

シミュレーテッドアニーリングの温度パラメータ検討  
中 請 隆

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) は, 良好な解探索能力を得るためには適切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 Rastrigin 関数に適用し, 温度パラメータに注目し, 温度パラメータが解探索能力に与える影響について検討を行った。

2 SA について

2.1 SA の概要

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) の基礎となる考え方は, 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個体の冷却過程をシミュレートするアルゴリズムに端を発する。

SA は, Fig. 1 に示すように高温で融解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, 計算機上で模倣した手法である。

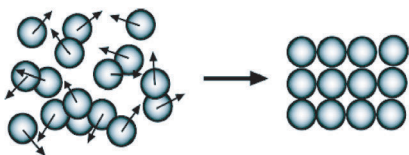


Fig. 1 原子の動き

2.2 SA のアルゴリズム

SA は, 与えられた初期状態から探索を始め, 状態を遷移させて探索を続けることで, 最終的にはエネルギーが最小となる状態, つまり目的関数の大域的最適解を発見することを目的としている。

2.2.1 SA の基本となるアルゴリズム

SA のアルゴリズムでは生成, 受理, およびクーリングの 3 つが重要なプロセスとなる。SA のアルゴリズムを Fig. 2 に示す。SA は次の状態を生成し, 設計変数内に入るまで次の状態を何度も生成する。そうして生成された次の状態の受理判定を行う。受理判定の確率には式 (1) の Metropolis 基準が採用される。

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

この基準が返す値は遷移する確率であり, 温度  $T$  によって変化する。温度  $T$  は, エネルギー値が増大する改悪方向への遷移確率に大きな影響を与える。高温の場合は改悪方向への遷移確率も大きくなり, 反対に低温の場合は改悪方向へ遷移する確率は小さくなる。これをアニーリングといい, 一定回数繰り返した後にクーリングを行い, 決まったアニーリング数を行うと停止する。

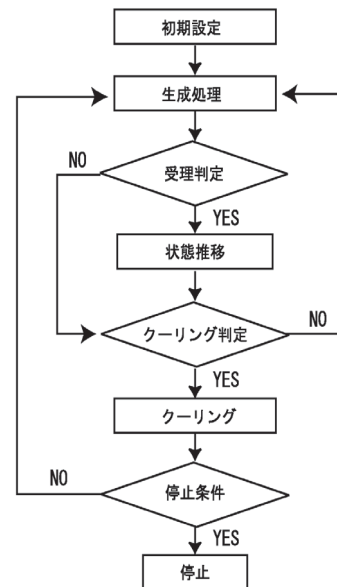


Fig. 2 SA のアルゴリズム

3 数値実験

3.1 実験概要

実験では, 最高温度, 最低温度について検討を行った。パラメータの初期値は Table 1 に示す値に設定し, 検討するパラメータ以外は Table 1 の初期値を用いた。

Table 1 パラメータの初期値

パラメータ	値
最高温度	10.0
最低温度	0.01
次元数	2
アニーリンクステップ	320000
クーリング回数	32

### 3.2 対象問題

対象問題は、式 (2) で表される 2 次元 Rastrigin 関数である。Rastrigin 関数は、設計変数間に依存関係を持たない多峰性関数である。Fig. 3 に 2 次元の場合の外形とエネルギーの等高線を示す。

$$F_{Rastrigin}(x) = 10n + \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)) \quad (2)$$

$$(-5.12 \leq x_i < 5.12)$$

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

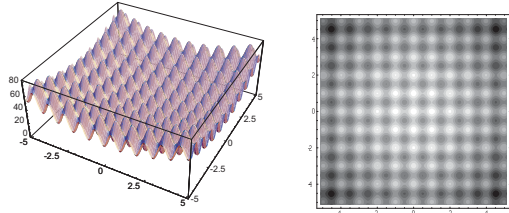


Fig. 3 Rastrigin 関数

## 4 実験結果

### 4.1 最高温度パラメータの検討

最高温度パラメータのみを変化させ、解探索に与える影響を検討した。検討を行った最高温度は 0.01 から 1000000 まで公比 10 で変化させたものである。その他のパラメータは Table 1 の値を用いた。最高温度パラメータに関する検討結果を Table 2, Fig. 4, Fig. 5 に示す。Table 2 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 では平均値 Fig. 5 では中央値の解探索履歴の比較を行った。Fig. 4, 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。

Table 2 最高温度を変化させた結果

Max temp.	Energy(Average)	Energy(Median)
0.01	0.000903	0.000505
0.1	0.000837	0.000533
1	0.000823	0.000658
10	0.001079	0.000811
100	0.001299	0.000782
1000	0.001913	0.001706
10000	0.001907	0.001495
100000	0.002003	0.001537
1000000	0.002414	0.001567

