

SA(Simulated Annealing) における温度パラメータ検討
池田 聡

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) は, Metropolis らによって提案された最適化問題を解く近似解法の 1 つであり, 高温で溶融状態にある物質を徐々に冷却することにより欠陥の少ない結晶を得るプロセスである焼きなましを計算機上で模擬した手法である. SA では総アニーリング数, 最高温度, 最低温度, クーリング周期, 近傍などのパラメータを適切に設定することにより良い解探索を行うことが出来る. しかし, 適切なパラメータは対象問題によって異なるため, 対象問題ごとに適切なパラメータ設定が必要である

本報告では, 自作 SA を Rosenbrock 関数に適用し, パラメータが解探索性能に与える影響について検討を行う. なお, 今回検討するパラメータは最高温度, 最低温度の温度パラメータである.

2 SA における温度パラメータ

SA における温度パラメータは, 次状態 x' がエネルギーが増大する改悪方向へ生成された場合にも遷移をするか否かを判定する際に用いられる. 受理判定の確率には式 (1) で示される Metropolis 基準が採用される. Metropolis 基準が返す値は確率であり, Fig. 1 に示すように温度 T によって変化する. 温度が高温の場合は, 改悪方向への遷移を受理する確率が高くなり, 低温の場合には改悪方向への遷移を受理する確率は低くなる.

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

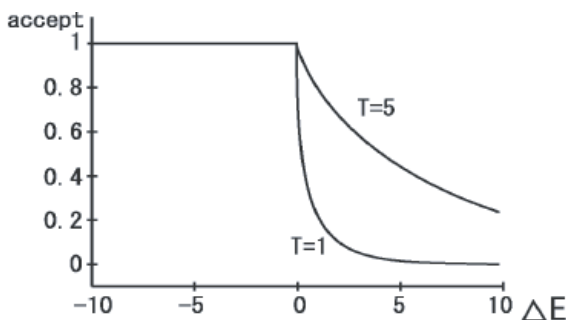


Fig. 1 状態遷移の受理確率

3 数値実験

3.1 実験概要

自作 SA を用いて, 最高温度, 最低温度の温度パラメータの検討を行う. 対象問題は, Rosenbrock 関数を用いる.

3.2 Rosenbrock 関数

Rosenbrock 関数は, 設計変数間に依存関係を持つ単峰性関数であり, 式 (2) で表される. Fig. 2 に設計変数が 2 次元の場合の外形とエネルギーの等高線を示す.

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

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

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

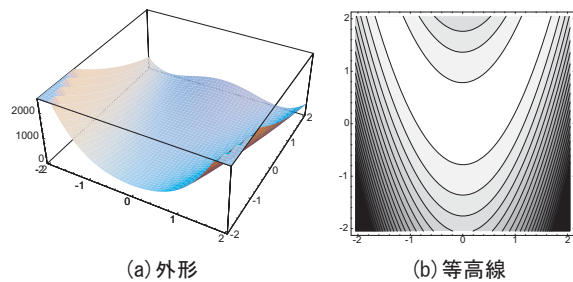


Fig. 2 Rosenbrock 関数 (2 次元)

Rosenbrock 関数はすべての設計変数が 1.0 の時, 最適解となる関数である. 本実験では, エネルギー 0 を満たす大域的最適解を発見することを目的としている. すなわち, Rosenbrock 関数の最小化を行う.

3.3 パラメータの設定

本実験で用いたパラメータを Table 1 に示す. 以下に示すように, 最高温度, 最低温度をそれぞれいくつか用意し, 実験を行う.

