

Parallel Simulated Annealing with Adaptive Neighborhood using Different Target Acceptance Ratio

Hiroki HIRAO^{*}, Yuichiro UEDA^{**}, Mitsunori MIKI^{***} and Tomoyuki HIROYASU¹

(Received January 7, 2009)

This paper deals with a new approach in Simulated Annealing (SA), and proposes an adaptive neighborhood mechanism for continuous optimization problems. When applying SA to continuous optimizing problems with numerous local optima, the automatic control of the size of the neighborhood becomes necessary to obtain good performance. We have already proposed the method called Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood (SA/AAN). This method has an adaptive neighborhood adjustment mechanism maintaining a given target acceptance ratio, and it shows very good performance for continuous optimization problems. The target acceptance ratio in this method is determined experimentally. In order to overcome this problem, SA/AAN is performed in parallel with different target acceptance ratios. The proposed methods are applied to solve many continuous optimization problems, and it is found that the methods are very useful and effective.

Key words : optimization, simulated annealing, parallel, adaptive neighborhood

キーワード : 最適化, シミュレーテッドアニーリング, 並列, 適応的近傍

異なる受理率を目標とする適応的近傍を持つ 並列シミュレーテッドアニーリング

平尾洋樹・上田祐一郎・三木光範・廣安知之

1. はじめに

Simulated Annealing(SA) は, 焼きなましと呼ばれる加熱炉内の個体の冷却過程を計算機上で模倣した進化的最適化手法である¹⁾. SA には温度と近傍と呼ばれるパラメータがある. 特に連続最適化問題を対象とした場合, 近傍は現状態から次状態へ摂動し得る最大の範囲であり, 近傍幅と呼ぶ. 一般的に近傍幅が小さい場合は局所的な探索性能は向上するが局所最適解に収束しやすくなり,

逆に近傍幅が大きい場合は大域的最適解を得やすくなるが無駄な探索が多くなる. したがって, 近傍幅の設定が重要となる¹⁾. また, 対象問題ごとに適切な近傍幅を設定することは容易でない.

近傍幅に関する研究は多くなされてきた²⁾. 特に, 適切な受理率を目標とする適応的近傍を持つSA(Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood : SA/AAN)³⁾ は, 近傍幅を探索中の受理率を用いて適応的に自動調節できることから, 有効な手法とされている.

^{*} Graduate Student, Department of Knowledge Engineering and Computer Sciences, Doshisha University, Kyoto
Telephone:+81-774-65-6921, Fax:+81-774-65-6716, E-mail:hhirao@mikilab.doshisha.ac.jp

^{**} Graduate Student, Department of Knowledge Engineering and Computer Sciences, Doshisha University, Kyoto
Telephone:+81-774-65-6921, Fax:+81-774-65-6716, E-mail:yueda@mikilab.doshisha.ac.jp

^{***} Department of Knowledge Engineering and Computer Sciences, Doshisha University, Kyoto
Telephone:+81-774-65-6930, Fax:+81-774-65-6716, E-mail:mmiki@mail.doshisha.ac.jp

¹ Faculty of Life and Medical Sciences, Doshisha University, Kyoto
Telephone:+81-774-65-6932, Fax:+81-774-65-6019, E-mail:tomo@is.doshisha.ac.jp

しかし本手法では、目標受理率というパラメータが増える。この有効な値の範囲は限られているが、この範囲から経験的に与えるしかなく、探索状況によっては適切でない場合も考えられる。

一方で、近傍並列 SA (Neighborhood Parallel Simulated Annealing : NPSA)⁴⁾ は、異なる近傍幅の値を複数のプロセスに与え、同期を取りながら並列処理を行うことで、近傍幅の設定を自動化している。しかし本手法では、十分な近傍幅を与えるために多くのプロセッサが必要となる。

本研究ではこれら 2 手法からヒントを得、異なる目標受理率を複数のプロセッサに与えて探索するアルゴリズムを提案する。本手法により、探索状況に応じたパラメータを探索過程で適応的に調節し、かつ少ない並列数での効率的な探索が期待できる。本手法を代表的な数学関数最小化問題に適用し、その有効性を示す。

2. シミュレーテッドアニーリング (SA)

