

### 3 並列型近傍幅調節機能を持つシミュレーテッドアニーリング

平尾 洋樹  
Hiroki HIRAO

#### 1 はじめに

Simulated Annealing(SA) は、高温で加熱した金属の温度を徐々に下げて冷やすことによって、元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 ) を計算機上で模倣した最適化手法である <sup>1)</sup> .

連続最適化問題に SA を適用する場合、適切な近傍幅の設定が重要となるが、そのためには多くの計算コストがかかる。これまでの研究で、探索過程において一定の近傍幅を用いるよりも、探索序盤では大きな近傍幅で大域的探索を、探索終盤では小さな近傍幅で局所的探索を行うことにより、解精度が向上することがわかっている。しかしながら、近傍幅を小さくする時期を誤ると局所解に陥る場合がある。近傍幅が小さい状態で局所解に陥った場合は、その局所解を抜け出すことはできないため、近傍幅スケジュールは調節が容易ではない。

近傍幅に関する研究はこれまでに多くなされており、既存の手法として、最適な受理確率を目標とする適応的近傍を持つ SA ( SA/AN <sup>2)</sup> , 2 分木を用いた近傍幅調節機能を持つ SA ( SA/AN ( BT ) <sup>3)</sup> などがある。

本研究では、SA/AN ( BT ) の拡張として、探索過程において近傍幅を大中小の 3 つの異なる近傍幅を持つプロセスで並列に探索を行うことにより、適応的な近傍幅調節を行う SA ( Parallel Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood using Three Neighborhood Ranges : PSA/AN ( 3N ) ) を提案し、その有効性を示す。

#### 2 2 分木型近傍調節機能を持つ SA

##### 2.1 SA/AN ( BT ) のアルゴリズム

SA/AN ( BT ) の概念図を Fig. 1 に示す。

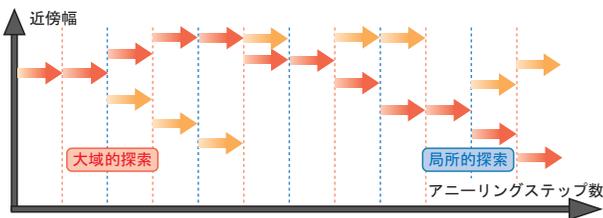


Fig. 1 SA/AN ( BT ) の概念図

このメカニズムでは、一定周期で同期をとり、その周期の間に最良値の更新がなければ、現在の近傍幅をもとに、拡大および縮小した近傍幅を生成し、2 つのプロセスに分岐する。そして、拡大、縮小した近傍幅を用いて

並列に探索を行い、一定周期後、良好な結果を得たプロセスを採用し、1 つのプロセスで探索を続ける。このとき、2 つのプロセスともに解の更新がなければ、近傍幅をさらに拡大、縮小し並列探索を進める。すなわち、解が更新されるまで近傍幅は拡大、縮小し続け、並列探索を行う。なお、近傍幅の分岐後は、これまでの探索で最良値を得た探索点から探索を再開する <sup>3)</sup> .

##### 2.2 SA/AN ( BT ) の問題点

SA/AN ( BT ) を 3 次元の Rastrigin 関数に適用し、局所解に陥ったときのエネルギー値と近傍幅の履歴を Fig. 2 に示す。

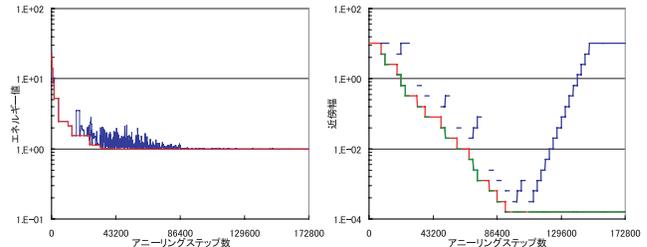


Fig. 2 エネルギー値と近傍幅の履歴 ( Rastrigin 関数 )

