SA における近傍パラメータの検討

濱地優希

1　はじめに

最適化問題とは，ある制約条件下において，与えられた状態空間で定義された関数の最大値または最小値を与える状態空間の要素を求める問題である．最適化問題を解く代表的なヒューリスティック手法としてシミュレーテッドアニーリング（Simulated Annealing，以下 SA）が挙げられる．SA は最適化問題を解く汎用近似解法の一つであり，金属のアニーリングに着想を得て，これを計算機上で模倣することにより最適化問題を解こうとする手法である．

2　実験内容

組合せ最適化問題に SA を用いて解く場合，SA のパラメータのうち温度スケジュールの設定が解探索の性能に大きな影響を与える．一方，連続最適化問題に SA を適用する場合は，組合せ最適化問題と同様に温度スケジュールの設定が重要であるが，次状態の生成を決定する近傍の設定がより重要となる．これは連続最適化問題における近傍幅がエネルギー変化と密接に関係しているためである．本実験では連続最適化問題である Rosenbrock 関数を対象問題として，近傍と解精度の関係を検討した．

2.1　パラメータ

本実験で用いたパラメータを Table 1 に示す．

Table 1　パラメータ

パラメータ	値
最高温度	1
最低温度	0.001
次元数	2
総アニーリング数	320000
クーリング周期	32
試行回数	100

2.2　Rosenbrock 関数

本研究で用いた対象問題である Rosenbrock 関数は，設計変数間に依存関係を持つ単峰性関数である．Rosenbrock 関数の数式を式 (1) に，ランドスケープを Fig. 1，等高線を Fig. 2 に示す．

$$F_{Rosenbrock} = \sum_{i=1}^{n-1}(100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (1 - x_i)^2) \quad (1)$$

$$(-2.048 \leq x_i < 2.048)$$

$$min(F_{Rosenbrock}) = F(1, 1, \cdots, 1) = 0$$

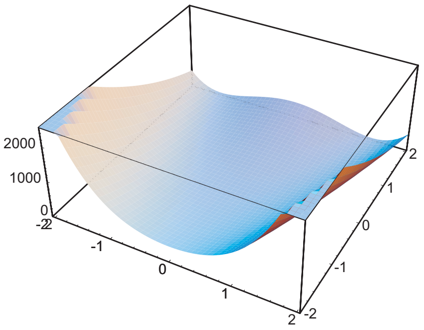

Fig. 1　ランドスケープ

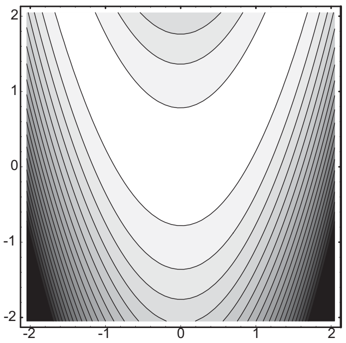

Fig. 2　等高線

3　実験結果

3.1　Rosenbrock 関数の最適近傍

Rosenbrock 関数の最適近傍を求めるため，近傍を変化させてエネルギーの推移の様子を調べた．Rosenbrock 関数に対し SA を実行した際の解の履歴を Fig. 3 に示す． Fig. 3 は，横軸をクーリングステップ数，縦軸を解のエネルギー値とする．なお，縦軸は対数表示とする．

また，近傍の変化に伴う解精度の変化を Fig. 4 に示す．Fig. 4 では，横軸を近傍幅，縦軸を解のエネルギー値とする．なお，縦軸は対数表示とする．

Fig. 3 からわかるように，近傍設定が解探索に影響を与えている．また Fig. 4 より，最適近傍は 0.002〜0.004 付近であることがわかる．最適近傍をさらに詳しく調べるため，この付近で精度を一桁上げて実験を行った．この結果を Fig. 5 に示す．