SA のアルゴリズムを Fig. 1 に示す。まず温度 T を初期設定した後、与えられた初期状態 x_0 から出発して次状態 x' を生成し、その評価値 E' を計算する。なお、次状態を生成し得る最大の範囲を近傍幅と呼ぶ。次に、評価値の差分 $\Delta E (= E' - E)$ と温度 T_k に応じて受理判定を計算し、受理の場合は次状態に推移する。受理判定には、式 (1) に示すメトロポリス基準を用いる。この処理を繰り返し、現在の温度 T_k で平衡状態に達したら、冷却処理を行い次の温度 T_{k+1} を求め、再び探索を進める。この冷却処理には、式 (2) を用いる。十分温度が下がり終了条件に達したら探索を終了する。なお、探索条件には温度や探索回数などが考えられ、本研究では探索回数を終了条件としている。

$$A(E, E', T) = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta E < 0 \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

$$T_{k+1} = \gamma T_k (0.8 \leq \gamma < 1) \quad (2)$$

3. 適切な近傍幅

3.1 対象問題

本研究で対象とする連続関数最小化問題は次に示す 2 つの関数である。式 (3) に示す Rastrigin 関数⁵⁾ は、局所解が格子状に存在する多峰性関数であり、設計変数間

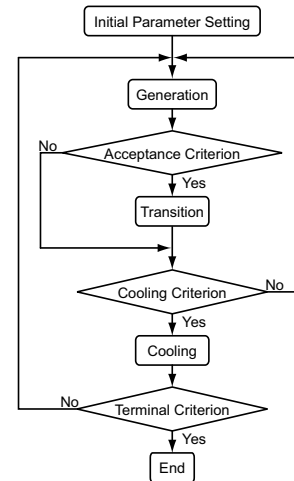


Fig. 1. Algorithm of Simulated Annealing.

に依存関係を持たない。式 (4) に示す Griewank 関数⁵⁾ は、設計変数間に依存関係を持つ多峰性関数である。大域的には単峰性関数のような性質をもつが、局所的には多数の局所最適解が存在する。

$$f_R(\mathbf{x}) = N \times 10 + \sum_{i=1}^N (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)) \quad (3)$$

定義域 : $-5.12 < x_i \leq 5.12$

$$\text{最適解} : f_R(\mathbf{x}) = (0, 0, \dots, 0) = 0$$

$$f_G(\mathbf{x}) = 1 + \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i^2}{4000} \right) - \prod_{i=1}^N \left(\cos \left(\frac{x_i}{\sqrt{i}} \right) \right) \quad (4)$$

定義域 : $-512 < x_i \leq 512$

$$\text{最適解} : f_G(\mathbf{x}) = (0, 0, \dots, 0) = 0$$

次元数を 3 とするとき、各関数の準最適解の値はそれぞれ約 9.94×10^{-1} 、約 7.4×10^{-3} である。本論文では、これよりも低い評価値をとる設計変数の領域を最適解領域と定義する。

3.2 近傍幅と解の関係

近傍幅が探索に与える影響として、近傍幅と解精度の関係を Fig. 2 に示す。なお Fig. 2 は、横軸に近傍幅、縦軸に評価値を示す。この評価値は、各関数において 30 試行探索を行って得た評価値の中央値を示す。

Fig. 2 より、3 次元の Rastrigin 関数では約 1.0、Griewank 関数では約 6.0 付近で評価値が良好であり、これらの値が最適な近傍幅の値と考えられる。またこれらの値は、局所解どうしの間隔付近の大きさである。このことから、近傍幅には良好な探索に繋がる値が存在し、

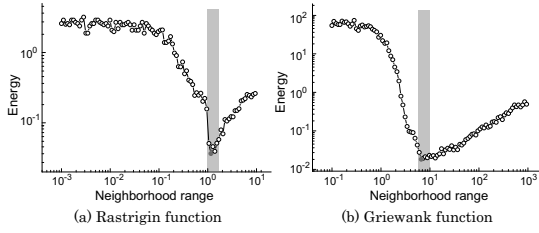


Fig. 2. Effect of the neighborhood range on the energy.

その値よりも小さい場合は局所解に陥りやすくなると考えられる。

4. 適切な受率率を目標とする SA

適切な受率率を目標とする適応的近傍を持つ SA(SA/AAN) は、指定した受率率を保つように近傍幅を適応的に調節する有効な逐次手法である。

ここで受率率とは、探索中に生成した一定数の次状態のうち受理した割合を表す。探索序盤で近傍幅が小さ過ぎる場合は、評価値の差が微小になり受率率が大きくなる。一方、探索終盤で近傍幅が大き過ぎる場合は、無駄な探索が多くなり受率率は小さくなる。

