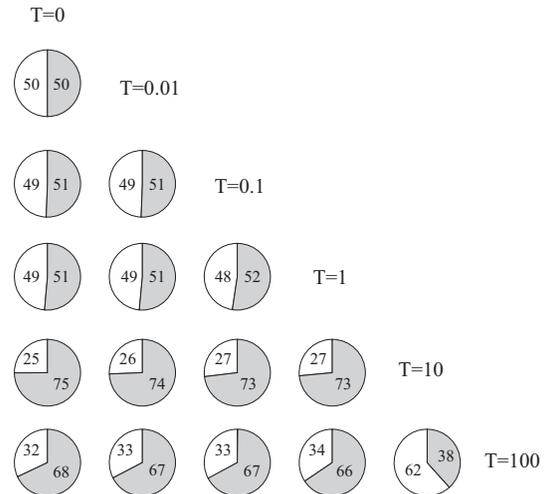


図 2: RNI-2 of kroac100 (constant temperature)

図 2 より温度 $T = 10$ が他のどの温度よりも優れた結果を示している。したがって、kroac100 では $T = 10$ 付近が重要温度領域であると考えられる。他の問題でも同様の傾向が見られた。

そこで、各問題における重要温度領域をより詳細に検証するため、上記の実験で最も良好な解が得られた温度付近に温度範囲を限定し、先ほどと同じように一定温度の多目的 SA を行い、重要温度領域について検証した。その結果、良好な解探索が行われている温度を、より詳細に特定することができた。本実験では RNI-2 による一対比較で、実験を行った温度パターンのうち最も良好な結果を示した温度を重要温度と定義し T_{imp} と表記する。得られた重要温度を表 1 に示す。

表 1 より、多目的 SA における重要温度領域は問題によって異なる値となるのがわかる。しかし図 2 で示したような結果を得るためには、膨大な予備実験が必要となる。

表 1: MOTSP における多目的 SA の重要温度領域

Problem	T_{imp}
kroac100	51.7
kroab150	40.0
kroab200	26.8

一方、図 2 は興味深い事実を示している。それは、温度 $T = 0$ の条件でも重要温度領域 ($T = 10$) と比較して、25%程度の確率で最適解が得られることを示している。これは単目的 SA ではありえないことである。単目的 SA において温度を 0 とすると必ず局所解が得られ、大域的最適解が得られる確率はほとんどない。このことから、多目的 SA では、温度 $T = 0$ でも最適解が得られる可能性がある程度存在することがわかる。この事実に基づき、我々は新しいアルゴリズム、すなわち多目的確率的山登り法を提案する。

4. 多目的確率的山登り法

4.1 概要

前述したように、SA は温度とよばれる制御パラメータを用いることで、評価関数の変化量が改悪となる場合でも、その解を受理する可能性を持つ。すなわち、温度パラメータを使用することで、局所解から脱出するメカニズムを持つアルゴリズムである。よって、単目的最適化問題のように、評価する目的関数が単一で解探索途中に局所解に陥った場合、この温度パラメータを用いなければ局所解から脱出することは不可能であるが、温度パラメータの適切な設定は容易ではない。

一方、目的関数が複数存在する多目的 SA では、図 2 の結果より、改悪受理を全く認めない $T = 0$ で得られた非劣解集合と、最も良好な結果を示した $T = 10$ の非劣解集合を比較した場合、 $T = 0$ の優越個体割合が 25%存在していることがわかる。これは RuleSL を使用した場合、一方の目的関数値が改悪の場合でも、もう一方の目的関数値が改良となれば、温度を用いなくても次状態を受理する可能性を持つため $T = 0$ でも良好な解探索ができることを示している。

図 3 は $T = 0$ と $T = 10$ のパレート解をプロットしたものであるが、 $T = 0$ でも良好な解が得られていることがわかる。これは単目的 SA ではありえない結果であり、多目的 SA のみに見られる特徴である。

そこで、この性質を利用し、単目的最適化問題の目的関数を多目的化したダミー目的関数を用いて、温度パラメータを持たない多目的 SA、すなわち多目的確率的山登り法を提案し、その有効性について検証を行う。

4.2 ダミー目的関数とは

多目的確率的山登り法は多目的最適化手法であるため、単目的 TSP をそのまま解くことはできない。そこで、同じ都市配置の TSP を 2 つ組合せて多目的化し、多目的確率的山登り法を適用する。つまり、本来最適化したい TSP の他に、別の TSP をダミー目的関数として加えることで MOTSP (多目的 TSP) とする。