SA/AN ( BT ) では、局所解に陥ったとき、小近傍で局所的探索が進まなく、大近傍で大域的探索をしているにも関わらず、局所解を抜け出すこともできず、探索が途中で停滞してしまうことが多い。これは、大近傍で設計変数空間全体を探索しても、局所解を抜け出す可能性は低いためであると考えられる。

本研究の目的は、既存の手法であるこの SA/AN ( BT ) に対し、大小近傍幅の間に中近傍を設けることにより、全体的な解精度の向上を図ることである。

#### 3 提案手法のアルゴリズム

提案手法 ( PSA/AN ( 3N ) ) のフローチャートを Fig. 3 に示す。従来の SA に点線部分の処理を加えている。クーリング周期内で、一定周期 ( 同期間隔 ) ごとに、最良解の更新が行われたかどうかを 3 つのプロセスについて判定する。その後、それぞれの条件に応じて次周期での近傍幅を決定する ( 近傍調節 ) 。なお、同期後は 3 つのプロセス中での最良点から探索を再開する。

このメカニズムでは、近傍幅の異なる 3 つのプロセスに対して解精度を比較することにより、複数の近傍幅を序々に拡大および縮小していくことができる。そのため、現在の探索における適切な近傍幅を決定することが

できる．さらに，局所解に陥った場合に近傍幅の拡大操作によって局所解から抜け出し，最適解領域に到達した場合には近傍幅の縮小操作によって局所的探索を行うことが期待できる．このように，提案手法は探索状況に応じて様々な近傍幅をとり得るため，効率の良い探索が可能であると考えられる．

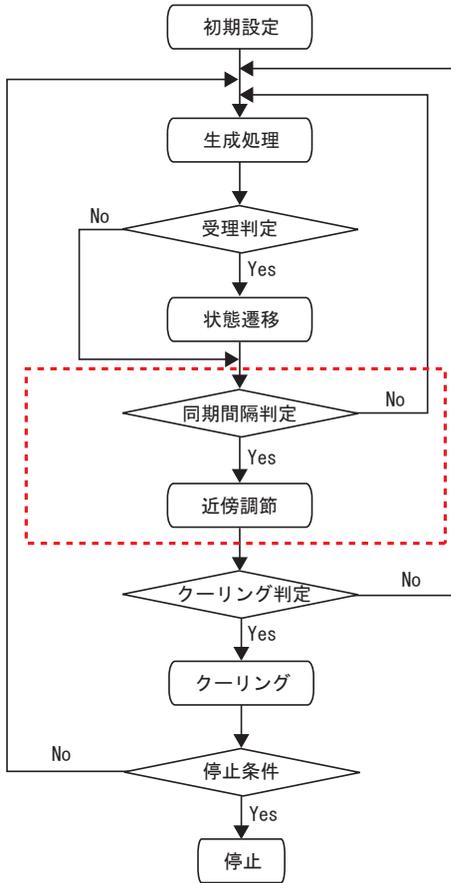


Fig. 3 PSA/AN(3N) のフローチャート

提案手法 PSA/AN(3N) の概念図を Fig. 4 に示す．

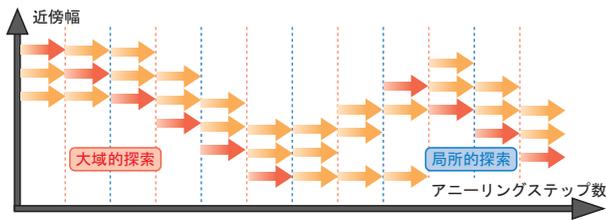


Fig. 4 PSA/AN(3N) の概念図

大中小の3つの近傍があり，最良値の更新があるとき，次周期における近傍幅は，解更新があった近傍を中近傍として探索を続ける．一方，最良値の更新がないとき，中近傍をそのままにして，大近傍を拡大し，小近傍を縮小させる．それでも更新がないとき，再びこの操作を繰り返す．

