

摂動確率に冷却スケジュールを導入した シミュレーテッド・アニーリング手法について

多田 惇哉¹⁾ 池田 諭²⁾

Simulated Annealing Method with introducing a cooling schedule into perturbation

Junya TADA Satoshi IKEDA

Abstract

Simulated annealing method is a generic probabilistic metaheuristic for the global optimization problem. By analogy with physical process, each step of the simulated annealing algorithm replaces the current solution by a random "nearby" solution, chosen with a probability that depends on the difference between the corresponding function values and on a global parameter T (called the temperature), that is gradually decreased during the process. Thus, "acceptance probability" in simulated annealing method is managed by "cooling schedule" of the temperature. The purpose of this paper is to suggest an effective search by introducing a cooling schedule into random perturbations of the traditional simulated annealing method.

Key Words: simulated annealing, cooling schedule, perturbation, local topological information

1. はじめに

シミュレーテッド・アニーリング手法（以下、SA手法）は、汎用的な繰り返し非決定的アルゴリズムの一種であり、組合せ最適化問題の代表的な解法の一つである[1]。SA手法は、摂動確率と採択確率によって定まる遷移確率に従って、解空間上を確率的に探索するものである。通常、採択確率は、解の評価値と温度によって、冷却スケジュールを制御され、温度の低下と共に評価値の影響が増大するが、摂動確率は温度によらず、近傍に対して一様な分布となっている。しかし、不均一な解空間を持つ離散最適化問題を解く場合は、解空間の位相的な特徴を利用する遷移規則[2]を与えることにより、探索をより効率的にできる可能性がある。そこで、本研究では、摂動確率を解空間の位相的な特

徴と温度によって制御し、温度の低下とともに、その影響が減少する冷却スケジュールを導入することを考える。

具体的には、温度 T において近傍 v に $\text{deg}(v)^{-\gamma \frac{T}{T_0}}$ の重み付けをし、これにより摂動確率を決定する。ここで $\text{deg}(v)$ は近傍 v の次数、 γ は実数のパラメータ、 T_0 は初期温度とする。

γ が正の場合は、次数の小さな近傍へ遷移し易くなる。反対に、負の場合は、次数の大きな近傍へ遷移し易くなる。また、温度 T の低下と共に、遷移確率への位相的な影響は減少し、評価値の影響が増大する。この提案手法の有効性について検証する。

2. シミュレーテッド・アニーリング手法

2.1 アニーリング

アニーリングは元々、金属工学における用語である。

1) 情報システム工学専攻大学院生

2) 情報システム工学科准教授

一度、高温まで熱した分子を、徐々に冷却していくことにより、完全な結晶を生成する手法である。このとき、物質の持つエネルギーは最小化されている。SA手法とは、このアニーリングを模倣した手法である。

2. 2 解空間

組合せ最適化問題の実行可能解全体の集合を解空間とよび、 Ω と記すことにする。任意の状態 $S_i \in \Omega$ には、その評価値 $Cost_i$ が定義されているものとする。本稿で扱う最適化問題は

$$\min_i Cost_i \quad \text{subject to } S_i \in \Omega$$

である。

2. 3 解空間の探索

SA手法は、より良い解を求めて、解空間を確率的に探索する手法である。SA手法の解の探索は、与えられた状態 S_i に対し、その近傍 $\mathcal{N}(S_i)$ を定義することにより行われる。このとき、1つの状態をノード、その近傍を隣接しているノードと考えると、解空間は一つの無向グラフとして考えることができる。

与えられた近傍 $\mathcal{N}(S_i)$ の中から、新しい状態 S_j を生成し、2.4.2節で示す評価値による基準に従い、採択するかどうかを決定する。採択されれば、それを次の状態として遷移する。採択されなければ、近傍 $\mathcal{N}(S_i)$ の中から、新しい状態を生成し直す。このような一連の手順を繰り返すことにより、解空間の探索を進めていく。

