Adaptive Simulated Annealing の基礎

平尾 洋樹

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 [1]．

本研究室においては，これまでに SA について様々な研究がなされてきた．数々の手法が開発され，その有効性は既に数学的テスト関数，および実最適化問題において示されているが，これらを世界的に普及させるためには，さらなる有効性の実証が必要とされる．

そこで, 最適化ソフトウェア iSight に組み込まれている手法である適応的 SA(Adaptive Simulated Annealing：ASA)[2] と性能比較を行い，既存の手法のアルゴリズムを改良することが次の目標となる．本報告では，その初段階として ASA についての基礎的な事項を紹介する．

2 ASA のアルゴリズム

様々な物理問題は n 次元の設計変数空間を持ち，異なる設計変数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 は通常の SA より効率的な探索が可能なアルゴリズムであるとされている [3, 4]．そのフローチャートを Fig. 1 に示す．

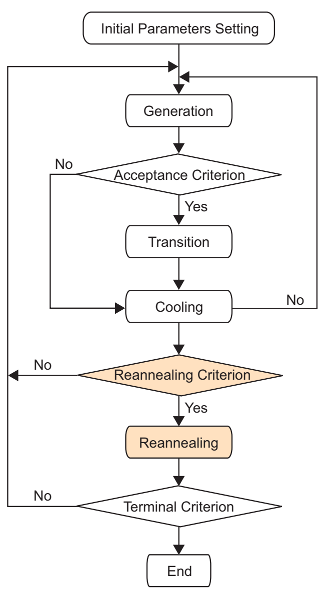


Fig.1 ASA のアルゴリズム (出典：自作)

一般の SA では，生成処理，受理判定，状態遷移を繰り返した後にクーリングを行う．一方，ASA では生成処理，受理判定，状態遷移，クーリングを繰り返した後に，リアニーリングと呼ばれる手続きが追加されている．

2.1 生成処理

生成処理では，現在の状態 α_k から次に遷移する状態 α_{k+1} を返す．各次元 i での現在の状態 α_k^i が設計変数空間 $[A_i,\ B_i]$ 内にあるとき，式 (1) により次状態が生成される．ただし，α_{k+1}^i が範囲を超えれば再度試行する．

$$\alpha_{k+1}^i = \alpha_k^i + y^i(B_i - A_i),\ y^i \in \{-1,\ 1\} \qquad (1)$$

変数 y^i は式 (2) に示す生成関数から求められる．

$$y^i = sgn(u^i - \frac{1}{2})T_i[(1+\frac{1}{T_i})^{|2u^i-1|} - 1], \qquad (2)$$
$$u^i \in U\{0,\ 1\}$$

なお，T_i は各次元の温度を，ln は底が e の自然対数を表している．また，sgn 関数は式 (3) に示す値を返す．

$$sgn(x) = \begin{cases} 1 & if\ x > 0 \\ 0 & if\ x = 0 \\ -1 & if\ x < 0 \end{cases} \qquad (3)$$

y_i の確率密度関数は式 (4) で表され，Fig. 2 に示すように，温度パラメータ T_i によってその形状が変化する．

$$G_{T_i}(y_i) = \prod_{i=1}^{D} \frac{1}{2(|y^i| + T_i)ln(1 + 1/T_i)} \qquad (4)$$

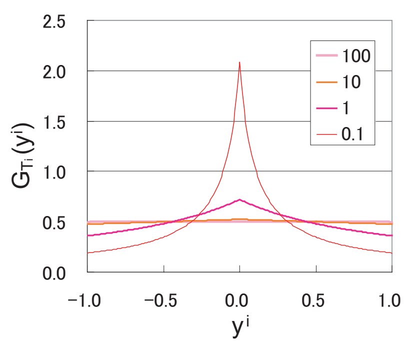


Fig.2 生成確率分布の形状 (出典：自作)

温度パラメータが大きい場合，その形状は限りなく一様分布に近くなる．一方，温度パラメータが小さい場合，先の尖ったペン先のような形状になる．

2.2 受理判定

受理判定では，生成された次状態 α_{k+1} のエネルギー $E(\alpha_{k+1})$ と現在の状態 α_k のエネルギー $E(\alpha_k)$ との差分，および温度 T_{cost} を用いて次状態へ推移するか否かを決定する．受理判定には，式 (5) に示す Metropolis 基準が用いられ，改悪方向にも確率的に遷移する．

$$\exp\left(-\frac{E(\alpha_{k+1}) - E(\alpha_k)}{T_{cost}}\right) > U,\ U \in [0,\ 1) \qquad (5)$$

2.3　クーリング

クーリングには，式 (6)，式 (7) に示すように，いずれも指数型アニーリングが用いられている．このように ASA では，生成処理用の T_i と受理判定用の T_{cost} の 2 種類の温度があり，これらは互いに独立して変化する．