提案手法における近傍調節アルゴリズムを Fig. 5 に示す．

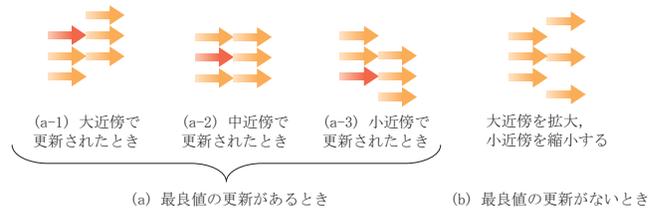


Fig. 5 3 並列型近傍調節アルゴリズム

大近傍，中近傍，小近傍を，それぞれ  $N_l, N_m, N_s$ ，拡大率を  $r$  とすると，それぞれの場合において，次周期における3つの近傍幅は次式によって定められる．

(a-1) 大近傍で最良値が更新されたとき

- $N_{l_{next}} = N_{l_{current}} \times r$
- $N_{m_{next}} = N_{m_{current}} \times r (= N_{l_{current}})$
- $N_{s_{next}} = N_{s_{current}} \times r (= N_{m_{current}})$

(a-2) 中近傍で最良値が更新されたとき

- $N_{l_{next}} = N_{m_{current}} \times r$
- $N_{m_{next}} = N_{m_{current}}$
- $N_{s_{next}} = N_{m_{current}} \times 1/r$

(a-3) 小近傍で最良値が更新されたとき

- $N_{l_{next}} = N_{l_{current}} \times 1/r (= N_{m_{current}})$
- $N_{m_{next}} = N_{m_{current}} \times 1/r (= N_{s_{current}})$
- $N_{s_{next}} = N_{s_{current}} \times 1/r$

(b) 最良値の更新がない(拡大・縮小する)とき

- $N_{l_{next}} = N_{l_{current}} \times r$
- $N_{m_{next}} = N_{m_{current}}$
- $N_{s_{next}} = N_{s_{current}} \times 1/r$

ただし，大近傍が近傍幅の上限に達したときに，大近傍で最良値が更新されたり，更新がなく拡大するときは，Fig. 6 のように，大近傍が上限を超えないようにする．

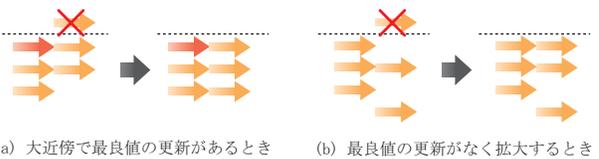


Fig. 6 大近傍の上限処理

同様に，小近傍が近傍幅の下限に達したときに，小近傍で最良値が更新されたり，更新がなく縮小時きは，Fig. 7 のように，小近傍が下限を超えないようにする．また，中近傍は大近傍にともない拡大する．

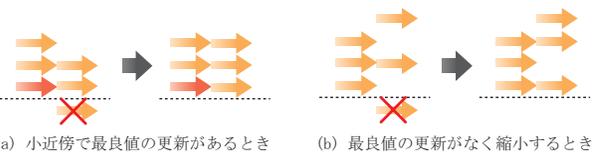


Fig. 7 小近傍の下限処理

なお，小近傍で最良値が極小の精度で更新され，探索過程に無駄が生じることを防ぐため，下限において小近傍で最良値が更新されたときは，3つの近傍幅を変化させないことにしている．

## 4 数値実験

### 4.1 パラメータ

PSA/AN(3N) の性能を検証するために、一定近傍幅を用いる SA(SA/FN)、近傍幅縮小機能をもつ SA(SA/DN)、独立型並列 SA(PSA)、2分木型近傍調節機能をもつ SA(SA/AN(BT)) との性能比較を行った。