Fig. 4, Fig. 5 のように最高温度を変化させた場合、温度 1000000, 100000, 10000, 1000 においては、およそ 200000 ステップ前後で急激にエネルギーが下がっている。そこでそれら 4 つの温度に対して、急激にエネルギーが下がっている点を調べたところ、Table 3 のよう

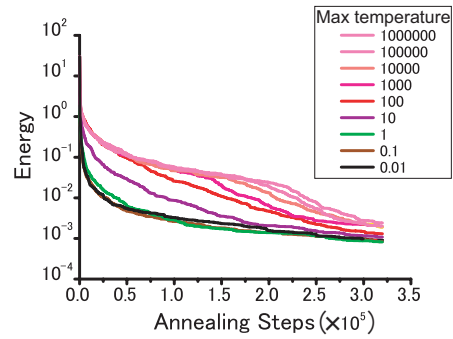


Fig. 4 最高温度を変化させた解探索履歴 (平均値)

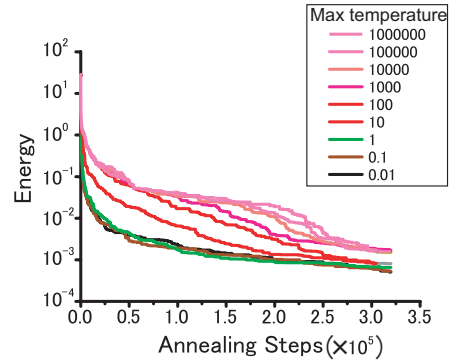


Fig. 5 最高温度を変化させた解探索履歴 (中央値)

におよそ 8 ~ 14 度で急激にエネルギーが下がることがわかる。

Table 3 アニーリングステップ数と温度の関係

Max temp.	Annealing Steps	temp.	Next temp.
1000000	200000	12.496	7.897
100000	180000	14.497	8.619
10000	160000	12.496	8.002
1000	130000	11.601	8.002

つまり、最高温度がかなり高い場合では探索の序盤 ~ 中盤にかけては改悪方向へ遷移し続けることで無駄な探索を行っていると考えられる。そこで、最高温度を 8 ~ 14 度として最高温度以外は Table 1 で示される値を用いて検討を行った。検討結果を Table 4, Fig. 6, Fig. 7 に示す。Table 4 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. 6 では平均値、Fig. 7 では中央値の解探索履歴の比較を行った。Fig. 6, Fig. 7 の縦軸はエネルギー値、横軸はアニーリング数を示す。

Table 4, Fig. 6, Fig. 7 のように、各温度に対してエネルギー値の有意な差は見られなかった。つまり、Rastrigin 関数において、最高温度以外は Table 1 で示される値を用いる場合、適切な最高温度はおよそ 8 ~ 14 度であると言える。

Table 4 最高温度 8~14 度でを変化させた結果

Max temp.	Energy(Average)	Energy(Median)
8.0	0.001047	0.000763
9.0	0.000982	0.000609
10.0	0.001079	0.000811
11.0	0.001374	0.001084
12.0	0.001174	0.000903
13.0	0.001159	0.000866
14.0	0.001058	0.000689

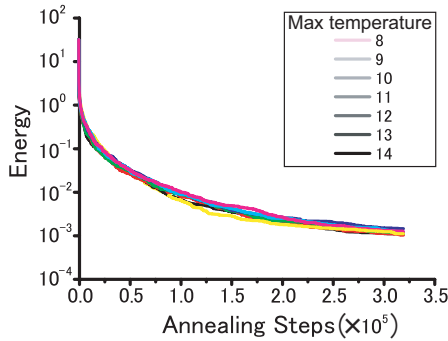


Fig. 6 最高温度を 8~14 度の解探索履歴 (平均値)

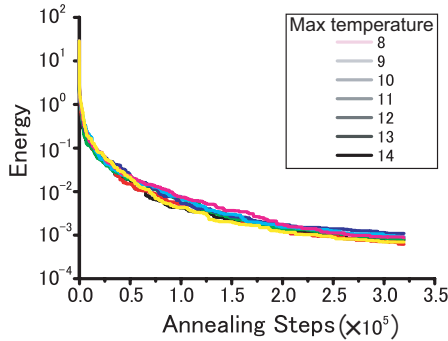


Fig. 7 最高温度を 8~14 度の解探索履歴 (中央値)