- 最高温度 (最低温度: 10^{-3} で固定)
 - $10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 10^0, 10^1, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$
- 最低温度 (最高温度: 10^0 で固定)
 - $10^0, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8}, 10^{-9}$

Table 1 実験パラメータ

パラメータ	値
近傍	0.002
次元数	2
クーリング周期	32
アニーリングステップ	320000
試行回数	100

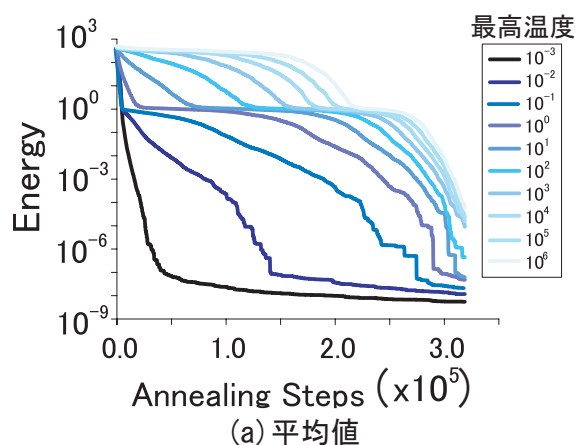
4 実験結果

4.1 最高温度

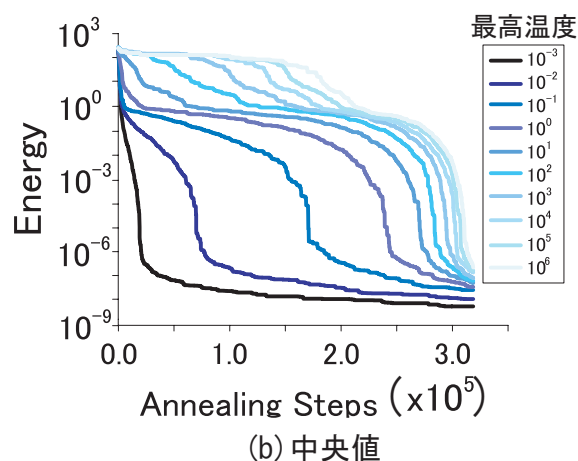
Table ??に示すように、最低温度は 10^{-3} で固定とし、最高温度のみを変化させ実験を行った。実験結果をTable 2, Fig. 3に示す。なお、Table 2では100回試行における最良エネルギーの平均値および中央値を示し、Fig. 3は100回試行における平均値および中央値の解探索履歴を示す。Fig. 3の縦軸はエネルギー値、横軸はアニーリング数を示している。

Table 2 最高温度の変化と最良エネルギーの関係
(最低温度： 10^{-3} で固定)

最高温度	最良エネルギー (平均値)	最良エネルギー (中央値)
10^{-3}	5.55×10^{-9}	3.44×10^{-9}
10^{-2}	1.18×10^{-8}	7.07×10^{-9}
10^{-1}	2.56×10^{-8}	1.69×10^{-8}
10^0	4.86×10^{-8}	2.25×10^{-8}
10^1	6.10×10^{-8}	3.34×10^{-8}
10^2	4.47×10^{-7}	3.60×10^{-8}
10^3	9.05×10^{-6}	4.68×10^{-8}
10^4	1.60×10^{-5}	9.15×10^{-8}
10^5	2.37×10^{-5}	1.11×10^{-7}
10^6	5.36×10^{-5}	1.49×10^{-7}



(a) 平均値



(b) 中央値

Fig. 3 解探索履歴 (最低温度： 10^{-3} で固定)

最低温度が固定の場合、Table 2より、最高温度が低い方がより良い解が得られていることが確認された。また、Fig. 3より、最高温度が低い方がより早く解が収束することが確認された。これより、Rosenbrock 関数では、最高温度がより低い値を取る方が、解探索性能を向上させることができると考えられる。

4.2 最低温度

Table ??に示すように、最高温度は100で固定とし、最低温度のみを変化させ実験を行った。実験結果をTable 3, Fig. 4に示す。なお、Table 3では100回試行の最良エネルギーの平均値および中央値を示し、Fig. 4は100回試行における平均値および中央値の解探索履歴を示す。Fig. 4の縦軸はエネルギー値、横軸はアニーリング数を示している。

Table 3 最低温度の変化と最良エネルギーの関係
(最高温度： 10^0 で固定)