2. 4 遷移確率

ここでは、解空間の探索における具体的な遷移規則について述べる。SA手法では、遷移確率は、摂動確率と採択確率によって決定される。摂動確率は近傍の中から、新しい状態を生成する確率である。一方、採択確率は、摂動確率で生成された新しい状態を、次の状態として採択するかどうかを決定する確率である。この三つの確率について説明する。

2. 4. 1 摂動確率

遷移可能な状態の中から、新しい状態を生成する確率である。本研究では、解空間の位相的な情報として、各近傍の次数を利用する。状態 S_j の近傍の数を $\text{deg}(S_j)$ とする。すなわち、

$$\text{deg}(S_j) = |\mathcal{N}(S_j)|$$

である。

温度 T において、現在の状態 S_i から、新しい状態 S_j を生成する摂動確率 $G_{ij}(T, \gamma)$ は次のように定義される。

$$G_{ij}(T, \gamma) = \begin{cases} \frac{\text{deg}(S_j)^{-\frac{\gamma T}{T_0}}}{\sum_{w \in \mathcal{N}(S_i)} \text{deg}(w)^{-\frac{\gamma T}{T_0}}} & (S_j \in \mathcal{N}(S_i)) \\ 0 & (S_j \notin \mathcal{N}(S_i)) \end{cases}$$

$S_j \in \mathcal{N}(S_i)$ の次数により、生成される確率が異なるように設定されている。但し、温度 T の低下と共に、確率は等しくなっていく。

$\gamma > 0$ の場合は、次数が小さな近傍を生成する確率が高くなる。反対に、 $\gamma < 0$ の場合は、次数が大きな近傍を生成する確率が高くなる。また、 $\gamma = 0$ の場合は、次の状態 S_j が、現在の状態 S_i の近傍 $\mathcal{N}(S_i)$ の中から等しい確率で生成されることになり、既存の設定に対応していることになる。

2. 4. 2 採択確率

摂動確率によって生成された新しい状態 S_j を、次の状態として採択するかどうかを決定する確率である。現在の状態 S_i の評価値と、その近傍 S_j の評価値の差 $\Delta Cost_{ij} (= Cost_j - Cost_i)$ と温度 T によって定まる。温度 T において、状態 S_i から状態 S_j への遷移を採択する確率 $A_{ij}(T)$ は次のように定義される。

$$A_{ij}(T) = \begin{cases} \exp\left[-\frac{\Delta Cost_{ij}}{T}\right] & (\Delta Cost_{ij} > 0) \\ 1 & (\Delta Cost_{ij} \leq 0) \end{cases}$$

評価値が改善される遷移は必ず採択される。逆に評価値が悪化するときは、採択するかどうかを確率的に決定している。但し、温度 T の低下と共に、悪化する遷移は採択されにくくなり、十分小さな T に対しては、

$$A_{ij}(T) \approx 0 \quad (\Delta Cost_{ij} > 0)$$

である。

2. 4. 3 遷移確率

温度 T における状態 S_i から状態 S_j への遷移確率 $P_{ij}(T)$ は、摂動確率と採択確率の積により、次式で定義される。但し、 $S_j \in \mathcal{N}(S_i) \cup \{S_i\}$ である。

$$P_{ij}(T, \gamma) = \begin{cases} \frac{\deg(S_j)^{-\frac{T}{T_0}}}{\sum_{w \in \mathcal{N}(S_i)} \deg(w)^{-\frac{T}{T_0}}} & (\Delta Cost_{ij} \leq 0) \\ \frac{\deg(S_j)^{-\frac{T}{T_0}} \cdot \exp\left[-\frac{\Delta Cost_{ij}}{T}\right]}{\sum_{w \in \mathcal{N}(S_i)} \deg(w)^{-\frac{T}{T_0}}} & (\Delta Cost_{ij} > 0) \\ 1 - \sum_{k:k \neq i} A_{ik}(T) \cdot G_{ik}(T, \gamma) & (i = j) \end{cases}$$