対象問題は、Rastrigin 関数、Griewank 関数、Schwefel 関数の 3 種類とし、いずれも多峰性の数学的テスト関数である。なお、次元数は 3 としている。

実験に用いた各手法のパラメータを、Table. 1, Table. 2, Table. 3 にそれぞれ示す。

また、温度スケジューリングについては、いずれの手法においても、最高温度、最低温度、クーリング回数値をすべて同じにしており、これらと固定近傍幅については、予備実験により求めた最良の値を用いている。

さらに、すべての手法の評価計算回数をそろえるため、SA/AN(BT) は、SA/FN, SA/DN に対し、総ステップ数を 1/2 に、PSA, PSA/AN(3N) は 1/3 としている。

Table. 1 Rastrigin 関数のパラメータ

パラメータ	手法				
	SA/FN	SA/DN	PSA	SA/AN(BT)	PSA/AN(3N)
総ステップ数		345600	115200	172800	115200
最大近傍幅	1.0	10.24	1.0	10.24	
最小近傍幅		$10.24 \times 10^{-5}$		$10.24 \times 10^{-5}$	
同期間隔				2700	1800
拡大率				2.0	2.5
最高温度					10.0
最低温度					0.01
クーリング数					32

Table. 2 Griewank 関数のパラメータ

パラメータ	手法				
	SA/FN	SA/DN	PSA	SA/AN(BT)	PSA/AN(3N)
総ステップ数		345600	115200	172800	115200
最大近傍幅	5.0	1024	5.0	1024	
最小近傍幅		$1024 \times 10^{-5}$		$1024 \times 10^{-5}$	
同期間隔				900	900
拡大率				1.1	1.2
最高温度					20.0
最低温度					0.001
クーリング数					32

Table. 3 Schwefel 関数のパラメータ

パラメータ	手法				
	SA/FN	SA/DN	PSA	SA/AN(BT)	PSA/AN(3N)
総ステップ数		345600	115200	172800	115200
最大近傍幅	746	1024	746	1024	
最小近傍幅		$1024 \times 10^{-5}$		$1024 \times 10^{-5}$	
同期間隔				1350	1200
拡大率				2.0	2.0
最高温度					20.0
最低温度					0.001
クーリング数					32

### 4.2 実験結果

100 回試行したときの結果を、Rastrigin 関数は Fig. 8 に、Griewank 関数は Fig. 9 に、Schwefel 関数は Fig. 10 に示す。それぞれの右側のグラフは、各試行の最良値を昇順に並び替えたエネルギー値分布を表している。

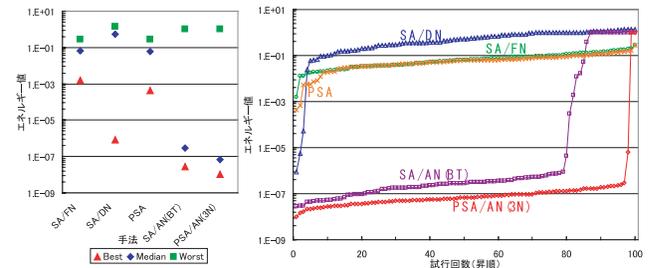


Fig. 8 エネルギー値の分布 (Rastrigin 関数)

Rastrigin 関数の準最適解は、約 0.9949590 であり、いずれの手法も局所解に陥ることがある。しかし、中でも PSA/AN(3N) が最適解領域に到達する割合は SA/AN(BT) よりも高くほぼ 100% であり、これらは最良値で SA/DN を上回る高い解精度を示している。

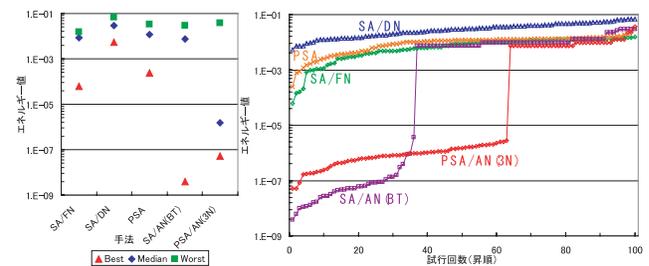


Fig. 9 エネルギー値の分布 (Griewank 関数)

