Griewangk 関数における Simulated Annealing の温度検討

河本 敏孝

1 はじめに

SA における温度パラメータはメトロポリス基準における改悪受理率判定の際に適用する．本報告では，Java で実装した SA により，Griewangk 関数での温度パラメータについて検討を行う．

2 Simulated Annealing

SA の基礎となる考えは Metropolis らが 1953 年に発表した焼きなましと呼ばれる過熱炉内の固体の冷却過程を Simulate するアルゴリズムに端を発し，最適化問題，特に組み合わせ最適化問題を解く汎用近似解法の１つとして用いられている．SA は，局所探索をランダムに行いながら，更に解に改良が見られない場合でも，新しい解に移る可能性を残すことで局所解に陥ることを防ぐことができる点が優れている．(Fig. 1 参照)

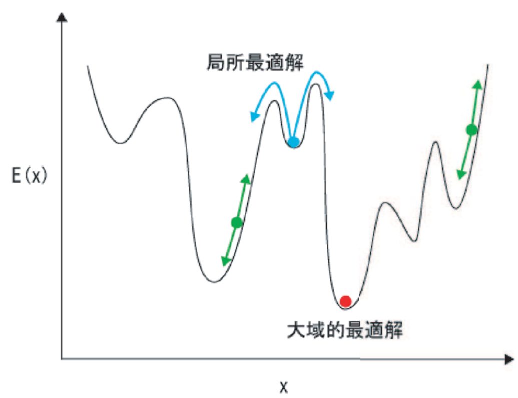


Fig. 1　局所解からの脱出

2.1　SA の特徴

物質を融解状態になるまで加熱し，徐々に冷却する操作を焼きなまし（Annealing ）という．この焼きなましにより，エネルギーが最も少ない状態に分子が配列し，結晶構造を形成させることができる．この物理プロセスに着想を得て，これを計算機上で模擬することにより最適化問題を解こうとする手法を SA と呼んでいる．SA は構成が簡単で理解しやすく，適用範囲の広い組み合わせ最適化手法となっている．

SA には以下のような長所がある．

- 頑強性
  多くの最適化解法が局所最適解に捕捉される欠点を持つのに対し，SA は容易に捕捉されず，理論上は真の最適解に，実際には準最適解に到達できる．これは，解品質が改良方向のみ探索を進めるのではなく，時折，改悪する方向も選ぶ仕組みによる．

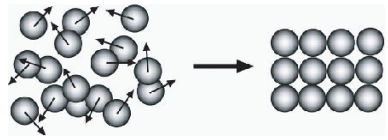


Fig. 2　焼きなまし

- 汎用性
  枠組み自体が極めて汎用にできているので，実に広範囲の問題に適用できる．柔軟性目的関数 (コスト関数) に対する制約がほとんどない．滑らかさ，連続性，決定性はいずれも満たされなくてもよい．つまり，目的関数は微分可能でなくても，複雑な式で求まるものであっても，確率的であってもよい．さらに，問題に複雑な境界条件があってもよい．

- 簡便性
  アルゴリズムはきわめて簡単で誰でも容易に作れる．また，SA には以下の欠点もある． 非効率性最適解を得るのに非常に多くの計算量を要する．この問題を克服するため，逐次処理のまま高速なアニーリングを導入する高速化の研究，および並列化して高速化を図る並列化の研究が近年見られる．

- 操作性
  汎用解法であるため，特定の問題を解く場合には，パラメータをチューニングする必要がある．特に，温度と呼ばれる制御パラメータのチューニングが極めて困難となる．

2.2　SA の基本アルゴリズム

はじめに，SA が適用可能な対象について考える．有限の状態からなる状態空間Ωがあって，各状態 x に対してエネルギー E(x) が定義されているとする．SA では目的関数をエネルギー関数と呼ぶ．SA は，最小のエネルギーの状態，すなわち真の最適状態 x^* を求めることが目的である．与えられた初期状態から出発して状態を推移させ，最終的には最適状態に行きつくことが期待される．SA の基本アルゴリズムを Fig. 3 に示す．