温度 T が高温の場合は、評価値の影響は小さく、近傍の次数の影響は大きい。温度 T が低下するにつれ、評価値の影響は増大し、近傍の次数の影響は減少していく。この遷移規則による定常分布は、次のようになる。

$$q_i(T, \gamma) = \frac{\deg(S_i)^{-\frac{T}{T_0}} \exp\left[-\frac{Cost_i}{T}\right] \sum_{S_j \in \mathcal{N}(S_i)} \deg(S_j)^{-\frac{T}{T_0}}}{N_0(T, \gamma)}$$

ここで $N_0(T, \gamma)$ は正規化関数である。

また、温度 T が 0 の極限での分布は、最適値をもつ状態の集合 $\Omega_0 \subset \Omega$ に台を持つ。

$$\lim_{T \rightarrow 0} q_i(T, \gamma) = \begin{cases} \frac{\deg(S_i)}{\sum_{w \in \Omega_0} \deg(w)} & (S_i \in \Omega_0) \\ 0 & (S_i \notin \Omega_0) \end{cases}$$

3. 実験

この提案手法の有効性について実験する。

3. 1 実験の準備

この節では、実験の手順や設定について記述する。

3. 1. 1 探索する解空間の設定

本実験では、現実の組み合わせ問題で生じた解空間ではなく、第 2 章で述べた構成グラフに基づく仮想の解空間を用いる。ただし、評価値の近い解同士が接続している確率は高くなり、そうでない解同士は非連結になるような特徴を持つように解空間を構成した。また、位相的には解空間全体で一様になるようにしている。詳細は次の通りである。

- 評価値 $Cost$ 最小化問題を扱う。つまり、評価値は数値が低いほど、良い値と判断する。
- ノード (解) 数 n 50 100
- 解空間の生成手順

①ノードに評価値 $Cost_i$ を設定する。

各ノードにはノード番号 i ($0 \sim n-1$) を割り振る。

ノード i が持つ評価値 $Cost_i$ は、

$$Cost_i = |(n/2 - i)| * \text{random}$$

($i = 0 \sim n-1$, random は 0 から 1 の範囲の一様乱数) で決定する。

また、生成する解空間が非連結なグラフにならない様、ノード番号が隣り合うノード同士は隣接しているように設定する。

②各ノードのコスト差によって、接続する確率を決定する。

$Cost_i$ の評価値を持つノード i と、 $Cost_j$ の評価値を持つノード j が接続する確率 R_{ij} は、

$$R_{ij} = \frac{\lambda}{\lambda + |Cost_i - Cost_j|}$$

とする。 λ は実数のパラメータであり、辺の数を調整する。評価値が近いノード同士は接続する確率が高くなる。

$n=50, 100$ に、 $\lambda=0.5, 1.0, 2.0$ を組み合わせた計 6 つの解空間パターンを用いる。また、各パターンともにランダムに 500 の解空間を生成し、実験を行う。

3. 1. 2 SA手法のパラメータの設定

本実験では以下のように設定する

- ・ 初期温度； $\gamma=0.0$ のときに採択割合が 0.9 を超えるように設定する。
- ・ 温度スケジュール；0.9
- ・ 平衡状態までの繰り返し回数；最大次数の 1/2
- ・ アルゴリズムの終了判定；ある温度で、平衡状態の繰り返し回数までに、1 回も解の更新が無かった場合、アルゴリズムを終了する。

3. 1. 3 実験手順

2章で示した摂動確率の実数パラメータ γ を $-5.0 \sim 8.0$ まで 0.1 刻みで変化させ、3.1.1 節で生成した 6 つ解空間パターンに適用する。

3. 1. 4 評価基準

今回の実験では、最適解への到達回数を評価値として用いる。

実験はパターンごとに行われる。ランダムに生成された 500 個の解空間で、解空間ごとに 100 回の探索を行う。そして、最適解への到達回数が最多となった回数が、500 回のうち何回あったかを、 γ ごとにカウントしていく。パラメータ γ における最適解への到達回数が最多となった回数を $f(\gamma)$ ($\gamma = -5.0, -4.9, -4.8, \dots, 8.0$) で表すことにする。ただし、最適解への到達回数が最多となる γ の値が複数ある場合は、その全ての γ についてカウントするものとする。