最低温度	最良エネルギー (平均値)	最良エネルギー (中央値)
10^{-9}	3.46×10^{-10}	2.09×10^{-10}
10^{-8}	4.37×10^{-10}	3.24×10^{-10}
10^{-7}	6.63×10^{-10}	3.84×10^{-10}
10^{-6}	1.27×10^{-9}	7.47×10^{-10}
10^{-5}	2.78×10^{-9}	2.03×10^{-9}
10^{-4}	9.24×10^{-9}	7.07×10^{-9}
10^{-3}	4.86×10^{-8}	2.25×10^{-8}
10^{-2}	2.27×10^{-3}	9.50×10^{-7}
10^{-1}	2.15×10^{-1}	4.52×10^{-2}
10^0	5.66×10^{-1}	1.46×10^{-1}

最高温度が固定の場合、Table 3より、最低温度が低い方がより良い解が得られていることが確認された。また、Fig. 4より、最低温度が低い方がより早く解が収束することが確認された。これより、Rosenbrock 関数では、最低温度がより低い値を取る方が、解探索性能を向上させることができると考えられる。

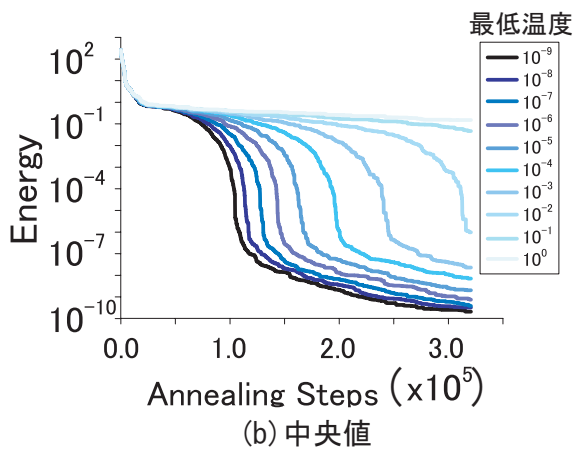
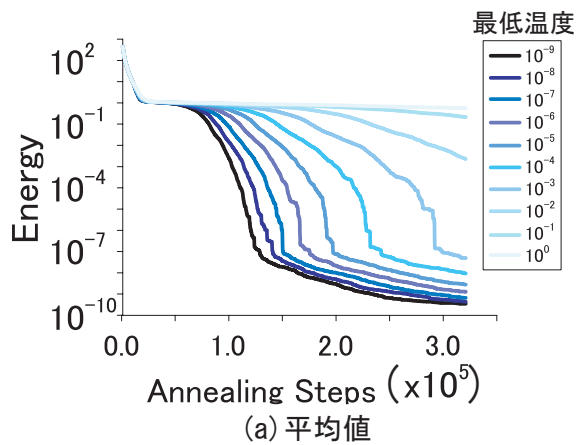


Fig. 4 解探索履歴 (最高温度: 10^0 で固定)

5 考察

実験結果より, Rosenbrock 関数において, 最高温度, 最低温度はそれぞれより低い値の方がより良い解を得ることが確認された. この結果には, Rosenbrock 関数が単峰性関数であり, 局所解が存在しないことが考えられる. 対象問題を Rosenbrock 関数とした場合, 局所解に陥るのを防ぐため, 改悪方向への遷移を認めると, 無駄な探索が増す. このため, 解探索性能が落ち, 解の収束が遅くなると考えられる. そこで, これを検証するために SA のアルゴリズムから温度の概念を抜いたアルゴリズムである確率的山登り法 (改悪方向を認めず, 改良方向のみに遷移) を用いて, 同様の実験を行った.

5.1 確率的山登り法での実験

確率的山登り法を用いて, Rosenbrock 関数の最小化を行う. パラメータは Table 1 に示した値を用いる. 実験結果を Table 4, Fig. 5 に示す. Table 3 では 100 回試行の最良エネルギーの平均値および中央値を示し, Fig. 5 は平均値および中央値の解探索履歴を示す. Fig. 5 の縦軸はエネルギー値, 横軸はアニーリング数を示している. また, 比較の対象として, 最高温度を変化させた

際に最も有効な解探索を行った時のパラメータである最高温度が 10^{-3} 最低温度が 10^{-3} の時の結果と, 最低温度を変化させた際に最も有効な解探索を行った時のパラメータである最高温度が 10^0 , 最低温度が 10^{-9} の時の結果もあわせて示す.

