Griewank 関数における SA の近傍幅の検討

細江 則彰

1 はじめに

SA（Simulated Annealing）は，良好な解を得るために対象問題によって適切なパラメータを設定し，有効な探索を実現することが非常に重要である．そこで本報告では近傍幅の検討を行う．Griewank 関数に自作 SA を適用し，近傍幅を変化させ，解探索能力に与える影響について検討を行った．

2 SA (Simulated Annealing)

SA は組み合わせ最適化問題のための近似解法の 1 つであり，高温で溶融状態にある金属を徐々に冷やすことによって，もとの金属より欠陥の少ない優れた結晶構造を作る焼きなましを計算機上に模倣した手法である．SA の基本アルゴリズムは生成，受理，クーリングから成り立つ．SA の基本的なアルゴリズムを Fig. 1 に示す．

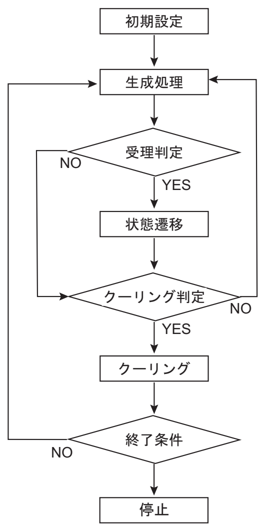


Fig. 1 SA のアルゴリズム

- 初期設定
  温度を初期化し，初期状態を与え，初期状態でのエネルギーを計算する．
- アニーリング（一定期間繰り返す）
  現在の状態からランダムに次状態を生成し，次状態でのエネルギーを計算する．エネルギーの差分と温度を用いて，次状態を受理するか否かの判定を行う．受理する場合は次の状態に推移する．
- クーリング
  一定期間アニーリングを行った後に，次の温度を設定する．そして再びアニーリングを行う．
- 終了
  温度が十分に下がり，停止条件に達すればそのときの状態を最適状態，エネルギーを最適値とする．

SA はクーリングが適切であれば理論的には真の最適解が得られることが証明されている．また，アルゴリズムが極めて汎用的であるという長所がある．

3 数値実験

3.1 実験概要

2 次元の Griewank 関数に対して近傍幅を 10 から 50 まで 10 刻みで探索し，また，1 から 10 まで 1 刻みで探索して解探索能力の違いを検討した．

次にクーリングを行うごとに近傍幅を等差に，そして等比に減少させる手法を用いて解探索能力の違いを検討した．近傍幅を等差に減少させるとは，一回のクーリングごとに近傍幅を（初期近傍幅/クーリング回数）だけ減算させることである．また，近傍幅を等比的に減少させるとは，一回のクーリングごとに初期近傍幅にある数を乗算していくことである．Fig. 2 に，初期近傍幅が 100 で等差に減少させる場合と，等比に 0.8, 0.9 を乗算していく場合での近傍幅の変化の様子を示す．

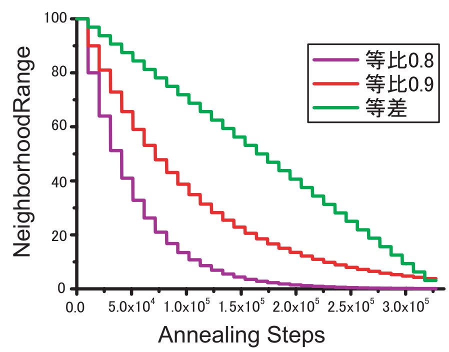


Fig. 2 等差，等比に減少させた近傍幅の推移

最後にランダムな近傍幅を用いて解探索能力の違いを検討した．ランダムな近傍幅とは，近傍幅をある範囲（0〜M）の中でランダムに生成し，ある回数（N 回）アニーリングを行っても最良エネルギーが良好にならない場合，再度近傍幅をランダムに生成するという動的な近傍幅である．今回は先に述べた M と N を検討する．