3. 2 実験結果

$\lambda=0.5$ 、 $\lambda=1.0$ 、 $\lambda=2.0$ の場合に分けて、実験結果を述べる。

3. 2. 1 $\lambda=0.5$ のとき

図 3.1 に $\lambda=0.5$ のときの結果を示す。横軸は γ の値、縦軸は評価値 $f(\gamma)$ を表す。

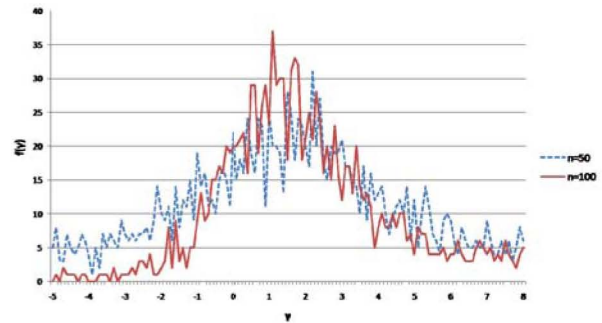


図 3.1 最適解への到達回数が最多となった回数

$n=50$ のとき、評価値 $f(\gamma)$ が最も良かった γ の値は、2.2 であった。既存の手法 ($\gamma=0.0$) の場合は 22 回に対し、 $\gamma=2.2$ の場合は 31 回になっている。他で $\gamma=0.0$ より良かったのは、0.4 から 2.4 の範囲で 9 つの値があった。

$n=100$ のとき、評価値 $f(\gamma)$ が最も良かった γ の値は、1.1 であった。既存の手法 ($\gamma=0.0$) の場合は 20 回に対し、 $\gamma=1.1$ の場合は 37 回になっている。他で $\gamma=0.0$ より良かった値は、0.2 から 2.8 の範囲で 20 個の値があった。

双方とも正の符号である点で一致した。

3. 2. 2 $\lambda=1.0$ のとき

図 3.2 に $\lambda=1.0$ のときの結果を示す。横軸は γ の値、縦軸は評価値 $f(\gamma)$ を表す。

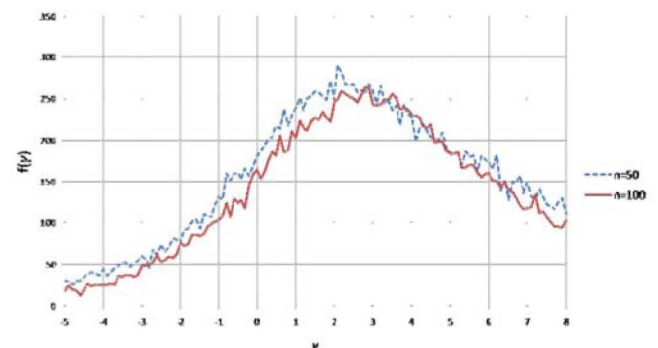


図 3.2 最適解への到達回数が最多となった回数

$n=50$ のとき、評価値 $f(\gamma)$ が最も良かった γ の値は、2.1 であった。既存の手法 ($\gamma=0.0$) の場合は 179 回に対し、 $\gamma=2.1$ の場合は 290 回になっている。他で $\gamma=0.0$ より良かったのは、0.1 から 5.6 の範囲の全ての

値と、 $\gamma=5.8$ と 6.2 のときがあった。

$n=100$ のとき、評価値 $f(\gamma)$ が最も良かった γ の値は、 2.8 であった。既存の手法 ($\gamma=0.0$) の場合は 164 回に対し、 $\gamma=2.8$ の場合は 264 回になっている。他で $\gamma=0.0$ より良かった値は、 0.3 から 5.8 の範囲にある全ての値であった。