なお，T_{0i}，T_{0cost} は初期温度を，k_i はアニーリングステップ数，k_{cost} は受理回数を，c_i および c_{cost} は定数を表しており，式 (6) においては，各次元ごとに定める．

$$T_i(k_i) = T_{0i} \exp(-c_i k_i^{1/D}) \tag{6}$$

$$T_{cost}(k_{cost}) = T_{0cost} \exp(-c_{cost} k_{cost}^{1/D}) \tag{7}$$

2.4　リアニーリング

ASA は通常の SA とは異なり，リアニーリング (Reannealing) によって温度 T_i と，生成に用いられる確率分布が探索途中に再設定される．リアニーリングは SA の実行状況を定期的に自己監視して，目的関数に対する影響度 (感度) の高さに応じて次元ごとに生成方法を変える．

感度の高い次元では確率分布の形状は先の尖ったペン先型のようになるため，裾野が狭くなるように縮められる．一方，感度の低い次元では，確率分布の形状は一様分布に近くなるため，裾野が広くなるように伸ばされる．各次元の感度はそれまでの探索での最良点における目的関数の (擬似) 偏微分係数として，式 (8) で与えられる．

$$S_i = \left| \frac{\partial L}{\partial \alpha^i} \right| \tag{8}$$

各設計変数 α^i における感度は S_i であり，その中で最大の感度である S_{max} との比で再設定する温度を決める．式 (8) で求めた感度 S_i および最大の感度 S_{max} により，式 (9) に示すように新しい温度パラメータ T_i' を求める．

$$T_i' = T_i \frac{S_{max}}{S_i} \tag{9}$$

次に，式 (10) に示すように温度を再設定するために用いるパラメータ k_i' を求める．

$$k_i' = \left(\frac{ln(T_i/T_i')}{c_i} \right)^D \tag{10}$$

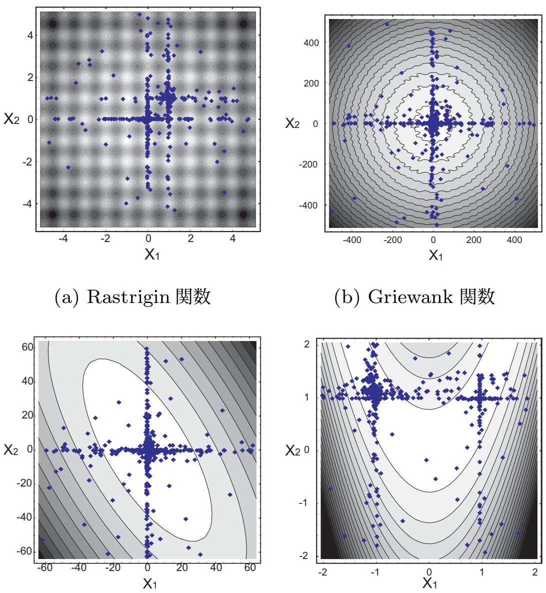
最後に，式 (10) により求めた k_i' を用いて，式 (11) に示すように，各次元において温度が再設定される．

$$T_i(k_i) = T_{0i} \exp(-c_i {k'}_i^{1/D}) \tag{11}$$

3　生成メカニズムの検討

ASA の生成処理では式 (1) により次状態を生成する．2 次元のテスト関数である Rastrigin 関数，Griewank 関数，Ridge 関数，および Rosenbrock 関数に ASA を適用した結果，生成点の分布に大きな特徴が見られた．得られた生成点の分布をそれぞれ Fig. 3 に示す．

Fig. 3 より，いずれの関数においても，生成点が十字に分布していることがわかる．そこで，なぜ ASA の生成点はこのような十字の分布になるのか検討を行う [5]．



(a) Rastrigin 関数　　(b) Griewank 関数

(c) Ridge 関数　　(d) Rosenbrock 関数

Fig.3　生成点の分布 (出典：参考文献 [5] より引用)

ここで，生成処理における式 (1)，式 (2) に注目する．これらに用いられている変数は，近傍幅を決定するパラメータ y^i，y^i を求めるために必要な $[0,1]$ の一様分布 u^i，そして各次元における温度 T_i である．

式 (2) より，ASA においては各次元の近傍の設計に温度パラメータが関係しているが，その値は極めて小さくなることがわかっている [5]．したがって，式 (2) を式 (12) のように近似することができる．ここでは簡略化のため，y^i の符号を与える sgn 関数は省略する．

$$y^i = T_i (\frac{1}{T_i})^{|2u^i - 1|}, u^i \in U\{0,\ 1\} \tag{12}$$

式 (12) より，一様分布 u^i の値によって y^i と近傍幅がどのように変化するか想定した結果を Table 1 に示す．

Table1　u^i と y^i の関係 (出典：参考文献 [5] より引用)

u^i	y^i	近傍幅
$u^i \cong 1$	$y^i \cong 1$	大
$u^i \cong 1/2$	$y^i \cong T_i$	小 (温度の影響)
$u^i \cong 0$	$y^i \cong 1$	大

Table 1 より，u^i と y^i に対する近傍幅の変化は，以下のいずれかの場合に分類できる．

1. u^i が 1 または 0 付近の場合
   y^i の値の増大に伴い近傍幅は大きくなる．
2. u^i が 1/2 付近の場合
   y^i の値は温度パラメータに依存するため小さくなる．それに伴い近傍幅は小さくなる．

