適応型シミュレーテッド・アニーリング法による最適化

苫小牧工業高等専門学校　三上　剛

概　要

最適化問題において，局所解にトラップされることなく良好な解を獲得する手法として，シミュレーテッド・アニーリング(SA)法が提案されている．しかし SA 法は，実用的な冷却スケジュールの設計が困難であり，また，解の獲得まで膨大な時間を要するという欠点を有している．本稿では，以上の点を改善した適応型シミュレーテッド・アニーリング法を提案し，その特性について検証する．

1　はじめに

シミュレーテッド・アニーリングは，大域的最適解への収束が理論的に保証されているが，それには膨大な計算時間が必要とされている．また，適切な冷却スケジュールを行わないと，局所解へ収束することが指摘されており，大きな問題点となっている．本研究では，シミュレーテッド・アニーリングの冷却スケジューリングについて着目する．

従来，提案されてきた冷却法は，長時間経過に伴う温度パラメータ T の減少度合い（冷却スケジュール）に着目している．たとえば，Szu は 1987 年に Fast Simulated Annealing，Ingber は 1989 年に Very Fast Simulated Re-annealing と呼ばれる冷却スケジュールを提案し，探索時間の減少に成功した．　また近年，マルチプロセッサを用いた多点探索の SA 法が提案されており，探索時間の大幅な減少が試みられている．

本研究は，これまで提案されてきた「長時間経過に伴う温度パラメータの減少」という観点ではなく，「評価値そのものを扱う」ことによって，温度パラメータの設計を行う．つまり，探索過程における時間依存性を低くして，空間的な概念によって探索領域の絞り込みを行うものである．その効果として，従来の SA 法に見られる，探索領域の絞り込みに際して膨大な時間を要するという欠点を改善し，迅速に解へ収束させることが可能である．

2.　古典的 SA と高速 SA

評価関数 $E(x)$の最小化問題を考える．SA 法では，新たな探索に際し，$x'=x+dx$ と更新し$\Delta E=E(x')-E(x)$を計算する．そして，以下のメトロポリスの方法に基づき，探索点 x'について判断を行う．

$$\begin{cases} \Delta E<0 \text{ のとき } x=x' \\ \Delta E>=0 \text{ のとき受理確率} \exp(-\Delta E/T) \text{に従って } x=x' \end{cases}$$

また，時間経過に伴って，温度パラメータ $T(k)$を減少させていき，$T(k)=0$ となったところで最適解へ収束する（ただし k は時間を表す）．移動量 dx については，Gauss 分布に基づき確率的に定める．その結果，温度パラメータの冷却スケジュールを $T(k)=T(0)/\ln(1+k)$として探索を行うと，確率 1 で大域的最適解へ収束することが保証されている．これを古典的シミュレーテッド・アニーリングという．

Szu は，Gauss 分布の代わりに Cauchy 分布を用いた手法を提案し，その結果，$T(k)=T(0)/(1+k)$の冷却スケジュールで大域的最適解へ到達することを示し，これを高速 SA という．古典 SA 法における冷却スケジュールと比較すると，大幅に計算時間の短縮が実現されている．しかし，双方とも時間 k を陽に用いて冷却スケジュールを行っており，解に収束するまでには膨大な時間がかかるる．実際には，対象とする問題に応じてその都度，冷却スケジュールを設計しているのが現状である．このことが，SA 法の最大の欠点であり，実用性に乏しいと言われている原因となっている．

以上の点に着目し本稿では，あらゆる問題に対して現実時間内で最適解を獲得する冷却スケジュール法を提案し，それを適応型シミュレーテッド・アニーリングと呼ぶことにした．

3.　適応型シミュレーテッド・アニーリング

3-1 評価関数の整形

評価関数の整形は，津田が提案した手法で，評価値を指数関数的に増大させることによって，局所解における評価値と最適解における評価値の差を明確にする手法である．具体的には，以下の式を用いる．

$$\Phi(\gamma, E_0, E(x)) = \exp(\gamma(E(x) - E_0))$$

γは整形の度合いを示すパラメータであり，E0 は評価値をシフトする定数である．この二つのパラメータを適切に調整することにより，$\Phi(E(x))$は，最適解でのみピークを持つ単峰性の関数に整形できる[5]．

適応型シミュレーテッド・アニーリングでは，関数$\Phi(E(x))$を，SA 法における確率分布に置き換える．すなわち，$\Phi(E(x))$の値は，$\Delta E<0$ の方向へ探索を進める確率であり，$1-\Phi(E(x))$は，SA 法の特性である「改悪方向への探索も許す」確率として定義する．これにより，局所解においてピーク値が残っていても，確率的な判断で探索を進めるため，局所解に止まっている可能性は低くなる．

実用上問題となるのは，γ，E0 の適切な調整法であるが，これに関しては，以下の手法を用いる．

① 探索の初期において，探索領域内で N0 個（少数）の点を一様にランダムにとり，各々の点における評価値を獲得する．
② 獲得された評価値の中で，最小値を Emin，最大値を Emax として定める．
③ E0=Emin とし，γは，Emax を釣り上げた際，オーバーフローを起こさない程度に決定する．