また，全てのデータに関して SA で試行回数を 100 回とし，解探索履歴の評価値の中央値と，最終的な最良エネルギーの中央値を求めた．

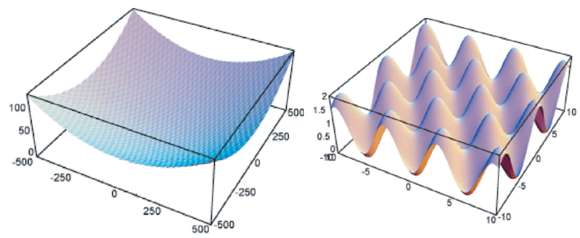
3.2　対象問題

対象問題は, 式 (1) で表される設計変数が 2 の場合の Griewank 関数である．Griewank 関数は設計変数間に依存関係を有する多峰性関数である．大域的には単峰性関数のような性質を持つが, 局所的には多数の局所的最適解が存在する．Fig. 3, に Griewank 関数の外形 (変数領域, 最適解付近) を示す．

$$
F_{Griewank}(x) \;=\; 1+\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i^2}{4000}-\prod_{i=1}^{n}\Big(\cos\big(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\big)\Big) \qquad (1)
$$

$$
(-512 \leq x_i < 512)
$$

$$
min(F_{Griewank}(x)) = F(0,0,\ldots,0) = 0
$$



(a) 設計変数領域　(b) 最適解付近

Fig. 3　Griewank 関数の外形と等高図

次に, Table 1 に本実験で用いたパラメータ値を示す．

Table 1　初期パラメータ

パラメータ	値
最高温度	20.0
最低温度	0.001
次元数	2
クーリング回数	32
総アニーリング数	327680

3.3　実験結果

3.3.1　近傍幅を固定した場合の検討

- 近傍幅（10〜50）

近傍幅を 10 から 50 まで 10 刻みで変化させたときの解探索履歴を Fig. 4 に示す．縦軸がエネルギーであり, 横軸が探索数である．

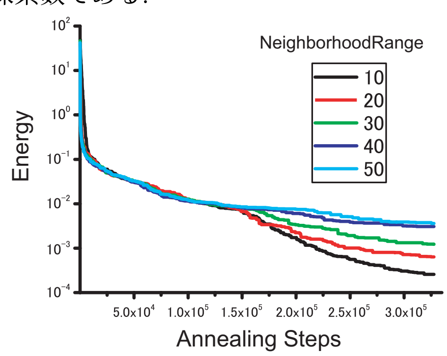


Fig. 4　近傍幅（10〜50）における解探索履歴

Fig. 4 より解探索中盤まで解探索性能に違いは見られないが, 解探索後半では, 近傍幅が小さいときに良好な解探索性能を示した．

従って近傍幅 10 以下をより詳しく調査する必要があるため, 次に 0.25 から 10.0 まで近傍幅を変化させて解探索能力の違いを検討する．

- 近傍幅（1〜10）

近傍幅を 1 から 10 まで 1 刻みで変化させた場合の解探索履歴を Fig. 5 に示す．縦軸がエネルギーであり, 横軸が探索数を示す．

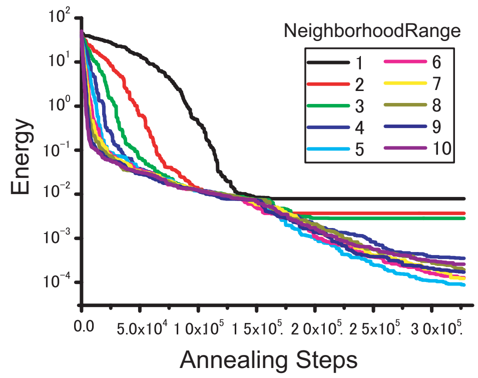


Fig. 5　近傍幅（1〜10）における解探索履歴

Fig. 5 のように解探索前半は近傍幅が大きい方が良好な解探索性能を示している．しかし, 解探索後半から近傍幅が 5 のときに良好な解探索性能を示している．近傍幅が 1, 2, 3 のときは解探索性能が悪く, 5 から 10 のときは良好な解探索性能を示している．