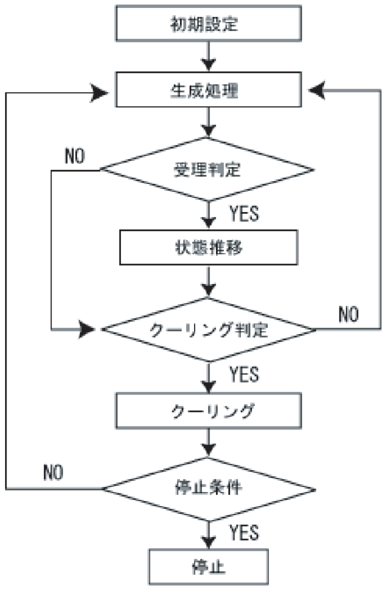
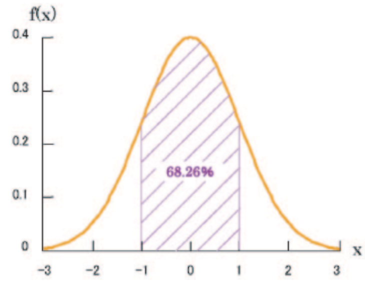
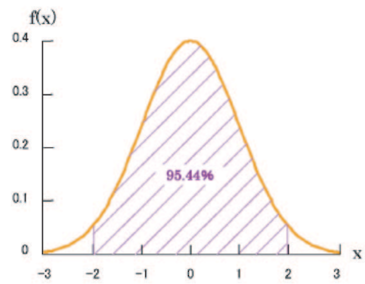


Fig. 3　SA の基本的なアルゴリズム





2.3　正規分布 SA とにおける温度パラメータの決定法

今回の温度分布は，一様 SA についての実験であるので，本来の正規分布 SA の温度パラメータの決定方法について少し触れておく．この決定方法については三木研究室で採用している方法を記述します．

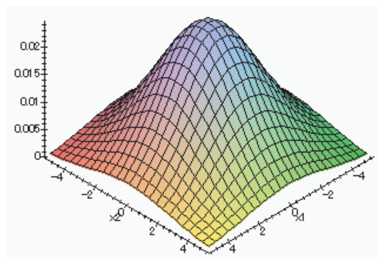
組合せ最適化問題における最高温度は，最大の改悪が生じる状態遷移がある値（たとえば 50 %）の確率で受理されるような温度に設定するという考え方が一般的に用いられる．しかしながら，近傍決定に温度スケジュールを利用する正規分布 SA では，温度スケジュールが近傍構造を決定してしまうため，不必要に高温の場合は定義域を超える確率が高くなり，無駄な試行が増えることになる．一方，最低温度に関しても，組合せ最適化問題では最小の改悪がある確率で受理されるという基準で考えるが，最高温度と同様，最低温度が低すぎると探索領域は非現実的に小さくなる恐れがある．

最高温度は定義域をカバーするのに十分な温度に設定する．ここでは，近傍の分布として正規分布を用いているため，各変数の標準偏差がその変数の設計領域の 1/4 となるようにした．これにより，現在の解が設計空間の中央にあるときには，それが端まで移動する確率は 4.6 %であり，現在の解が設計空間の端にあるときに他の端まで移動する確率は 0.0 １%程度となる．

平均値が 0，標準偏差σが 1 の場合の正規分布 Fig 4.1, Fig 4.2 に示す．Fig 4.1 において，平均値±σの範囲に含まれる割合が 68.26 パーセントであることが分かる．

一方，Fig 2.4 により，平均値± 2 σの範囲に含まれる割合が 95.44 %となるので，この範囲以外に含まれることになる割合は 4.6 %となる．

設計空間が [-5.12，5.12）の場合の最高温度における 2 次元近傍の確率分布を Fig 2.5 に示す．



最低温度に関しては，期待する解精度が得られることを基準として決定する．今回は，各変数の標準偏差がその変数の設計空間に対して 1/100 程度の精度となるような最低温度と，同様に各変数の標準偏差がその変数の設計領域の 1/400 程度（最高温度における探索領域に対して 1/100 程度の精度）となる最低温度で実験を行なった．

以上の考え方により，最高温度と最低温度の決定は，問題の設計空間に依存することになる．このため，連続最適化問題に対して決められている設計空間を，あらかじめ調節することにより，全ての問題を同じ温度スケジュールで実行することが可能になる．

三木研究室の Genetic Algorithm 研究グループで用いられている対象問題である Rastrigin 関数，Rosenbrock 関数，Griewangk 関数，Ridge 関数，Schwefel 関数の 5 種類のテスト関数に対し，2 次元でいずれの設計空間も，[5.12,5.12) に設定して比較実験が行われている．その結果，全てのテスト関数に対してその最高温度が 6.5536 となり，最低温度は 0.01（設計空間に対して 1/100 の精度），もしくは 6.5536 × 1.E- 4（設計空間に対して 1/400 の精度）に決定することになっている．