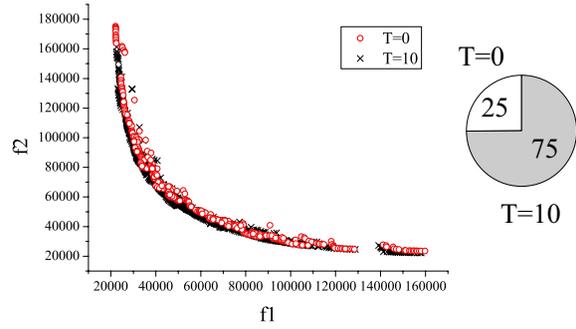


図 3: $T = 0$ と $T = 10$ のパレート解の比較

同じ都市配置の TSP を 2 つ組合せて MOTSP を作成する場合、最適解が異なる巡回路となるように目的関数を設定する必要がある。ここでは、図 4 に示すように、TSPLIB から選択したある TSP の順回路長を f_1 に、 f_2 にはその TSP の都市番号をランダムにシャッフルし、最適解が異なる巡回路となるようにした同じ都市配置の TSP を用いて、2 目的の TSP を 5 種類作成した。

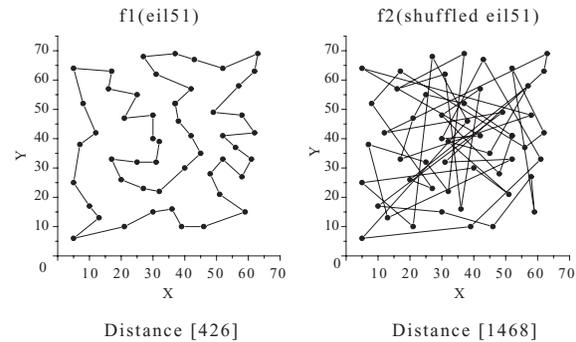


図 4: ダミー目的関数による単目的 TSP の多目的化

図 4 は eil51 と都市番号をランダムにシャッフルした eil51 を組合せた問題で、 f_1 が最適解の状態となっている場合の巡回路を示したものである。この問題において f_1 が最適解となる場合は f_2 の経路長は 1468 となっている。同様にして ch130, kroA100, pr76, pr144 についても 2 目的 TSP を作成した。作成した 2 目的 TSP は 2-(問題名) と表記する。

4.3 重み変更メカニズム

受理確率関数 RuleSL では、重み係数法により複数の目的関数を単目的化し、単目的 SA で用いられる Metropolis 基準を用いて受理判定を行う。また、 f_1 に対する重み w_1 を $[0, 1]$ の範囲で毎回ランダムに変化させる。また f_2 に対する重みは常に $1 - w_1$ とする。しかしながら、多目的確率的山登り法では、探索終了時には本来の目的関数である f_1 に対する重み w_1 が 1 とならなければならない。このため、探索後半は式 (6) にもとづいて一様乱数の発生範囲を徐々に $[1, 2]$ ヘシフトさせる。乱数が 1 を越えた場合、重みは 1 とする。

$$W_i = rand() + \frac{(2 * N_E) - N_T}{N_T} \quad (6)$$

ここで $rand()$ は $[0,1]$ の一様乱数を示す． N_E は探索後半のある時点における，評価周期の回数を示す．本研究では都市数の 20 倍の評価計算を 1 評価周期とした．また， N_T は総評価周期の回数を示し，本研究では 160 回とした．図 5 に用いた重みの変化を示す．

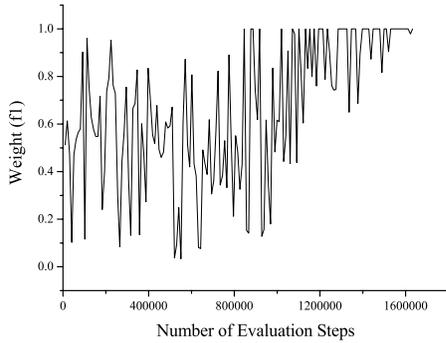


図 5: 重みの変化の様子

図 5 のように重みを変化させることで，探索終盤では f_1 の重みが強くなるため，最終的には f_1 の最適化を目標として解探索を行っていることになる．

4.4 数値実験と考察

実験では，ダミー目的関数を用いて多目的化した 5 種類の 2 目的 TSP に対し，多目的確率的山登り法を適用し，通常の単目的 SA で温度を用いない場合，すなわち単目的の確率的山登り法と比較した．探索は各問題においてランダムな初期解から開始した．得られた結果の解精度（最適解からの誤差率）の比較を図 6 に示す．図 6 は各問題を上記の 2 つの手法で解いた場合の結果であり，100 回試行の最良値，最悪値，平均値を示す．