よって, 327,680 回の探索において近傍幅を固定する場合, 近傍幅は 5 付近が最適であると言える．

3.3.2　近傍幅を減少させた場合の検討

- 近傍幅（等差減少）

初期近傍幅を 10 から 90 まで 20 刻みで変化させたときの解探索履歴を Fig. 6 に示す．縦軸がエネルギーであり, 横軸が探索数である．

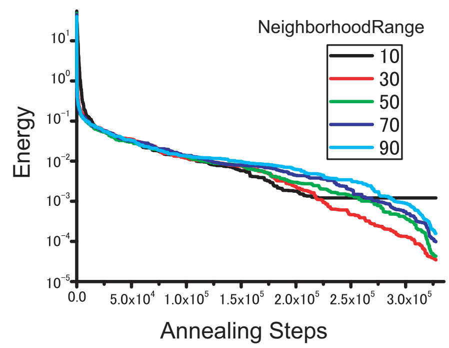


Fig. 6　等差に近傍幅を減少させた場合の解探索履歴

Fig. 6 より解探索中盤まで解探索性能に違いは見られないが, 解探索後半では, 初期近傍幅が 30, 50 のときに

良好な解探索性能を示した．また，この時の最良エネルギーは，近傍幅を固定した場合の 5 付近のときより良好な解が得られたと言える．

- 近傍幅（等比減少）

初期近傍幅を 10, 100, 1000 として，それぞれに 0.7, 0.8, 0.9 を乗算した場合の実験結果を Fig. 7 に示す．縦軸がエネルギーであり，横軸が探索数である．

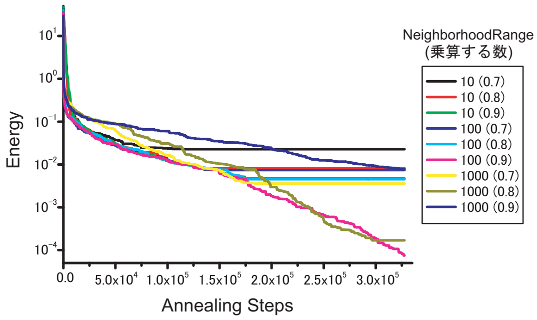


Fig. 7　初期近傍幅と乗算数の組合せによる解探索履歴

Fig. 7 より初期近傍幅 100 で 0.9 を乗算したときと，初期近傍幅 1000 で 0.8 を乗算したときは，共に良好な解探索性能を示している．また，初期近傍幅 10 のときや 0.7 を乗算するときはどれも解探索後半で最良エネルギーが変化していない．

3.3.3　近傍幅をランダムに生成した場合の検討

本稿では M, N を以下のように定義する．

近傍幅をランダムに生成する範囲を 0〜M, N 回アニーリングを行ってもエネルギー値が良好にならない場合，再度近傍幅をランダムに生成する．

- 近傍幅（M = 10）

3.4.1 節で述べたように，近傍幅を固定した場合，5 付近が良好な解探索性能を示した．そこで，M = 10 でランダムに生成させた場合の実験結果を以下に示す．Fig. 8 は N を 1 から 10000 まで変化させた場合の解探索履歴である．縦軸がエネルギーであり，横軸が探索数である．

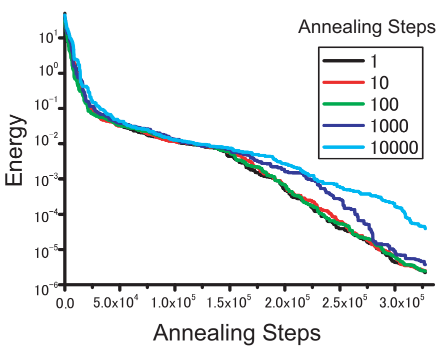


Fig. 8　M = 10, N = 1〜10000 における解探索履歴

Fig. 8 より解探索中盤まで解探索性能に違いは見られないが，解探索後半では，N が 1 から 100 までのときに良好な解探索性能を示した．従って次に N = 100 として，ランダムに生成する近傍幅の範囲を変化させて解探索能力の違いを検討する．