したがって、探索中の受率率に基づいて近傍幅を調節することで、様々な対象問題において探索状況に適応した近傍幅を得ることができると考えられる³⁾。

4.1 近傍幅調節メカニズム

SA/AAN のアルゴリズムは、式 (5) に示す階段関数を用いて探索中の受率率から近傍幅 m を決定する。すなわち、受率率が目標値の上限より高い場合は近傍幅を H 倍に増加させ、下限より低い場合は近傍幅を半分を縮小させる。このとき、近傍幅の拡大率 H を式 (6) のように再帰的に定義し、受率率が下がりにくいときは拡大率自体を増加させる。すなわち、拡大率の初期値を 2.0 とし、受率率が目標値の上限より高い場合は拡大率を 2 倍に増加させる。このメカニズムにより拡大率はいくらかでも大きな値をとり得る。

$$\begin{cases} m' = m \times g(p) \\ g(p) = H & \text{if } p > p_1 \\ g(p) = 0.5 & \text{if } p < p_2 \\ g(p) = 1.0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} H = H \times H(p'), & (\text{Initial setting : } H = 2.0) \\ H(p') = 2.0 & \text{if } p' > p_1 \\ H(p') = 0.5 & \text{if } p' < p_2 \\ H(p') = 1.0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6)$$

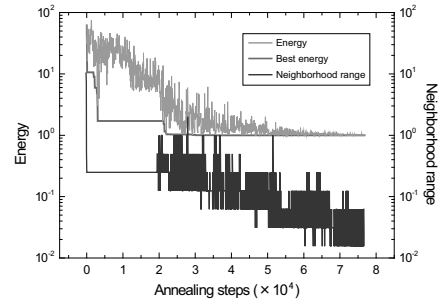


Fig. 3. History of energy and neighborhood range in SA/AAN.

ただし、アニーリング初期では温度が高いため、近傍幅が設計変数空間全体まで拡大しても指定した小さな受率率を実現しにくい。このため、探索序盤では Corana の手法⁶⁾を用いて受率率が 0.5 になるように近傍幅を調節する。その後、固定近傍幅で探索を行い、受率率が指定した値まで減少した後、小さな受率率を目指すアルゴリズムを用いる³⁾。

4.2 SA/AAN の問題点

SA/AAN では多くの場合に良好な探索を行えるが、探索終盤において探索が停滞してしまうこともある。

ここで、SA/AAN の目標受率率を 0.1 として Rastrigin 関数に適用したときの探索履歴を Fig. 3 に示す。

Fig. 3 では、最良値が更新されずに探索が停滞している。探索終盤では温度による改悪方向への遷移を受理しにくくなり、受率率が下がるため近傍幅が縮小傾向になる。そのため、局所解に陥っている場合にも近傍幅が適切な大きさまで拡大しない。さらに、一度局所解領域に陥り探索が進むと、次状態が改悪方向に生成される場合が多くなる。これに伴い受率率は低くなるため近傍幅がさらに縮小し、局所解から抜け出すことはより困難となる。

一方で、最適解領域に到達したにも拘わらず、良好な結果が得られない場合がある。これは近傍幅の拡大率自体を変化させるメカニズムを持つため、最終的に最適解領域に収束しない可能性を含むためであると考えられる。

5. 異なる受率率を目標とする並列 SA

SA/AAN においては、経験的に目標受率率を与え、探索中でその値を固定し近傍幅を調節していた。しかし、適切な受率率は探索状況によって異なるため、固定した

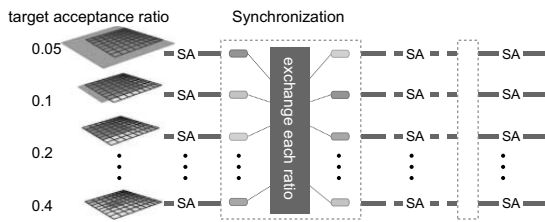


Fig. 4. Concept of ARPSA.

目標受率の値は必ずしも有効とは言えない。

一般に、探索序盤では大域的探索を行うために目標受率を低くし近傍幅を拡大させ、探索終盤では局所的探索を行うために目標受率を高くし近傍幅を縮小させることが望ましい。ただし、局所解領域に陥っているにも拘わらず目標受率が高い場合や、早期に最適解領域を発見したにも拘わらず目標受率が低い場合には探索に無駄が生じてしまう。

そこで、複数のプロセスを用い、探索状況に応じて目標受率を変化させるアルゴリズムとして「異なる受率率を目標とする適応的近傍を持つ並列SA(Parallel Simulated Annealing with Advanced Adaptive Neighborhood using Different Target Acceptance Ratio : ARPSA)」を提案する。本手法の概念図を Fig. 4 に示す。