3　対象問題

今回は，検証する対象問題として Griewangk 関数を用いた．Griewangk 関数は次の式で表される．

$$F_{Griewank}(x) = 1 + \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^{n} \left(\cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}} \right) \right)$$
$$(-512 \leq x_i < 512)$$
$$min(F_{Griewank}(x)) = F(0, 0, \ldots, 0) = 0$$

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ため，準最適解は比較的容易に求まる．局所的には多数の局所的最適解が存在し，最適解を発見するのは困難である．Griewangk 関数に関する形状の概要を以下 Fig. 4，Fig. 5，Fig. 6，Fig. 7 に示す．

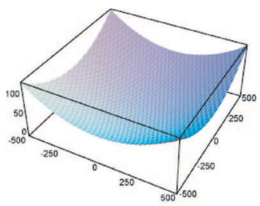


Fig. 4　外形

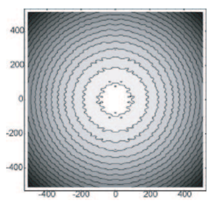


Fig. 5　等高線

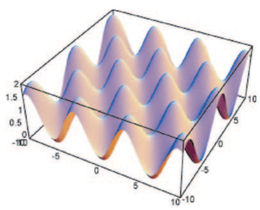


Fig. 6　外形（最適解付近）

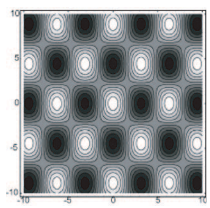


Fig. 7　等高線（最適解付近）

4　パラメータ検討

今回のパラメータ検討を行う際にデフォルト値として次の値を与えた．この値をもとに温度パラメータを変化させることによって値の変化について考察する．

4.1　パラメータ

今回は最低温度をそれぞれ固定し，最高温度を変化させることによって最良解の動きの変化をみた．それぞれの結果の比較ならびに，デフォルト値との比較をグラフに示す．

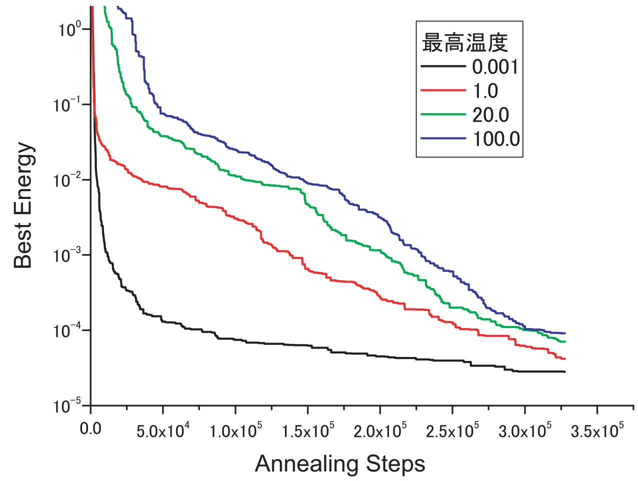
4.1.1　最高温度 0.001 のとき

最高温度は 100.0，20.0，1.0，0.001 の 4 パターンを検討した．このとき検討した結果のグラフを次に示す．

ここから次のようなことがいえる．

Table 1　実験に用いたパラメータ

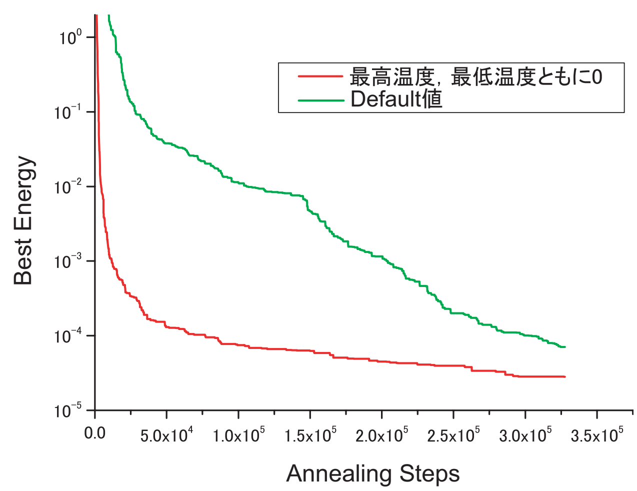
Object problem	Griewangk
Max Temperature	20.0
Min Temperature	0.001
Neighborhood Range	5.0
Cooling Cycle	32
Number of annealing	327680



