

シミュレーテッドアニーリングにおける温度パラメータの検討
藤田 佳久

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) とは, 金属の焼きなましを計算機上に模範した手法で, 組合せ最適化問題のための近似解法の 1 つである. 良好な解探索能力を得るためには適切なパラメータを設定する必要がある. また, 適切なパラメータは対象問題に依存する. そこで, 本報告では, SA を Schwefel 関数の連続最適化問題に適用し, 温度パラメータが解探索能力に与える影響について検討を行う.

2 実験概要

2.1 対象問題

対象問題は, Equ.(1) で表される Schwefel 関数である. Schwefel 関数は, 全ての設計変数が 420.968750 の時, $-418.982887 \times \text{次元数}$ の最適解を得られるとされる多峰性関数である. 最適解の周辺に準最適解が存在しないため, 探索プロセスの早い段階において大域的な解探索がなされなければ, 局所最適解に収束する. Fig. 1 に 2 次元の場合の外形とエネルギーの等高線を示す.

$$F_{Schwefel}(x) = \sum_{i=1}^n -x_i \sin(\sqrt{|x_i|}) \quad (1)$$

$(-512 \leq x_i < 512)$

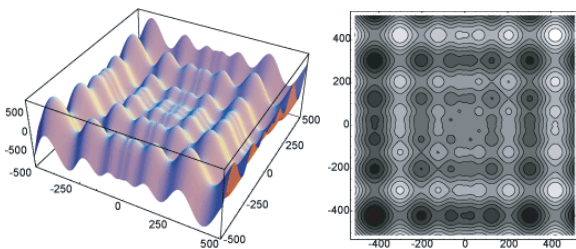


Fig. 1 Schwefel 関数 (2 次元)

2.2 検討パラメータ

本報告では, SA の温度パラメータについて実験を行う. 検討方法として, 以下の 3 点について検討を行った.

- 最低温度を固定し最高温度を変化させ, 最高温度が解探索に与える影響を検討
- 最高温度を固定し最低温度を変化させ, 最低温度が解探索に与える影響を検討
- 最高温度と最低温度を同じ値 (一定温度) にし, どの温度が解探索に影響を与えるかを検討

温度は, 次の状態への推移を受理するか否かの判定に用いられるパラメータである. 温度が高い場合は, 改悪方向への推移が大きくなる. 反対に低い場合は, 改悪方向への推移が小さくなる. しかし, どのような温度でも改悪方向への推移確率が 0 になるわけではない.

2.3 実験方法

本実験で実装した SA は, 近傍に一様分布を用い, 受理判定の確率には Fig. 2 に示す Metropolis 基準を用いた.

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

Fig. 2 Metropolis 基準

パラメータの初期値は, Table1 に示す値に設定し検討を行った.

Table 1 パラメータの初期値

パラメータ	値
最高温度	10.0
最低温度	0.01
近傍幅	100.0
クーリング周期	10000
総アニーリング数	320000

また, 本実験ではエネルギー値が -837 以下のとき, 最適解領域に達したとする.

3 数値実験

3.1 温度パラメータに関する実験結果

● 最高温度

最高温度を 5 ~ 200 の間で 5 刻みに変化させ, 最高温度が解探索に与える影響を検討した. その他のパラメータは Table1 の値を用いた. 最高温度と最良エネルギーの関係を Fig. 3 に示す. Fig. 3 は, 各最高温度に対する 100 回試行の最良エネルギーの中央値を示したものである. 縦軸に最良エネルギー, 横軸に最高温度を示した.