- 近傍幅（N = 100, M = 10〜50）

Fig. 9 は M を 10 から 50 まで 10 刻みで変化させたときの解探索履歴であり，縦軸がエネルギーであり，横軸が探索数を示す．

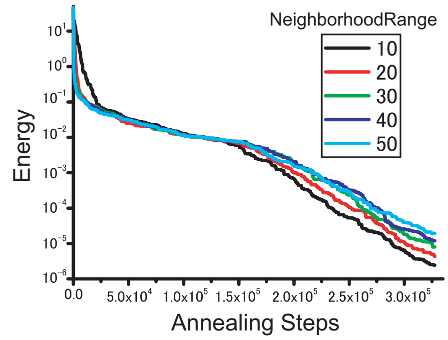


Fig. 9　M = 10〜50, N = 100 における解探索履歴

Fig. 9 より解探索中盤まではランダムに生成する近傍幅が大きい方が良好な解探索性能を示した．しかし，解探索後半では，ランダムに生成する近傍幅が小さい方が良好な解探索性能を示した．結果的にランダムに生成する近傍幅が小さい方が良好な解探索性能を示した．

- 近傍幅（N = 100, M = 1〜9）

Fig. 10 はランダムに生成する近傍幅を 1 から 9 まで 2 刻みで変化させたときの解探索履歴であり，縦軸がエネルギーであり，横軸が探索数を示す．

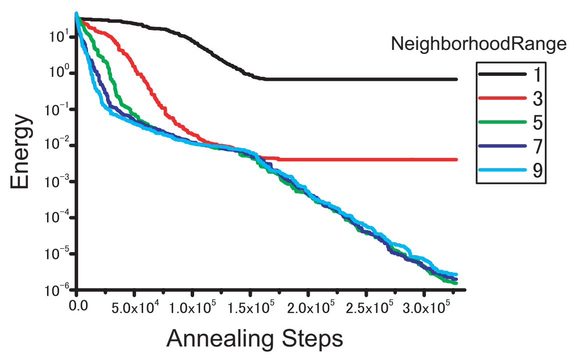


Fig. 10　M = 1〜9, N = 100 における解探索履歴

Fig. 10 より，ランダムに生成した近傍幅が 1 と 3 のときは解探索後半においてエネルギー値が変化しない．

次に，近傍幅を固定した場合とランダムに生成した場合の最良エネルギーを比較した．それを Fig. 11 に示す．

Fig. 11 より，近傍幅が 4.5 以上において近傍幅を固定した場合よりも近傍幅をランダム二生成した場合の方が良好な解探索性能を示した．

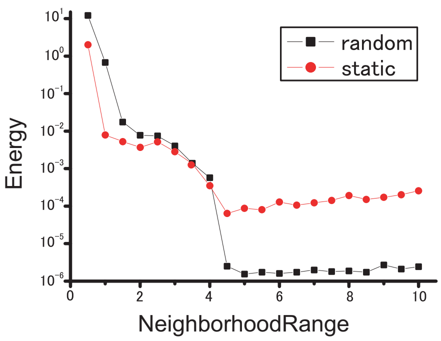


Fig. 11　近傍幅を固定した場合とランダムに生成した場合の各近傍幅における最良エネルギーの比較

4　考察

今回行った実験の結果について以下の3つの項目に分けてそれぞれ考察していく．

4.1　近傍幅を固定した場合

Fig. 4 より, 近傍幅が大きくなるに連れて解探索性能が悪くなっている．解探索履歴の動向を見ると, 解探索後半においてエネルギー値があまり減少していない．その理由は, Griewank 関数は大域的に見れば単峰性関数と考えることができ, 近傍幅が大きい場合比較的良好な解を持つ状態に推移できる．一方, 局所的に見れば多峰性関数と考えることができ, 良好な解を得るには最適解のある谷を探索しなければならない．しかし, 近傍幅が大きいと近くの谷を探索できる可能性が低いため, ある程度良好な解を得た後には, それ以上良好な解を得ることは難しいと考えられる．