γ，E0 の値は，正確に定めなくても，整形の効果は十

分現れる．

3-2 温度パラメータの調整

前処理によって，パラメータγ，E0 を定めることが可能であるが，探索の当初から関数Φ(E(x))を確率的な判断基準として用いると，最適解獲得に際して非常に困難となる．その原因は，Φ(E(x))=0 の領域では，確率1で改悪方向への探索を許すことにある．このことは，完全なランダムウォークを行っていることに等しく，探索空間が広大な場合，Φ(E(x))=1 近傍へ探索が進むことは絶望的といって良い．

この点に考慮し，探索の初期においては，γ=0 とおくことを考えた．γ=0 の時は，全探索領域において Φ(E(x))=1 となるため，ΔE<0 方向のみを許す（改善方向のみの探索を許す）アルゴリズムとなる．

改善方向のみを許すアルゴリズムで探索を行うと，粗い広域探索によって，最適解の存在する領域にある程度の見通しをたて，その後，探索領域を狭めて局所探索を行うことが可能となる．これは，遺伝的アルゴリズムにおける Crossover，Mutation と共通する特性である[4]．

3-3 本手法の特長

パラメータγは，SA 法における温度パラメータ T と等価である．ただし，SA 法では温度 T の更新は，探索点の評価値に依存しない時間経過 k のみを考慮した冷却方法である．本手法は，γの更新に際して時間kを陽に用いておらず，過去の探索履歴 Emin，Emax のみに依存している．したがって，冷却スケジュールにおける時間kと評価値 E(x)との関連を考慮する必要はない．従来の SA 法は，改悪方向を許した結果生じる最適性と時間 k との関連を考慮しながら，冷却の度合いを設計してきたが，本手法はこのような点を全く考慮せずとも良い．

また，時間kに依存しないということは，評価関数が時間的に変動するような最適化問題へ適用可能であると考える．評価関数が変動することは評価値 E(x)そのものが変動することを意味するため，本手法を用いるとγの値も直ちに更新することが可能である．従来の SA 法では，環境が変動しても T→0 へと強制的に探索過程を制御しているため，評価値が変動しても新たに探索を行うことは不可能である．これは従来の最適化手法に共通に見られる欠点である．現在のところ，Goldberg が多倍長遺伝子を用いた GA を提案し，動的評価関数への対応が行われているが，決定的な手法にはなり得ていない[4]．

4 実験

本手法を用いて，以下の 3 種類の評価関数の最小化問題を解き，従来，提案されてきた古典的 SA，高速 SA との比較検証を行った．

(a). Michalewicz の評価関数

$$e(x) = x\sin(10\pi x) + 2$$

(b). Girewank の評価関数

$$e(x) = -10\cos x + x^2 / 2$$

表 1 は，初期値を変えて 100 回探索を行い，その平均値を表したものである．実験の結果，本手法を用いた探索手法が古典的 SA，高速 SA に比べ解の精度，収束速度双方において最も望ましい結果が得られた．

Michalewicz's function Optimal Solution x = -1.851

Method	Obtained Solution	Time (Iterations)
SA	-1.820±0.03	Over 10^6
FSA	-1.850±0.003	1200
Our Method	-1.851	253

Girewank's function Optimal Solution x = 0.000

Method	Obtained Solution	Time (Iterations)
SA	0.00±0.06	Over 10^6
FSA	0.000 ±0.001	1300
Our Method	0.001	421

表 1. 獲得した最適解とそれに要した時間

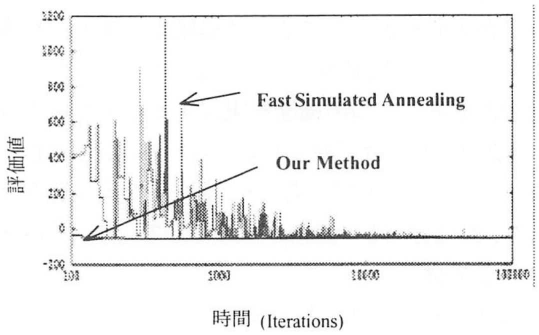

図 1. 高速 SA と本手法を用いた時の探索過程

5 おわりに

シミュレーテッド・アニーリング法の冷却スケジュールの困難性を軽減する手法として，本稿では時間を陽に用いないアニーリング計画を提案した．その結果，アニーリング計画の簡略化のみならず，解の最適性の向上，および収束時間の大幅な短縮が同時に可能となった．今後，組み合わせ最適化問題にみられるような，ランドスケープが非相関な評価関数へ適用した場合について検証する必要がある．また，評価関数が時間的に変動するような最適化問題に適用し，本手法の有効性を検証する必要がある．

参考文献

[1] Mikami, T., et al., "Fast Annealing Schedule by Landscape Enhancing for Function Optimization", *International Conference on Soft Computing (to appear)*. 2000

[2] Kirkpatrick, S., et al., "Optimization by Simulated Annealing", *Science, V.* 220, No. 4598, pp. 671 - 680, 1983

[3] Szu, H.H., "Fast Simulated Annealing", *Physical Letters A*, **122**: pp. 157-162, 1987

[4] Goldberg, D., " Genetic Algorithms, - Search, Optimization and Machine Learning -", The MIT Press, 1989

[5] 津田，"モンテカルロ法とシミュレーション"，培風館，1969