

シミュレーテッドアニーリングにおける近傍パラメータの検討
高畑 泰祐

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) では, 良好な解探索能力を得るために最適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 を連続最適化問題である Schwefel 関数に適用し, 近傍が解探索能力に与える影響について検討を行う.

2 Simulated Annealing(SA) の概要

SA とは, 高温で融解状態にある物質を徐々に冷却することによって, 欠陥の少ない結晶を生成するプロセスである“焼きなまし”を計算機上で模倣した手法である.

SA では次状態 x' が現状態 x よりも良い目的関数値を得るならば解を x' に遷移するが, 次状態が現状態よりも悪い目的関数値となる改悪方向への遷移も一定の確率で許している. このため, 目的関数が複数の極小値を持つ場合でも, 大域的最適解を得ることができる.

本実験では, 自作の SA プログラムを使用した. 受理判定の確率には Metropolis 基準を採用し, 次状態の生成処理には一様分布を用いた.

3 数値実験

3.1 対象問題

本実験では, 近傍について検討を行った. 対象問題は, 式 (1) で表される Schwefel 関数であり, 次元数 2 の最小化問題として扱う. Schwefel 関数は, すべての設計変数が 420.968750 の時に “ $-418.98288727 \times$ 次元数” を最適解として持つ関数である. また, 最適解を探索領域の境界付近に持つ多峰性関数で, 最適解の周辺に準最適解が存在しない. そのため, 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, 局所解に収束する. Fig. 1 に次元数が 2 の場合の外形と, エネルギーの等高線を示す.

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

$(-512 \leq x_i < 512)$

また, 検討する SA パラメータ以外の初期値は, Table 1 に示す値に設定した.

3.2 実験内容

本実験では, 複数の最高温度において, 近傍のみを変化させ, 近傍が解探索に与える影響を検討した.

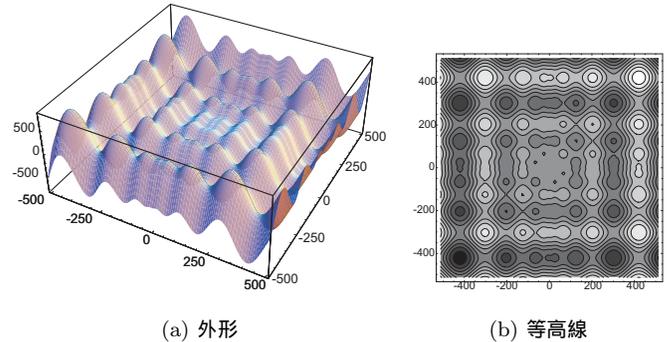


Fig. 1 Schwefel 関数 (2 次元)

Table 1 初期値

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

今回検討を行った最高温度は, 10, 25, 40, 60, 100, 150, 200 であり, それぞれに対して近傍を 1 ~ 512 まで 16 パターン変化させ, その他のパラメータは Table 1 の値を用いた. また, 本実験ではエネルギー値が -837 以下のときを最良解とする.

3.3 実験結果

100 回試行の最良エネルギーの中央値を Table 2, 中央値の各近傍におけるエネルギーの中央値の変化を Fig. 2 に示す. Fig. 2 の縦軸はエネルギー値, 横軸は近傍幅を示している.

Fig. 2 より, 近傍 200 でそれ以上大きく近傍をとってもほぼ変化が見られなくなっている. また, 温度 25 では近傍 512 以外で局所解に陥っていることがわかる. これより温度が低いと, 近傍をいくらに設定しても最良解に到達することはなかった. また Table 2 を見ると, 温度 25 では近傍 512 で最良解が得られ, 温度 40 では近傍 200, 温度 60 では近傍 150, 温度 100 では近傍 64 で最良解に至っている. Schwefel 関数では, 温度が 40 よりも低いと近傍を大きく設定しなければ局所解に陥る. 逆に温度を 40 以上に設定すれば, 近傍はより小さい値でも最良解が得られることがわかった.

Table 2 近傍を変化させた結果

近傍幅	温度 25	温度 40	温度 60	温度 100
1	-482.62	-482.62	-502.39	-482.62
2	-482.62	-482.62	-482.62	-502.39
4	-502.39	-502.39	-502.39	-541.86
8	-502.39	-502.39	-506.06	-604.76
16	-502.39	-506.06	-541.86	-719.53
32	-502.39	-601.09	-604.75	-719.53
64	-505.72	-601.09	-719.45	-837.89
100	-601.09	-620.80	-719.52	-837.96
150	-719.52	-719.52	-837.96	-837.96
200	-719.53	-837.86	-837.95	-837.96
250	-722.60	-837.92	-837.95	-837.95
300	-722.46	-837.94	-837.95	-837.95
350	-723.13	-837.95	-837.93	-837.94
400	-723.06	-837.93	-837.94	-837.93
450	-722.90	-837.93	-837.93	-837.94
512	-837.93	-837.93	-837.93	-837.94