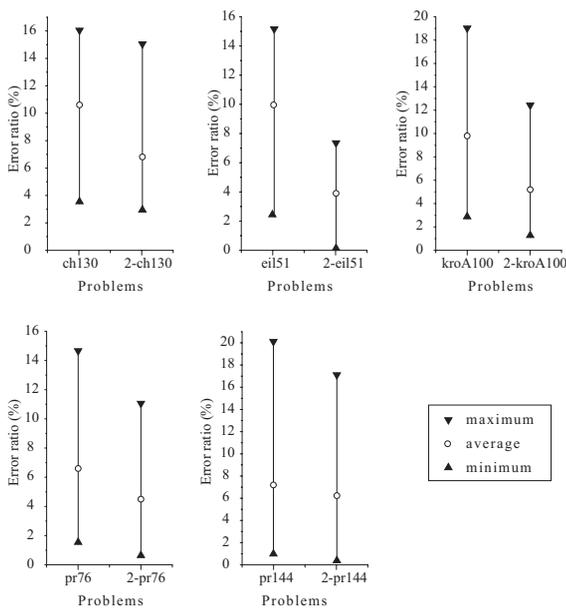


図 6: 得られた解の誤差率による比較

さらに，eil51 について，得られた解の 100 回試行に

おける中央値をとったときの探索履歴を図 7 に示す．

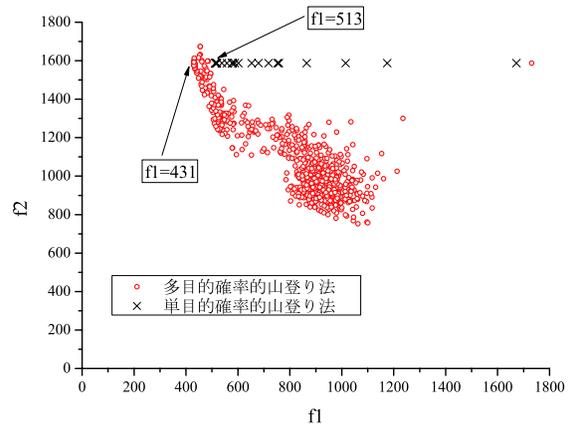


図 7: 探索履歴の比較

図 6 より，単目的の確率的山登り法を TSP に適用した場合と比較して，ダミー目的関数を用いて多目的化した TSP に多目的確率的山登り法を適用した場合の方が，最良値，最悪値，平均値，すべてにおいて誤差率が低くなっている．また 2-eil51 では誤差率 0% の最適解が求められている．図 7 では，単目的の確率的山登り法が局所解 ($f_1=513$) に陥っているのに対し，多目的確率的山登り法は局所解を避けて最適解により近い値 ($f_1=431$) が得られる．これらのことから，単目的 TSP をダミー目的関数を用いて多目的化することで，局所解に陥る可能性が低くなり，設定が容易でない SA の温度パラメータを使用せずに良好な解探索を行うことが可能であることがわかった．

5. 結論

SA を最適化問題に適用する際，温度スケジュールの設定が容易でないことから，本研究では，多目的 SA における受理確率関数の性質を利用して，温度パラメータを使用しない多目的 SA，すなわち多目的確率的山登り法を提案した．また，この多目的確率的山登り法を用いて単目的の TSP を解く手法として，ダミー目的関数を用いた単目的 TSP の多目的化を提案した．その結果，単目的 SA で温度を 0 にした場合，すなわち単目的の確率的山登り法よりも優れた解が得られることがわかった．

参考文献

- [1] Kirkpatrick, S., Gelett Jr. C. D., Vecchi, M. P. Optimization by simulated annealing. *Science*, Vol. 220, No. 4598, pp. 671–680, 1983.
- [2] 三木 光範, 廣安 知之, 實田 健 適応的最高温度を持つシミュレーテッドアニーリング. *情報処理学会論文誌*, Vol. 44, No. 11, pp. 2787–2795, 2003.
- [3] P. Serafini. Simulated annealing for multiple objective optimization problems. *Proceedings of the Tenth International Conference on Multiple Criteria Decision Making*, Vol. 1, pp. 283–294, 1994.
- [4] Borges P.C., Hansen P.H. A basis for future successes in multiobjective combinatorial optimisation. *Technical Report, Department of Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, IMM-REP-1998-8*, 1998.
- [5] Kay Chen Tan, T.H.Lee, and E.F.Khor. Incrementing Multi-Objective Evolutionary Algorithms: Performance Studies and Comparisons. *First International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization*, pp. 111–125, 2001.