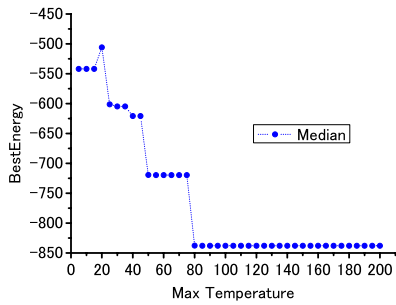


Fig. 3 最高温度と最良エネルギーの関係

Fig. 3 より，最高温度を上げることによって最良エネルギーが低くなり，最高温度が80以上で最適解領域に到達することが分かった．

● 最低温度

最低温度を 0.0001,0.001,0.01,0.1,1.0 と 5 ~ 195 の間で 5 刻みに変化させ，最低温度が解探索に与える影響を検討した．その他のパラメータは Table1 の値を用いた．また，最高温度は局所的最適解に陥らない為に，上記の最高温度の検討結果を踏まえて 200 とした．最低温度と最良エネルギーの関係を Fig. 4 に示す．Fig. 4 は，各最低温度に対する 100 回試行の最良エネルギーの中央値を示したものである．縦軸に最良エネルギー，横軸に最低温度を示した．

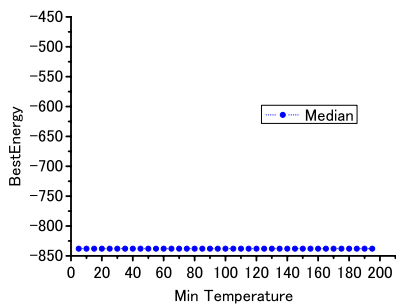


Fig. 4 最低温度と最良エネルギーの関係

Fig. 4 より，最低温度は解探索に影響がないことが分かった．

3.2 温度と近傍パラメータの兼ね合いに関する実験結果

● 最高温度と近傍

最高温度と近傍パラメータを変化させ，最高温度と近傍の兼ね合いが解探索に与える影響を検討した．検討を行った最高温度は 5 ~ 200 (5 刻み)，近傍は 10, 100, 200 である．その他のパラメータは Table1 の値を用いた．最高温度と近傍と最良エネ

ルギーの関係を Fig:4 に示す．Fig. 5 では各近傍において各最高温度に対する 100 回試行の最良エネルギーの中央値を示したものである．縦軸に最良エネルギー，横軸に最高温度を示した．

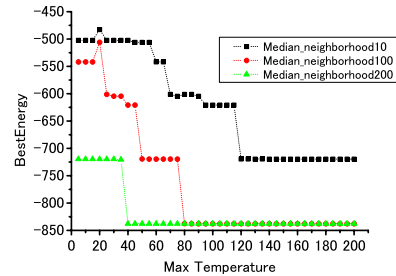


Fig. 5 最高温度と近傍と最良エネルギーの関係

Fig. 5 より，近傍を大きくすることによって，低い最高温度で最適解領域に到達することが分かった．また，同じ最高温度では，近傍が大きいくほどより良い解に到達することが分かった．

● 最低温度と近傍

最低温度と近傍パラメータを変化させ，最低温度と近傍の兼ね合いが解探索に与える影響を検討した．検討を行った最低温度は 5 ~ 195 (5 刻み)，近傍は 10, 100, 200 である．その他のパラメータは Table1 の値を用いた．最低温度と近傍と最良エネルギーの関係を Fig. 6 に示す．Fig. 6 では各近傍において各最低温度に対する 100 回試行の最良エネルギーの中央値を示したものである．縦軸に最良エネルギー，横軸に最低温度を示した．

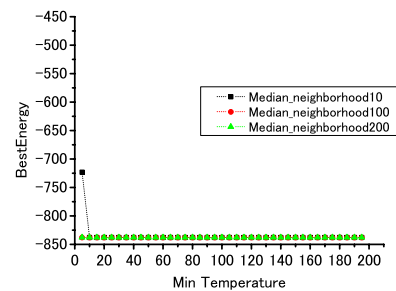


Fig. 6 最低温度と近傍と最良エネルギーの関係

Fig. 6 より，近傍を 100 以上にすることによって，最低温度が解探索に影響を与えないことが分かった．また，最低温度を 20 以上にすることによって，最低温度が解探索に影響を与えないことが分かった．