上記の想定を基に，実際に式 (2) を用いて一様分布 u^i の値によって y^i がどのように変化するかについて，2 次元の Rastrigin 関数に適用し検証を行った．

得られた u^i と y^i の分布を Fig. 4 に示す．なお，横軸は u^i の値，縦軸は得られた y^i の値を示している．

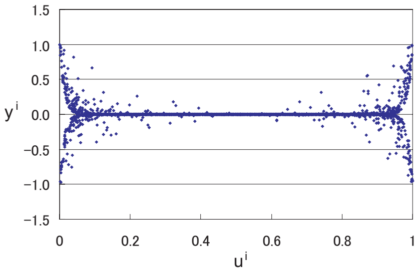


Fig.4　u^i と y^i の関係 (出典：参考文献 [5] より引用)

Fig. 4 より，u^i が 0 または 1 付近の場合，y^i の絶対値は大きくなっていることが確認できる．このとき，式 (1) より，近傍幅が大きくなっていることがわかる．一方，u^i が 1/2 付近の場合，y^i の絶対値は限りなく 0 に近い．これは，式 (12)，Table 1 より y^i の決定に温度パラメータが影響し，かつ ASA では各次元の温度パラメータが小さいことが要因であると考えられる．そのため，生成処理に用いる式 (1) より，近傍幅も小さくなっている．

以上より，ASA では u^i によって y^i および近傍幅が決定されるという特徴を確認できる．その特徴を基に，2 変数の場合における設計変数 x_1，x_2 の挙動を Fig. 5 に示す．ここでは，横軸を x_1，縦軸を x_2 とした．

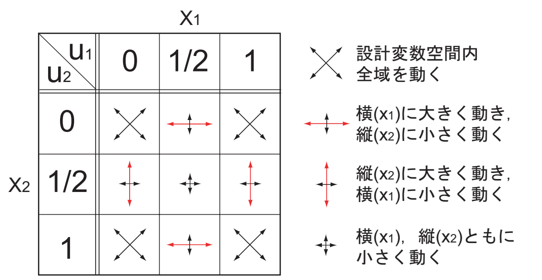


Fig.5　一様分布の乱数 u^i による設計変数の挙動 (出典：参考文献 [5] より引用)

Fig. 5 より，2 変数の場合における設計変数の挙動は，以下の 3 つの場合に分類できる．

1. u^1，u^2 の両方ともが 1/2
   Fig. 4 より各次元の y^i は，温度パラメータの影響のため限りなく 0 に近くなり，近傍幅も小さくなる．そのため，x_1，x_2 はごくわずかしか変動しない．
2. u^1，u^2 のいずれかが 1/2，かつ他方が 0 または 1
   Fig. 4 より u^1 が 1/2 の場合，x_2 における y^2 の値は大きくなり近傍幅も大きくなる．x_1 における y^1 は温度パラメータの影響から限りなく 0 に近くなるため近傍幅も小さくなる．したがって，x_2 の変動は大きくなり x_1 の変動はごくわずかになるため水平に動く．一方 u^2 が 1/2 の場合，x_2 の変動はごくわずかになり x_1 の変動は大きくなるため垂直に動く．
3. u^1，u^2 の両方が 0 または 1
   Table 1，Fig. 4 より各次元の y^i の値は大きくなるため，それに伴い近傍幅も大きくなる．

以上のメカニズムにより，ASA の生成点が十字に分布すると考えられる．

4　まとめ

本報告では，通常の SA よりも効率的な探索が可能とされている適応的 SA(ASA) のアルゴリズムおよび生成メカニズムについて調査を行った．

ASA では，一般の SA と同様に受理判定に用いる温度の他に，各次元が温度パラメータを持つ．この温度パラメータは，各次元ごとの生成処理に影響を及ぼしている．

一般に連続最適化問題に SA を適用する場合，次状態の生成に用いられる確率分布は一様分布または正規分布であるのに対し，ASA では，先の尖ったペン先型の形状となる確率分布を用いる．この確率分布は，各次元が持つ温度パラメータによって形状が変化する．

ASA を 2 次元の連続最適化問題に適用したところ，生成点の分布が十字になることがわかった．その生成点の分布は，次状態を生成する際に用いられる一様分布，すなわち近傍幅が各次元によって異なるためである．

今後の方針として，ASA を実装し，本研究室で開発した SA との性能比較を行い，アルゴリズムの改良を行う．さらに，良好な結果が得られた場合には，最適化ソフトウェア iSight への組み込みも共同研究として検討する．

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) L.Ingber.　Adaptive simulated annealing (asa) : Lesson learned.　*Control and Cybernetics*, 1995. http://www.ingber.com/.

3) L.Ingber.　Genetic algorithms and very fast simulated reannealing.　A Comparison, Mathematical and Computer Modeling, Vol. 16, No. 11, pp. 87–100, 1992.

4) L.Ingber. Simulated annealing: Practice versus theory.　*Journal of Mathl. Comput. and Modelling*, Vol. 18, No. 11, pp. 29–57, 1993.

5) 昌山智, 廣安知之, 三木光範．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．同志社大学工学部知識工学科卒業論文, 2004.