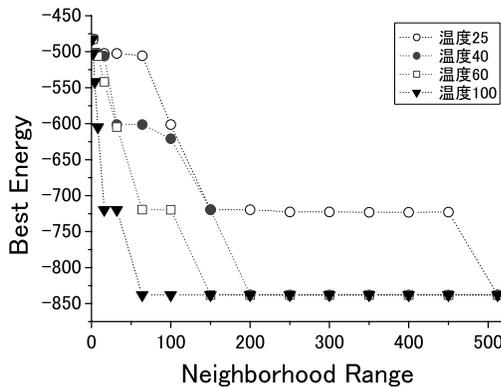


Fig. 2 近傍によるエネルギーの変化

4 考察

実験結果より、温度が低いと近傍幅をどのような値に設定しても、最良解を得ることができなかったが、温度が高い場合は近傍幅を小さく設定しても最良解に到達することができた。したがって、近傍と温度には密接な関係があることがわかった。また Fig. 2 より、温度 40 以上になると近傍が 200 より大きい値では必ず最良解に達しているため、近傍 200 付近が意味を持つのではないかと考えた。

そこで、温度 100 を固定し、近傍のみを変化させた場合の探索点の分布を調べた。Fig. 3 に近傍 32, 100, 200, 512 の場合の探索点の分布を示す。各図の右上部分の丸い範囲が最適解領域である。Fig. 3(a) から、近

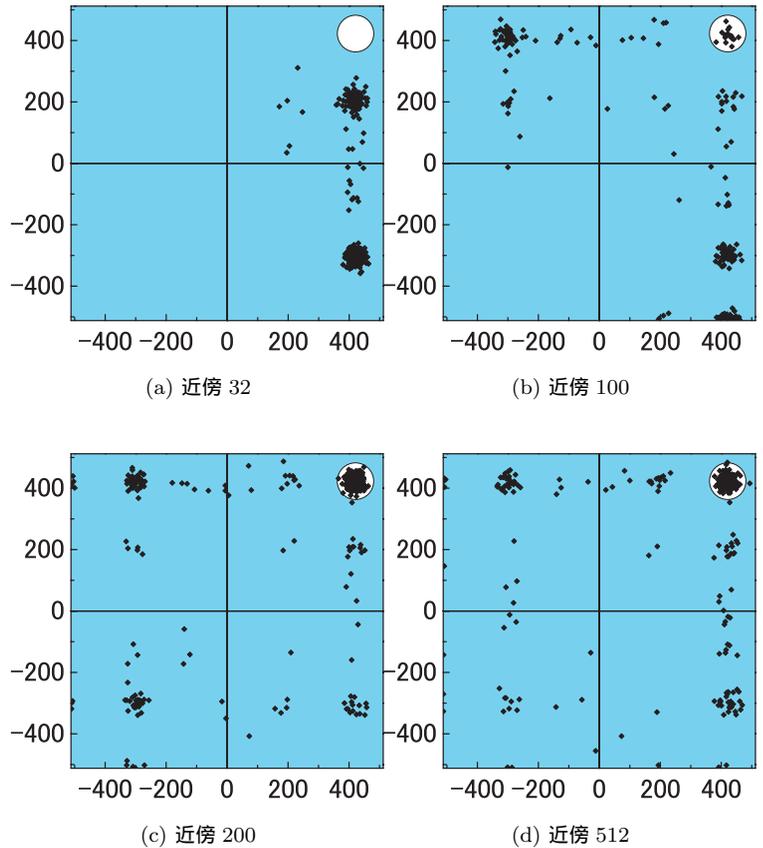


Fig. 3 探索点の分布

傍が小さいと局所的な探索が行われ、収束に要する時間は短縮されるが、初期点に依存してしまい、局所解から抜け出すことができずに探索が終了している。一方で、近傍 200 以上では Fig. 3(c), Fig. 3(d) より、大域的な探索が行われ、収束に要する時間は膨大し効率的ではないが、うまく遷移が行われ、最良解が得られていることがわかる。

Fig. 3 から、近傍が 200 を越えると、設計変数領域が横 $-300 \sim 400$ 、縦 $-300 \sim 400$ の正方形の枠上の点に集中しており、これは Fig. 1(b) で見るとちょうどエネルギー値が低くなっている部分に相当している。近傍が 200 以上だと、次状態がこの枠上に生成され、遷移がこの枠にそって起こっていくのではないと思われる。そうすると、この枠上に最適解が存在するため、より良い値が得られるのである。

参考文献

- 1) 昌山 智, 廣安 知之, 三木 光範. 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. ISDL Report No.20030711003. 2003.
- 2) 及川 雅隆. 連続最適化問題における近傍並列シミュレーテッドアニーリング. 同志社大学工学部知識工学科卒業論文. 2003.
- 3) 伏見 俊彦, 三木 光範, 廣安 知之. 適応的近傍並列における解通信の検討. ISDL Report No.20020503016. 2002.