

連続最適化問題における シミュレーテッドアニーリングアルゴリズムの解探索性能の比較 Comparison of the Simulated Annealing Algorithm applied on the continuous optimization problems

廣安 知之[†]
Tomoyuki HIROYASU

三木 光範[‡]
Mitsunori MIKI

昌山 智[‡]
Satoru MASAYAMA

岡本 祐幸[§]
Yuko OKAMOTO

1. はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) は、最適化問題を解く手法の 1 つであり、多くの組合せ最適化問題に対して有効な手法である [1]。

これまでに、多くの SA のアルゴリズムが提案されている。しかし、提案された SA は個々に解探索性能の検証が行われ、複数の SA を比較し解探索性能を検証している例は少ない。そこで、本研究では、著者らが提案した遺伝的交叉を用いた並列 SA (PSA/GAc)、最適な受理率を目標とする適応的近傍を持つ SA (SA/AAN) と汎用最適化手法である Adaptive Simulated Annealing (ASA) の解探索性能の比較を行う。

2. 比較手法

2.1 遺伝的交叉を用いた並列 SA

PSA/GAc は、並列に実行している各 SA の解の伝達時に、遺伝的アルゴリズム (GA) のオペレータである交叉を用いたものである。PSA/GAc では、解の伝達時に並列に実行している SA からランダムに親 2 個体を選択し、設計変数間交叉 [2] を行う。ある設計変数の最適解が求まっている場合、交叉によってその設計変数値を他の SA の探索に伝達することができるため、局所解に陥ることを回避でき、かつ解の収束を早めることができる。

2.2 最適な受理確率を目標とする適応的近傍を持つ SA

SA/AAN は、受理率をもとに近傍幅を決定する [3]。すなわち、受理確率が目標値の上限より大きい場合には近傍幅を拡大し、受理率を下げる。一方、受理確率が目標値の下限より小さい場合には近傍幅を半分にし、受理率を下げる。このとき、近傍幅を増加させる拡大率を再帰的に定義することで、受理率が下がりにくい場合は、拡大率を十分大きな値にする。

2.3 Adaptive Simulated Annealing

様々な物理問題は n 次元の設計空間を持つ。そして、異なる設計空間は異なる有限の範囲を持つ。したがって、目的関数への影響度は次元によって異なるため、次元に応じたアニーリングと次元に応じた分布を考えるべきであるという観点から ASA は提案された。

ASA では生成処理、受理判定、クーリングを繰り返した後に Reannealing と呼ばれる新たな手順が追加されている。ASA は、通常の SA と同様に受理判定に用いる温度 T_{cost} とその他に各次元 i が生成処理に用いる温度 T_i を持つ。また、一般の SA では生成処理における確率分布として一様分布または正規分布が用いられるのに対

し、ASA では各次元の持つ温度パラメータによって分布の形状を変える確率分布が用いられる。

3. 数学的テスト関数における検証

3.1 対象問題

PSA/GAc, SA/AAN および ASA を代表的な数学的テスト関数に適用し、解探索性能の比較を行った。対象問題は、2 次元の Rastrigin 関数と Rotated Rastrigin 関数である。なお、次節に示す Rastrigin 関数および Rotated Rastrigin 関数の結果はそれぞれ 100 試行の結果である。

3.2 実験結果

図 1(a) に Rastrigin 関数における解探索性能を示す。横軸は手法、縦軸はエネルギー値を表す。また、図 1(b) に最適解発見率を示す。横軸は手法、縦軸は最適解発見率を示す。

図 1(a)、図 1(b) より、3 手法すべて最適解領域に到達していることが確認できる。中でも、ASA は他の 2 手法より低いエネルギー値が得られている。

図 2(a) に Rotated Rastrigin 関数における解探索性能を示す。横軸は手法、縦軸はエネルギー値を表す。また、図 2(b) に最適解発見率を示す。横軸は手法、縦軸は最適解発見率を示す。

図 2(a) より、PSA/GAc および SA/AAN は最悪値、中央値、最良値のすべてにおいて最適解領域に到達しているのに対し、ASA は最良値においては最適解領域に到達しているが、最悪値、中央値は最適解領域に到達していないことが確認できる。また、図 2(b) より、PSA/GAc および SA/AAN は最適解発見率が 100 % であるのに対し、ASA は他の 2 手法と比べ 30 % と低い結果となっている。

設計変数間に依存関係のない Rastrigin 関数においては、すべて手法が解探索性能、最適解発見率ともに良好な結果を得た。しかし、設計変数間に依存関係のある Rotated Rastrigin 関数においては、PSA/GAc および SA/AAN は Rastrigin 関数と同様の結果を得たが、ASA は最適解発見率が極端に下がっている。しかし、ASA は最適解領域に到達した場合には、局所探索能力が高いことが確認できる。

4. タンパク質エネルギー最小化における検証

4.1 対象問題

PSA/GAc, SA/AAN および ASA をタンパク質エネルギー最小化問題に適用し解探索性能の比較を行う。エネルギー最小化を行う対象タンパク質は、5 個のアミノ残基からなる Met-enkephalin と 13 個のアミノ残基からなる C-peptide である。設計変数には、原子間の回転角である二面角、エネルギー関数には ECEPP/2 を用いる。岡