Table 4 確率的山登り法で実験を行った最良エネルギー

手法・設定	Energy (平均値)	Energy (中央値)
確率的山登り法	1.58×10^{-10}	1.15×10^{-10}
SA: 最高温度: 10^{-3} 最低温度: 10^{-3}	5.55×10^{-9}	3.44×10^{-9}
SA: 最高温度: 10^0 最低温度: 10^{-9}	3.46×10^{-10}	3.44×10^{-10}

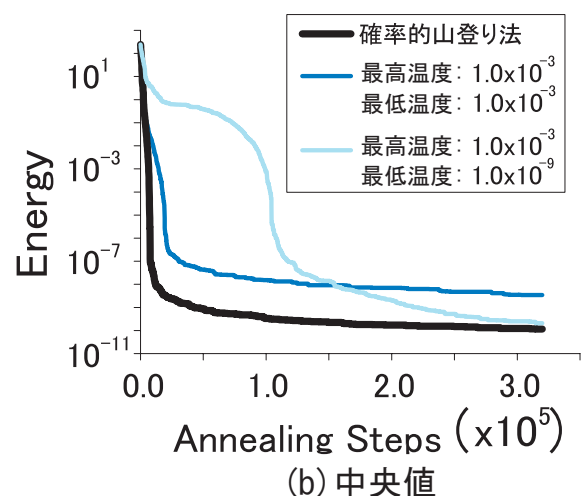
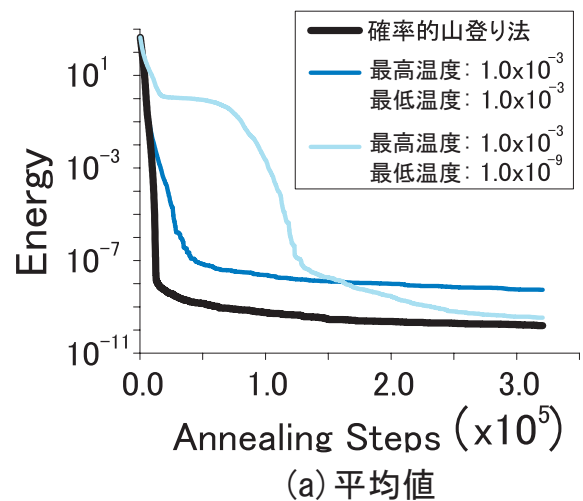


Fig. 5 SA と確率的山登り法の解探索履歴

Fig. 5 より, 確率的山登り法が最も有効な解探索を行っていることが確認された. この結果より, Rosenbrock 関数のような局所解を持たない単峰性関数においては, 改悪方向への解探索の必要はなく, 改良方向のみの解探索を行うことが良いと言える.

6 まとめ

本報告では，SA のパラメータである温度パラメータ（最高温度，最低温度）について検討を行った．その結果，Rosenbrock 関数では温度パラメータを低い値に設定すると解探索性能が向上することが確認された．そして，最高温度，最低温度共に低い値にする程，良い解が得られることより，改悪方向への解探索を行う必要性がないと考えられた．そこで，改悪方向への解探索をせず，改良方向のみの解探索を行う確率的山登り法を用いて同様の実験を行った．その結果，確率的山登り法が最も有効な解探索を行っていることが確認された．Rosenbrock 関数のような局所解が存在しない単峰性関数に対しては，SA よりも改良方向への解探索のみを行う確率的山登り法の方が有効な探索を行うことがわかった．

これより，局所解が存在しない単峰性関数においては，温度パラメータが解探索性能の向上に重要ではないパラメータであるとわかった．

参考文献

- 1) 喜多一：シミュレーテッドアニリング，日本ファジィ学会誌 Vol.9 No.6，1997
- 2) Bruce E. Rosen, 中野良平：シミュレーテッドアニリング - 基礎と最新技術 - ，人工知能学会誌 Vol.9 No.3，1994