- 一定温度と近傍

一定温度と近傍パラメータを変化させ、温度と近傍の兼ね合いが解探索に与える影響を検討した。検討を行った温度は5~200(5刻み)、近傍は10, 100, 200である。その他のパラメータはTable1の値を用いた。温度と近傍と最良エネルギーに関する検討結果をFig. 7に示す。Fig. 7ではそれぞれの近傍における中央値の解探索履歴の比較を行った。Fig. 7の縦軸にエネルギー値、横軸に温度を示した。

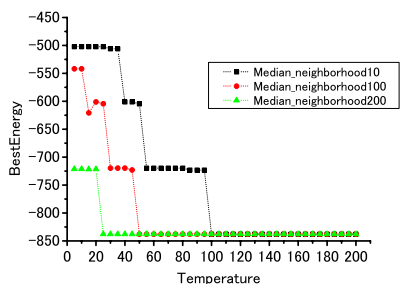


Fig. 7 温度を固定した際の近傍と最良エネルギーの関係

Fig. 5とFig. 7を比較すると、温度を下げない方が、より低い最高温度で最適解領域に到達することが分かった。また、近傍10の場合においては、Fig. 5では最適解領域に到達しなかったが、Fig. 7では最適解領域に到達した。つまり、温度を下げない方が、より良い解が得られることが分かった。

4 考察

4.1 なぜ、一定温度の方が最適解領域に近づくのか？

Fig. 8に、一定温度の場合と温度を下げっていく場合の温度と最良エネルギーの関係を示す。なお、近傍は10とした。

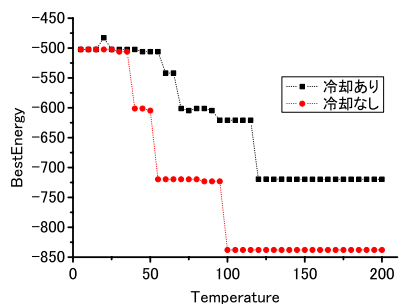


Fig. 8 一定温度と温度を下げっていく場合の最良エネルギーの関係

Fig. 8より、一定温度の方が良い解が得られることが分かる。

温度とは、次の状態に移るための受理判定に用いられるパラメータである。温度が高いほど改悪方向へ解探索する確率が高く、低いと改悪方向へ解探索する確率が低い。つまり、一定温度の場合は、改悪方向への推移を受理する回数が多くなる。よって、Schwefel関数では、改悪方向への解探索を多くした方が、より良い解が得られると考えた。そこで、改悪方向への解探索の回数を調査することにした。その結果、一定温度の場合が温度を下げっていく場合より、改悪方向への解探索の回数が多ければ、改悪方向への解探索を多くした方が、より良い解が得られると言える。その結果をFig. 9示す。

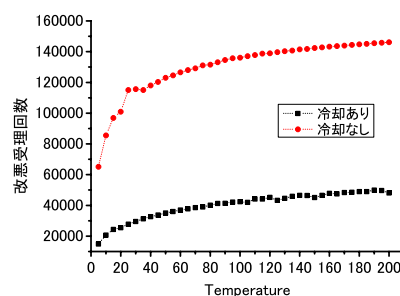


Fig. 9 改悪方向の解探索回数

Fig. 9より、一定温度の方が圧倒的に改悪受理回数が多い。よって、一定温度の方が最適とされる解に近づく。

5 まとめ

本報告では、Schwefel関数において、SAの温度パラメータ検討を行った。その結果、最高温度は高いほど良い解が得られることが分かった。最低温度は、ほとんど解探索に影響がないことが分かった。また、温度を下げない(一定温度)場合の方が、温度を下げていく場合より、良い解が得られることが分かった。

参考文献

- 1) ISDLレポートNo.20030711003, シミュレーテッドアニーリングにおけるパラメータの検討, 昌山 智