Griewank 関数の準最適解は、約 0.0073960 である。SA/DN ではすべてが局所解に陥っており、SA/FN, PSA では 10% 程度しか最適解領域に入っていない。一方、SA/AN(BT), PSA/AN(3N) では、いずれも最適解領域に入ってから局所的探索に強く最良値の精度が高い。また、SA/AN(BT) の方が PSA/AN(3N) よりも最良値の精度が高い。これは、SA/AN(BT) が最適解領域に入った後、アニーリングステップ数が多い分だけ長く局所的探索を行うことができるためであると考えられる。

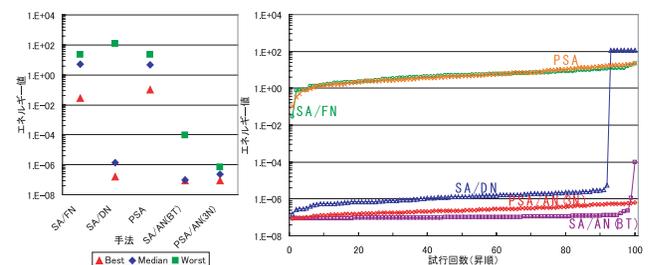


Fig. 10 エネルギー値の分布 (Schwefel 関数)

固定近傍幅を用いている SA/FN, PSA では、局所的探索に弱く、最良値の精度が低い。また、SA/DN は局所解に陥ることがある。一方、SA/AN(BT) の方が

PSA/AN(3N) よりも全体的な解精度が高い。これも Griewank 関数の場合と同様の理由であると考えられる。

Rastrigin 関数と Griewank 関数において、各手法が最適解領域へ到達した割合を Table. 4 に示す。

Table. 4 各手法の最適解領域への到達率

関数	最適解領域への到達率[%]				
	SA/FN	SA/DN	PSA	SA/AN(BT)	PSA/AN(3N)
Rastrigin	100	72	100	86	98
Griewank	44	1	26	36	63

いずれの関数においても、提案手法の最適解領域への到達率は高い。

## 5 アルゴリズムの有効性

### 5.1 近傍幅拡大による局所解からの脱出

それぞれの関数における 1 試行のエネルギー値と近傍幅の履歴を、Fig. 11, Fig. 12, および Fig. 13 に示す。

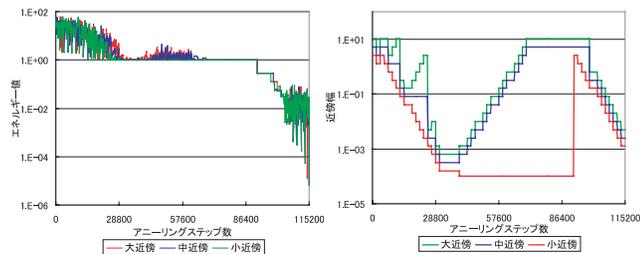


Fig. 11 エネルギー値と近傍幅の履歴 (Rastrigin 関数)

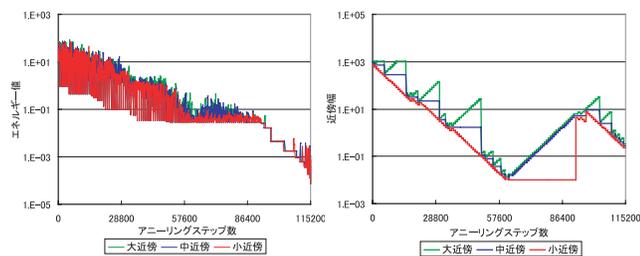


Fig. 12 エネルギー値と近傍幅の履歴 (Griewank 関数)