- 最高温度が約 20.0〜100.0 の高温領域では解の精度ほとんど変わらない．
- 最高温度が約 0.01〜1.0 の低温領域で解の精度は急激に良くなる．

4.1.2　温度 0 のとき

ここで，温度が下がれば下がるほど良解が得られることがわかったので最高温度と最低温度を 0 として実験を行った．ただし，この場合の Cooling Rate は関係がないので 0 とする．

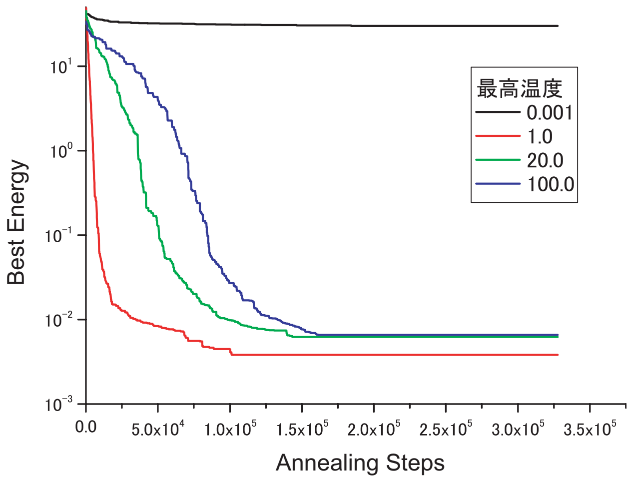


ここから次のようなことがいえる．

- デフォルト値よりもはるかにいい結果が得られる．
- Annealing Steps が少ない段階で最良解付近に落ち着く．

4.1.3　近傍幅が 2.5 のとき

次に近傍幅を変えることで温度にどういった影響をもたらすのかを検討する．5.0 にしていた近傍幅を半分の 2.5 にする．2.5 という値は近傍幅が 5.0 よりも小さく，エネルギー値として悪くなるであろう近傍値として採用した．結果のグラフを次に示す．



ここから次のようなことがいえる．

- 近傍を下げたことによって，値が悪くなった．
- 最高温度を 0.001 にすると最良解がほとんど変化しない．

5　考察

5.1　最低温度 0.001 のとき

温度についてわかったことは，良い固定近傍幅では最高温度を下げれば下げるほど解が改良方向に遷移していくことである．エネルギー差 dE が大きくなるほど改悪受理率は下がり，低温になるほど改悪受理率は下がる．すなわち，低温領域では大きな改悪を受理しない．
Griewangk 関数の特徴として，エネルギー差 dE は大きなもので 2.0 しかない，そのため最高温度を低く設定するとメトロポリス基準による改悪受理率が下がるため，改悪方向へ遷移することがほとんどなくほぼ改良方向へ遷移するといっていい．
本実験では，近傍幅が 5.0 であるため近傍範囲内で生成される良解に遷移する．Griewangk 関数は大域的に見れば単峰性であるので温度が低ければ改良方向への遷移を繰り返しながら局所解に陥ることなく最良解に近づく．

5.2　温度 0 のとき

温度 0 の場合には改悪を受理することがないので改良方向に進んでも良解を得られるような固定近傍幅である必要がある．本実験では，Griewangk 関数の特性として等高線上における局所解と局所解の幅が 5.0 よりもわずかに小さいため近傍幅を 5.0 に設定することで局所解に陥いることを防げる．
結論として，温度が 0 になったとしても問題はないことが得られた．

5.3　近傍幅を狭めて検討したとき

最高温度を 0.001 に下げることでエネルギー値が極端に悪くなったのは，エネルギー差 dE が大きなもので 2.0 しかなく，最高温度が低いことでメトロポリス基準によって改悪方向に遷移することがほぼない．そのため，固定近傍幅 2.5 という範囲の中で改良を繰り返してしまうため，局所解に陥ってしまっている．
これより，近傍幅によっては，温度をパラメータにもつメトロポリス基準が局所最適解から抜け出すための重要なファクターになることがわかった．

6　まとめ

今回の Griewangk 関数において SA のパラメータ検討では，比較的良解が得られるようにデフォルト値を設定した．特に，固定近傍幅は 5.0 という Griewangk 関数の隣接する局所最適解の距離とほぼ等しい範囲に設定されているので，最高温度を低い値にすれば無駄な探索が減り，少ない探索数で最適解付近まで到達でき，かつ最良解を得られるという結論に至る．

参考文献

1) 小野景子，同志社大学工学部知識工学科　卒業論文，2001

2) 及川雅隆，同志社大学工学部知識工学科　ISDL レポート，2002