提案手法のアルゴリズムは、並列プロセスに対してそれぞれ異なる目標受率を与え、一定周期ごとに全プロセスの同期をとりつつ探索を進める。同期時には、最良値が良好なプロセスから順に高い目標受率を与える。ただし、探索状況に応じた近傍幅調節を行うには、探索状況が安定した後に同期をとる必要がある。そのため、クーリング周期と同時に同期をとり、目標受率の再割り当てを行うこととする。

これにより最良値が良好なプロセスには、高い目標受率率が割り当てられ近傍幅が縮小傾向になり、その解付近の局所的探索をさらに進めることが期待できる。一方、最良値が良好でないプロセスには、低い目標受率率が割り当てられ近傍幅が拡大傾向になり、局所解に陥っていたとしても、その局所解から脱出し最適解領域に到達することが期待される。

6. アルゴリズムの検討

6.1 目標受率の交換

目標受率率が 0.1 と 0.4 のプロセスにおける近傍幅の履歴を Fig. 5 に示す。

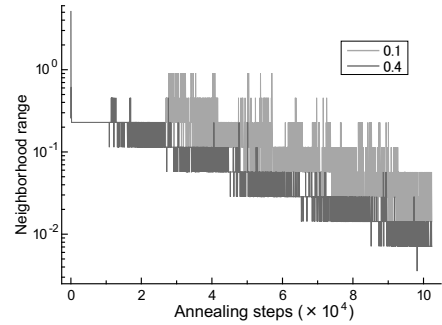


Fig. 5. History of the neighborhood range with different target acceptance ratio.

Fig. 5 より、目標受率率が 0.1 から 0.4 に高くなると、より小さな近傍幅を実現できることがわかる。したがって、良好なプロセスに高い目標受率率を与えることにより、高い解精度が得られたと考えられる。

しかし、最適解領域への到達率はほとんど変化がなく、準最適解から抜け出すことができなかった。これは探索終盤において、目標受率率を目指すために近傍幅が縮小傾向にあるため、一度近傍幅が縮小すると、局所解を抜け出すために必要な大きさまで拡大できないためであると考えられる。

6.2 近傍幅拡大メカニズム

前節の問題を解決するためには、目標受率率に関係なく近傍幅を拡大させる必要がある。各プロセスにおいて前周期に最良解の更新がなければ局所解に陥っていると判断し、受率率に関係なく全プロセスの近傍幅を設計変数空間全体の大きさまで拡大させる。近傍幅が拡大した直後に受率率は下がるが、目標受率率を目指すメカニズムのため、近傍幅は徐々に縮小する。ここで、探索終盤における 2 プロセスの評価値と近傍幅の履歴を Fig. 6 に示す。

Fig. 6 より、各プロセスにおいて近傍幅が上限まで拡大した後、縮小している間で最良値が更新されている。すなわち、近傍幅を拡大することで、局所解から抜け出していると考えられる。

6.3 同期後の探索開始点

近傍幅拡大メカニズムにより最適解領域に到達したにも拘わらず、領域の外に出てしまうこともある。最終的に最適解領域に収束させるためには、これまでに得た良好な探索点の情報を残す必要がある。そこで、同期後は各プロセスで得た最良点から探索を開始する。これによ

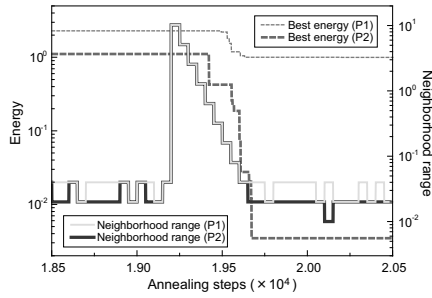


Fig. 6. History of energy and neighborhood ranges.

り、一度でも最適解領域に到達すれば、近傍幅が徐々に縮小し局所的探索を行うことで、高い解精度を得られることが保証される。

7. 数値実験

7.1 従来手法との比較

従来手法と提案手法の性能を比較した結果を Fig. 7 に示す。Fig. 7 は、各関数において以下の各手法で 100 試行ずつ行い、最良値を昇順に並び替えたものであり、縦軸に評価値、横軸に試行回数を示している。なお、パラメータは Table 1 に示す。

- 適切な固定近傍幅を用いる並列 SA : PSA/FN
- 適切な受率率を目標とする並列 SA : PSA/AAN
- 異なる受率率を目標とする並列 SA : ARPSA

また、PSA/FN における固定近傍幅は予備実験によって求めた適切な値を用いている。そして、PSA/AAN の目標受率率は従来良好とされている 0.1 とし³⁾、ARPSA の目標受率率は 0.05, 0.1, 0.2, 0.4 の 4 つの値とした。