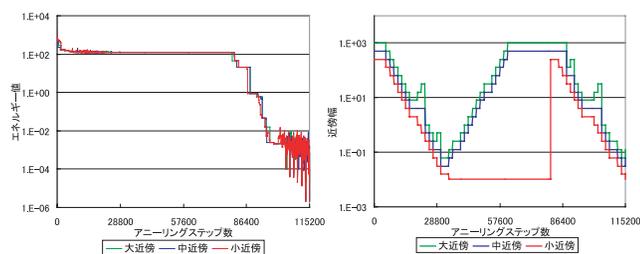


Fig. 13 エネルギー値と近傍幅の履歴 (Schwefel 関数)

いずれの探索においても、局所解に陥った場合、近傍幅が拡大することで局所解を抜け出している。その後、局所的探索を行い、高い解精度が得られている。以上より、近傍幅が拡大することで局所解を抜け出すというアルゴリズムが機能していることが確認された。

### 5.2 中近傍の近傍調節メカニズムの検討

前節までの実験では、小近傍が下限にあるとき、最良値の更新がなければ中近傍を大近傍にともない拡大させていた。ここでは、中近傍を大近傍にともない拡大させたときと、小近傍とともに下限にとどまり拡大しないときの比較、検討を行う。Rastrigin 関数, Griewank 関数に適用した結果を Fig. 14 に示す。

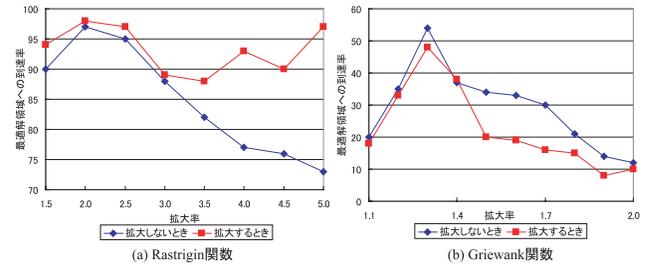


Fig. 14 中近傍の拡大の影響

Rastrigin 関数については、近傍幅が 1.0 付近を超えないと局所解を抜け出すことができない。そのため、中近傍を大近傍にともなって拡大し、大域的探索を行う方が、局所解を抜け出す可能性が向上する。その結果、最適解領域への到達率が高くなっている。

Griewank 関数については、局所解に陥ったとき、近傍幅をあまり拡大しなくても、局所解を抜け出すことができる。あらかじめ決めておいた近傍幅の下限付近で探索することが、最も効率が良いと考えられる。そのため、中近傍を小近傍とともに下限にとどませ拡大しない方が最適解領域への到達率が高くなっている。

以上より、中近傍の処理については対象問題に依存するが、中近傍の影響は大きいことが確認された。

## 6 まとめ

本報告では、連続最適化問題において重要となる近傍に着目し、適応的に近傍幅を調節するアルゴリズム, PSA/AN(3N) を提案した。PSA/AN(3N) は、従来の手法に比べ、高い解精度を示した。よって、PSA/AN(3N) は、有効な手法であることが実証された。

今後の課題として、SA/AN(BT) と同様に、単独プロセスで探索し、解精度の更新がなくなれば分岐させ、近傍幅の異なる複数プロセスで並列探索させるアルゴリズムを目指す。さらに、中近傍の拡大方法について検討する必要がある。

## 参考文献

- 1) 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 pp.875-880, 1997.
- 2) 小野 景子, 三木 光範, 廣安 知之. 最適な受理確率を目標とする適応的近傍をもつシミュレーテッドアニーリング. 2003
- 3) 宮崎 真, 三木 光範, 廣安 知之. 同志社大学工学部知識工学科卒業論文. 2 分木を用いた近傍幅調節機能を持つシミュレーテッドアニーリング. 2005