Fig. 5 より, 解探索前半は, 近傍幅が大きいほうが良好な解を示している．近傍幅が小さい場合 1 回のアニーリングで推移する範囲が小さいためと考えられる．また, 解探索後半では, 近傍幅が 1, 2, 3 の場合, 局所解に収束してしまう．その理由として, 局所解に陥ると近傍幅が小さい場合, 一旦改悪方向に推移する必要があるが, 改悪方向への受理率が低くなるため局所解を抜け出せないと考えられる．

4.2　近傍幅を減少させた場合

Fig. 6 より, 初期近傍幅が 10 のときは解探索中盤で局所解に収束してしまう．その理由として, 大域的最適解のある谷に推移する前に近傍幅が小さくなってしまい, 局所解に陥ってしまうと考えられる．しかし, 初期近傍幅が 30 以上のときは良好な解探索性能を示している．その理由として, 大域的最適解のある谷に推移してから近傍幅が小さくなるためと考えられる．また, 初期近傍幅が大きすぎると, 解探索後半においてもそれほど近傍幅が小さくならないので, 良好な解探索性能を示さないと考えられる．また, 初期近傍幅が 30 付近では近傍幅を固定した場合に最良であった 5 付近よりも良好な解探索性能を示した．その理由として, 近傍幅を等差に減少させる手法では, 適した初期近傍幅を設定すると解探索前半は近傍幅が大きく, 大域的最適解のある谷に推移してから近傍幅が小さくなっているためと考えられる．

Fig. 7 より, 初期近傍幅 100 で 0.9 を乗算したときと, 初期近傍幅 1000 で 0.8 を乗算したときは, 共に良好な解を示している．その理由として, 解探索前半は近傍幅が大きく, 大域的最適解のある谷に推移してから近傍幅が小さくなっているためと考えられる．しかし, 等比に近傍幅を減少させる手法では, 前半に急激に近傍幅が減少し, 後半は緩やかに減少するため局所解に陥りやすいと考えられる．逆に初期近傍幅 1000 に 0.9 を乗算したときのように, 後半になっても近傍幅が小さくなっていない場合は, 近くの谷を探索できる可能性が小さくなる．良好な解を示したときと, 近傍幅を固定した場合, 最良であった 5 付近のときと同じくらいである．

4.3　近傍幅をランダムに生成した場合

Fig. 8 より, N ≦ 500 にしたときに良好な解探索性能を示した．その理由として, 最良エネルギーが良好にならないのに同じ条件で多くアニーリングを行っても無駄になっているためと考えられる．また, 良好にならない状態とは, 近傍幅が小さく局所解に陥ってしまった場合と, 大域的最適解のある谷を探索している状態で近傍幅が大きい場合である．

Fig. 9, Fig. 10 より, M ≦ 4 のときは, 局所解を抜け出せることができないので良好な解探索性能を示さなかった．しかし, M ＝ 5〜10 のときは, 近傍幅を固定した場合の同条件のときより良好な解探索性能を示した．その理由としては, 先ほど挙げた良好にならない状態の 2 つの場合を両方解決できる方法が, 今回実験した中ではランダム近傍幅の手法のみであるからと考えられる．

5　まとめ

今回の実験では, Griewank 関数に自作 SA を適応し, 近傍幅について検討した．

近傍幅を固定した場合では近傍幅を 5 付近に設定すれば良好な解探索性能を示した．減少近傍幅の手法では, 等差な手法では, 固定近傍幅よりも良好な解探索性能を示した．また, ランダム近傍幅の手法では, 固定近傍幅よりも明らかに良好な解探索性能を示した．

参考文献

1) 数値計算法講義資料
2) 対象問題,　`http://mikilab.doshisha.ac.jp/dia/research/p`