Fig. 5 から，Rosenbrock 関数における最適近傍は 0.0022 であることがわかった．

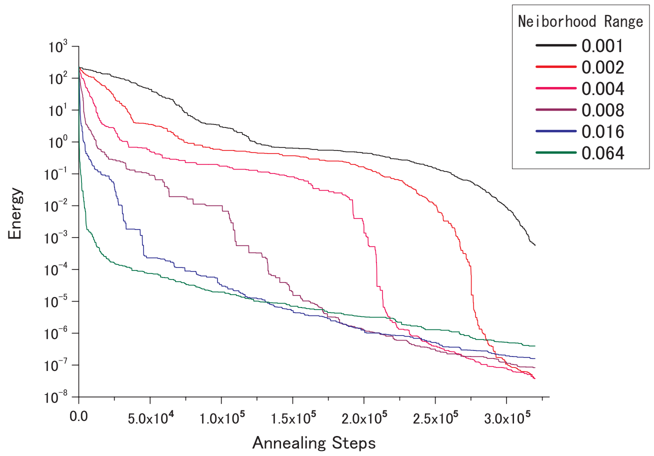

Fig. 3　中央値での解探索履歴

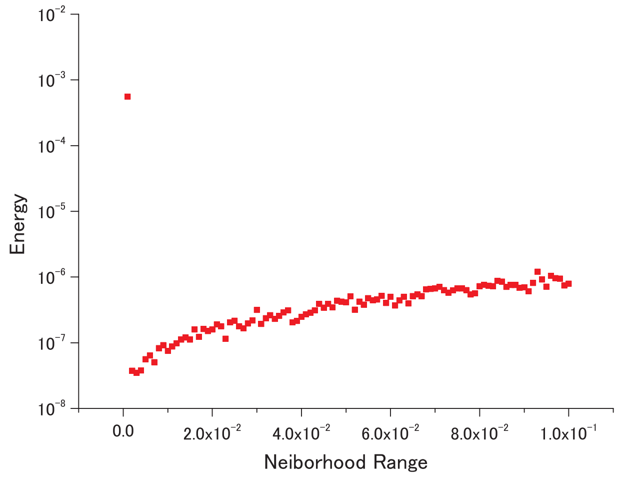

Fig. 4　近傍別の最良エネルギー（近傍幅：0.001〜0.1）

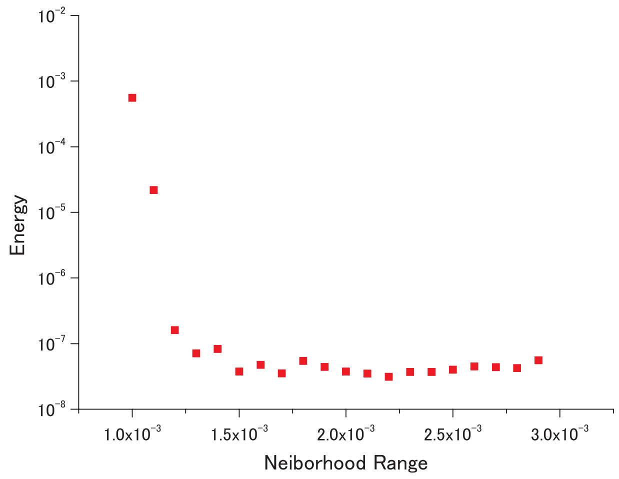

Fig. 5　近傍別の最良エネルギー（近傍幅:0.001〜0.003）

4　考察

4.1　固定近傍

Fig. 3 において，近傍が 0.064 の場合は解探索序盤での精度が高いが，終盤では探索精度が下がっている．逆に近傍が 0.002 の場合は，解探索序盤においては精度が低いが，終盤に探索精度が高くなっている．これらの結果の違いは今回対象問題として取り上げた Rosenbrock 関数に大きく関係していると考えることができる．

SA の特徴としては容易には局所最適解につかまらず，大域最適解が得られることが挙げられる．これは，解が改良される方向のみだけでなく，改悪の方向にも探索が進むという SA の仕組みによるものである．しかし，Rosenbrock 関数においては，単峰性関数という特徴から，改悪方向に探索を進める必要がない．このことから，近傍を 0.002 のように小さくとっても，精度の高い解が得られたと考えられる．

しかし，Fig. 3 において，近傍が 0.001 の場合には他の近傍幅に比べ最終的な解精度は低い．そこで，グラフの外形からこのことは他のパラメータに依存するのではないかと考えられた．つまり，アニーリング数やクーリング周期を増加させれば，近傍幅 0.002 や 0.004 の様に，終盤で良好な解探索履歴を示すことが予測される．そこで，アニーリング数とクーリング周期を 2 倍にし，Table 2 のようなパラメータで同様の実験を行った．実験結果のエネルギーの推移の様子を Fig. 6 に示す．

Table 2　変更後のパラメータ

パラメータ	値
最高温度	1
最低温度	0.001
次元数	2
総アニーリング数	640000
クーリング周期	64
試行回数	100

その結果，Fig. 6 に示すように，近傍が 0.001 の場合においても他の近傍幅と同程度の解精度を得ることができた．やはり Fig. 3 において，近傍幅 0.001 の解精度が低かったのは，他のパラメータと比べて近傍幅が小さすぎ，初期点から最適解に向けて十分に移動できなかったためであることがわかる．このことから，Rosenbrock 関数のような単峰性関数の最適近傍は，他のパラメータに依存していると言えることがわかった．Fig. 4 で示した最適近傍 0.0022 という値は，Table 1 のパラメータにおける Rosenbrock 関数の最適近傍であると言うことができるだろう．