双方とも正の符号である点で一致した。

3. 2. 3 $\lambda=2.0$ のとき

図 3.3 に $\gamma=2.0$ のときの結果を示す。横軸は γ の値、縦軸は評価値 $f(\gamma)$ を表す。

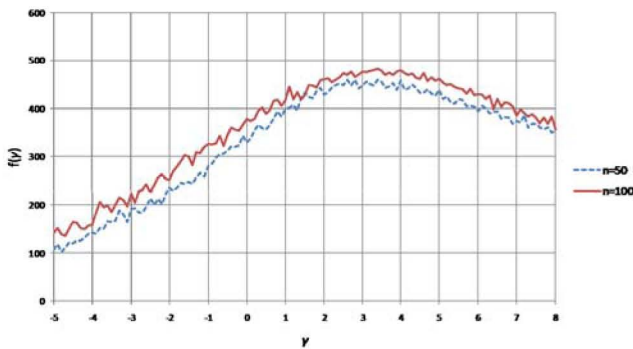


図 3.3 最適解への到達回数が最多となった回数

$n=50$ のとき、評価値 $f(\gamma)$ が最も良かった γ の値は、 2.6 、 2.8 、 3.4 の 3 つであった。既存の手法 ($\gamma=0.0$) の場合は 329 回に対し、 $\gamma=2.6$ 、 2.8 、 3.4 の場合は 460 回になっている。他で $\gamma=0.0$ より良かったのは、 0.1 から 8.0 の範囲の全ての値であった。

$n=100$ のとき、評価値 $f(\gamma)$ が最も良かった γ の値は、 3.4 であった。既存の手法 ($\gamma=0.0$) の場合は 379 回に対し、 $\gamma=3.4$ の場合は 483 回になっている。他で $\gamma=0.0$ より良かった値は、 0.3 から 7.5 の範囲にある全ての値であった。

双方とも正の符号である点で一致した。

3. 2. 4 既存手法との比較

図 3.4 は、横軸:パラメータ γ 、縦軸: $f(\gamma)-f(0)$ を表すものとする。

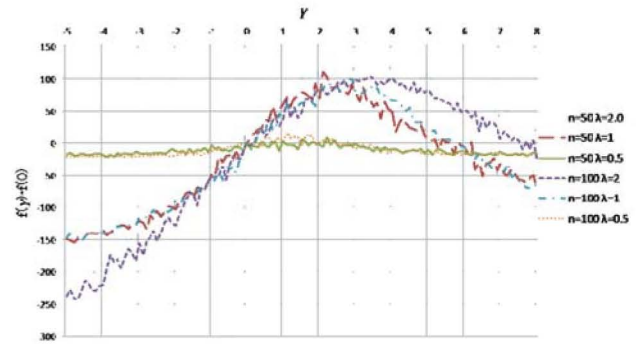


図 3.4 既存手法($\gamma=0$)との比較

図 3.4 から、 $f(\gamma)-f(0)$ が正となるのは、 $\gamma>0$ に限定されることがわかる。 $\gamma<0$ の範囲では、既存手法より良い結果は得られていない。また、 $f(\gamma)-f(0)$ のピークは、概ね、 2.0 から 3.0 の範囲にあることもわかる。

4. まとめ

本研究では、既存のシミュレーテッド・アニーリングの摂動確率に、冷却スケジュールを導入することにより、解空間の持つ位相的な特徴を探索に反映させる手法を提案した。

そして、不均一な解空間ではあるが、空間的に見れば一様で、レギュラーグラフに近い特徴を持った問題群に対して、提案手法が有効であることを確認した。

今回の実験では、解空間は全体的に見れば、一様であることを仮定したが、この仮定が成り立たないような問題では、パラメータ γ の設定は、今回ほど単純にはいかない。今後の課題である。

参考文献

- [1]Sadiq M.Sait, Habib Youssef, “Iterative Computer Algorithms with Applications in Engineering”, IEEE Computer Society, 2000
- [2] S. Ikeda, I. Kubo and M. Yamashita “The hitting and cover times of random walks on finite graphs using local degree information”, Theoretical Computer Science, Vol. 410, 1, pp. 94-100, 2009