[†]同志社大学 工学部

[‡]同志社大学大学院

[§]岡崎国立共同研究機関分子科学研究所

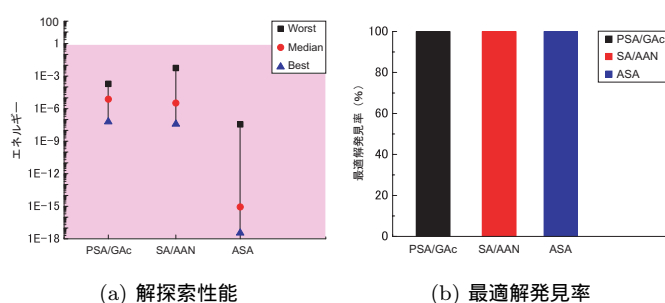


図 1: Rastrigin 関数

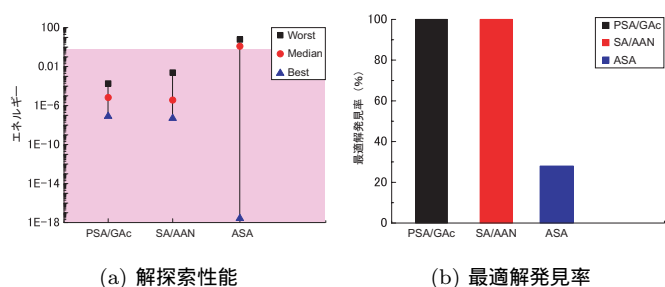


図 2: Rotated Rastrigin 関数

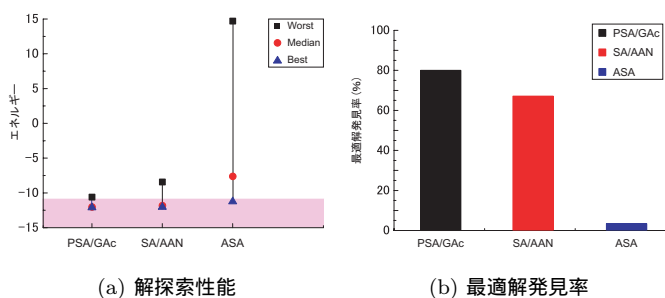


図 3: Met-enkephalin

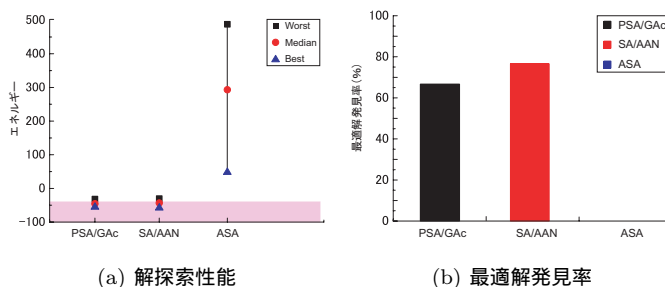


図 4: C-peptide

本らの実験より，Met-enkephalin は -11kcal/mol ，C-peptide は -42kcal/mol 以下のエネルギー値で最適構造をとることが知られている．なお，次節に示す Met-enkephalin および C-peptide はそれぞれ 30 試行の結果である [5, 6]．

4.2 実験結果

図 3(a) に Met-enkephalin における解探索性能を示す．横軸は手法，縦軸はエネルギー値を示す．また，図 3(b) に最適解発見率を示す．横軸は手法，縦軸は最適解発見率を示す．

図 3(a) より，PSA/GAc および SA/AAN は最良値，最悪値，中央値において低いエネルギー値を得ているのに対し，ASA は最良値のみ低いエネルギー値となっている．また，図 3(b) より，PSA/GAc および SA/AAN は 65～80 % の最適解発見率を得たのに対し，ASA は 5 % 程度と低い結果となった．

図 4(a) に C-peptide における解探索性能を示す．横軸は手法，縦軸はエネルギー値を示す．また，図 4(b) に最適解発見率を示す．横軸は手法，縦軸は最適解発見率を示す．

図 4(a)，図 4(b) より，PSA/GAc および SA/AAN は解探索性能において，ASA より低いエネルギー値を得た．また，PSA/GAc および SA/AAN は 65～75 % の最適解発見率を得たが，ASA は最適解を発見できていないことが確認できる．

5. まとめ

本研究では，PSA/GAc，SA/AAN および ASA を数学的テスト関数およびタンパク質エネルギー最小化問題に

適用し解探索性能の比較を行った．その結果，PSA/GAc および SA/AAN は，テスト関数においては設計変数間の依存関係の有無に関わらず良好な結果を示したのに対し，ASA は依存関係のある問題に対しては解探索性能が低下することが確認された．また，タンパク質を対象とした場合でも，PSA/GAc および SA/AAN は良好な結果を示したのに対し，ASA は他の 2 手法と比べ極端に解探索性能が低いことが確認された．その理由として，タンパク質はその系の複雑さから，設計変数値である原子間の回転角に強い依存関係があるため，良好な結果が得られなかったと考えられる．今後は，PSA/GAc および SA/AAN を融合しタンパク質エネルギー最小化問題において，その解探索性能を検証する．

参考文献

- [1] Rosen, B.E., 中野良平. シミュレーテッドアニーリング - 基礎と最新技術. 人工知能学会誌, Vol.9, No.3, 1994.
- [2] 廣安知之, 三木光範, 小掠真貴, 岡本祐幸. 遺伝的交叉を用いた並列シミュレーテッドアニーリングの検討. 情報処理学会論文誌, vol.43, No.SIG7(TOM6), pp.70-79, 2002.
- [3] 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. 情報処理学会論文誌, vol.44, No.1, pp.1-6, 2003.
- [4] 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, vol.9, No.6, 1997.
- [5] 岡本 祐幸. モンテカルロシミュレーションで探るタンパク質の折り畳み機構. 物性研究. Vol.70, No.6, pp.719-742, 1998.
- [6] Yuko Okamoto, Masataka Fukugita, Takashi Nakazawa, and Hikaru Kawai. -Helix folding by Monte Carlo simulated annealing in isolated C-peptide of ribonuclease A. Protein Engineering, Vol.4, No.6, pp.639-647, 1991.