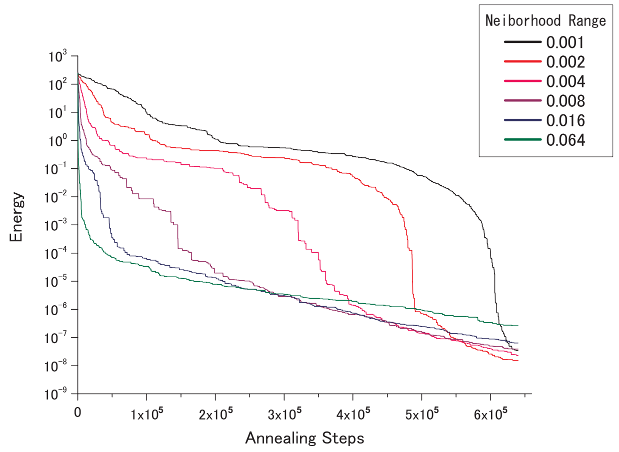

Fig. 6　中央値での解探索履歴（パラメータ変更後）

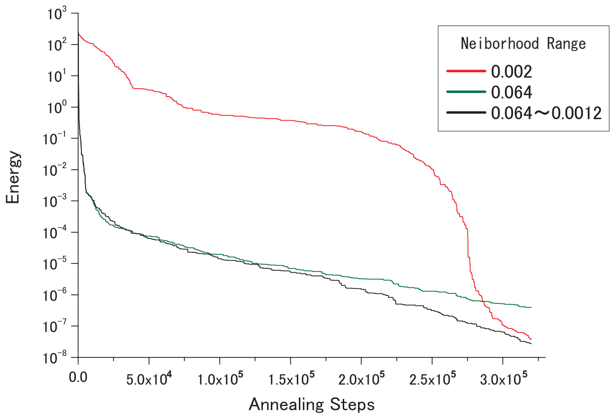

Fig. 7　中央値での解探索履歴

4.2　可変固定近傍

連続最適化問題における近傍の定義は，ユークリッド空間における距離として表すことができる．このことから一般に SA の探索においては，解探索序盤では大域探索を，終盤では局所探索を行なうことが望ましいことがわかる．つまり，初期の近傍は問題の定義域を十分にカバーできるほどに大きくとり，解探索の進行に応じて近傍幅を小さくすることができれば，解精度をさらに上げることが可能であると思われる．

そこで，解探索序盤で大域探索を，終盤で局所探索が行えるように，クーリングごとに近傍を変化させる方法を考えた．つまり，解探索序盤で良好な解探索を示す近傍幅 0.064 と，終盤で良好な解探索を示す近傍幅 0.002 の両方の特性を持った近傍を設定できれば，より高い解精度が得られると予測される．そこで，近傍 0.064 からスタートし，クーリングごとに近傍幅を狭めていくことにし，最終的には近傍幅 0.001 まで変化させることにした．ここでは近傍幅に等比的に 0.88 をかけて，少しずつ近傍を小さくする手法を採った．この際の解のエネルギー推移を Fig. 7 に示す．

Fig. 7 によると，序盤は近傍幅 0.064 の場合と同じように大域探索を行うことで解精度が増している．そして終盤では局所探索を行うことで，最終的に近傍幅 0.002 よりさらに解精度を上げることができた．しかし，最終的な解精度において，明らかな精度の差が出なかったのは，単峰性関数である Rosenbrock 関数を対象問題として実験を行ったためであると考えられる．対象問題が多峰性関数であった場合，関数の定義域に対して小さな値を設定すると，容易に局所解に陥ってしまい，大域的な最適解は得られない．しかし，単峰性関数では局所解は存在せず，このようなことは考慮しなくてもよいのである．したがって，今回試したような可変近傍は，多峰性関数においてより力を発揮することができるであろうと考えられる．

5　終わりに

実験の結果，Rosenbrock 関数のような単峰性関数においては，最適近傍は他のパラメータと依存関係にあることがわかった．通常，単峰性関数では，局所解に陥ることがないため，改悪方向に探索する必要がなく，近傍幅は小さく取った方が解精度が高い．しかし，他のパラメータと比較してあまりに小さすぎると，十分な探索が行えず解精度は低い．各パラメータ同士が，相互にどのように関係しているのかは，さらに深く検討する必要がある．

また，近傍を固定するより，探索が進むにつれて少しずつ近傍幅を狭めていった方が，解精度が高いこともわかった．この手法は，単峰性関数よりも多峰性関数においてより有効である．近傍幅の変化のさせ方については，さまざまなアルゴリズムが存在するため，対象問題についてどれが最適かは今後の検討事項である．

参考文献

1) 昌山 智，廣安 知之，三木 光範
「自作 SA の性能検証」
ISDL Report No. 20040711001，2004

2) 及川 雅隆，廣安 知之，三木 光範
「連続最適化問題における正規分布近傍 SA と近傍並列 SA の比較」
ISDL Report No. 20020611016，2002

3) 小野 景子，笠井 誠之，廣安 知之，三木 光範
「適応的近傍を持つ温度並列シミュレーテッドアニーリング」
情報処理学会ジャーナル論文，2001