Fig. 7 より、解精度については、いずれの関数においても、ARPSA が最も良好な結果を得ている。また、最適解領域への到達率は、(a)Rastrigin 関数では PSA/FN に劣るものの、(b)Griewank 関数では PSA/FN と同等の高い結果を得ている。ただし、PSA/FN の予備実験にかかる計算コストを考慮すると、提案手法が有効であると考えられる。よって、提案手法が従来手法より良好な結果を得ていると言える。

7.2 同期後の探索開始点の検討

6.3 節で、最適解領域への収束性を保証するため、同期後の探索開始点を各プロセスの最良点とした (以降、Type A と呼ぶ)。ここで、提案手法のアルゴリズムの検討として、同期後の探索開始点を全プロセスの最良点にした場合 (以降、Type B と呼ぶ) との性能比較を行う。

Table 1. Parameters in each method.

Function	Rastrigin		Griewank	
Total steps	25600 × 4		76800 × 4	
Cooling steps	32			
Max.(Initial) temperature	10		20	
Min.(Final) temperature	0.01		0.001	
Initial neighborhood range	1.0	5.12	6.0	512
Neighborhood adjustment interval	50			
Neighborhood range's parameter adjustment interval	200			

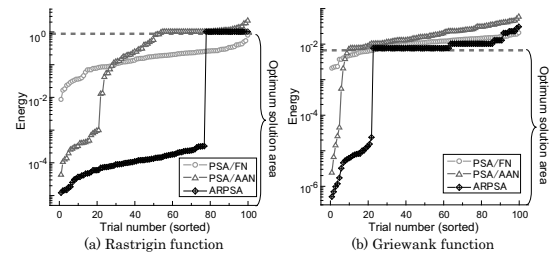


Fig. 7. Distribution of optimum solutions in 3 methods.

各関数における比較結果を Fig. 8 に示す。Fig. 8 は、各関数において上記の 2 手法で 100 試行ずつ行い、最良値を昇順に並び替えた結果であり、縦軸に評価値、横軸に試行回数を示している。なお、パラメータは Table 1 と同様である。

Fig. 8 より、(a)Rastrigin 関数においては、全プロセス (Type B)、(b)Griewank 関数においては、各プロセス (Type A) の最良点から探索を開始した方が良好な結果を示している。これらの目標受率率は同じであるため、解精度に差は表れていないが、最適解領域への到達率に差が表れている。これは、2.1 節に示したように、対象問題の形状に依存する結果であると考えられ、いずれか一方のアルゴリズムが良いとは言えない結果となった。

8. まとめ

本研究では、SA/AAN を並列化させた新たな手法 ARPSA を提案した。アルゴリズムの改良として、各プロセスに異なる受率率を与えることで高い解精度が得られた。次に、各プロセスの解の更新状況を基に近傍幅を拡大させ、最適解領域への到達率が向上した。さらに、同期後は各プロセスの最良点から探索を開始することにより、解探索性能が向上した。また、全プロセスの最良点から探索を開始するものと比較したが、対象問題によ

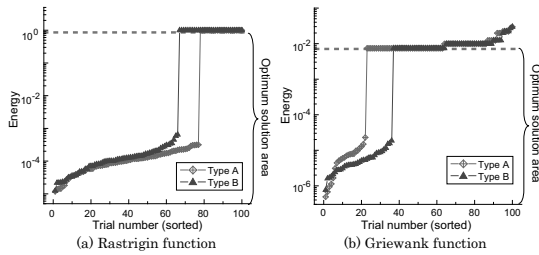


Fig. 8. Distribution of optimum solutions in 2 types.

て良好な方法が異なった。そして、提案手法を代表的なテスト関数に適用し、従来手法より良好な結果を得たため、SAの拡張アルゴリズムとして有効であることを確認した。

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) 上坂吉則, “シミュレーテッドアニーリングの摂動近傍と収束速度について”, 電子情報通信学会技術報告, Vol.90, No.123, pp.23-29 (1990) .
- 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) 安藤景子, 三木光範, 廣安知之, 及川雅隆, “近傍並列シミュレーテッドアニーリング”, Transactions of JSCES, Vol.2006, 20060026 (2006) .
- 5) D. Whitley and K. Mathias and S. Rana and J. Dzubera, “Evaluating Evolutionary Algorithms”, Artificial Intelligence, Vol.85, pp.245-2761 (1996) .
- 6) A. Corana and M. Marchesi and C. Martini and S. Ridella, “Minimizing Multimodal Functions of Continuous Variables with the Simulated Annealing Algorithm”, ACM Trans. on Mathematical Software, Vol.13, No.3, pp.262-280 (1987) .