#### 4.2 最低温度パラメータの検討

最低温度のみを変化させ、最低温度が解探索に与える影響を検討した。検討を行った最低温度は 0.000001 から 10 まで公比 10 で変化させたものである。その他のパラメータは Table 1 の値を用いた。最低温度パラメータに関する検討結果を Table 5 , Fig. 8 , Fig. 9 に示す。Table 5 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. 8 では平均値 Fig. 9 では中央値の解探索履歴の比較を行った。Fig. 8 , Fig. 9 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。

Fig. 8 , Fig. 9 のように最低温度を変化させた場合, 0.0001 が他より良いエネルギー値であるが, 有意な差が見られなかった。つまり, 最低温度として適当な温度は 0.1 度より小さい値であると考えられる。

Table 5 最低温度を変化させた結果

Min temp.	Energy(Average)	Energy(Median)
0.000001	0.000634	0.000967
0.00001	0.000706	0.001082
0.0001	0.000497	0.000781
0.001	0.000728	0.001080
0.01	0.000811	0.001079
0.1	0.000761	0.001252
1	0.001115	0.002170
10	0.004459	0.005873

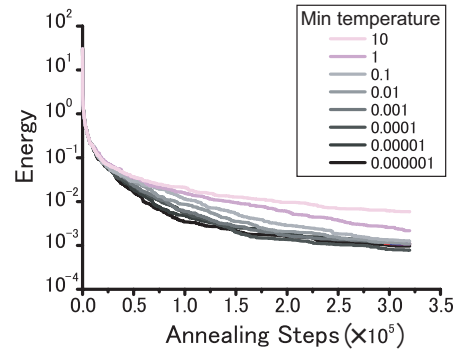


Fig. 8 最低温度を変化させた解探索履歴 (平均値)

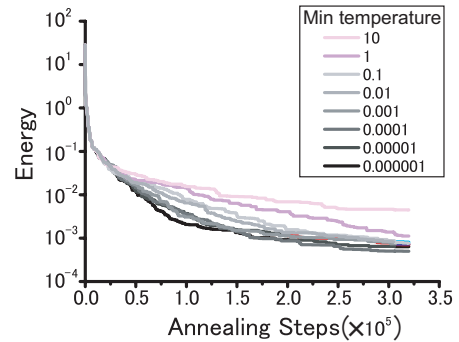


Fig. 9 最低温度を変化させた解探索履歴 (中央値)

#### 4.3 結果をもとにした温度による検討

4.1 , 4.2 で得られた結果をもとに, 最高温度 8~14 度, 最低温度 0.0001 度で検討を行った。その他のパラメータは Table 1 の値を用いた。検討結果を Table 6 , Fig. 10 , Fig. 11 に示す。Table 6 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. 10 に平均値, Fig. 11 では中央値の解探索履歴の比較を行った。Fig. 10 , Fig. 11 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。

Fig. 10 , Fig. 11 からわかるように, 温度を変化させてもほとんど差がなかったことから温度パラメータは解探索にほとんど影響を与えないのではないかと考えられる。

Table 6 最高温度を変化させた結果

Max temp.	Energy(Average)	Energy(Median)
8.0	0.000921	0.000635
9.0	0.000989	0.000543
10.0	0.000781	0.000497
11.0	0.001080	0.000861
12.0	0.000856	0.000565
13.0	0.001060	0.000776
14.0	0.001060	0.000689

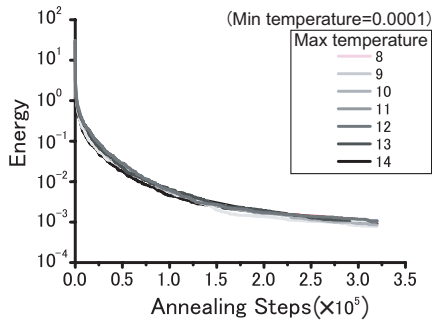


Fig. 10 温度を変化させた解探索履歴 (平均値)

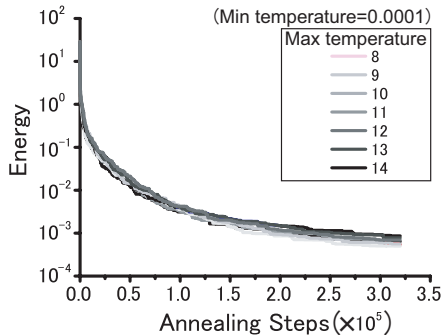


Fig. 11 温度を変化させた解探索履歴 (中央値)

#### 4.4 温度を 0 にする検討

最高温度 0 度, 最低温度 0 度で検討を行った。その他のパラメータは Table 1 の値を用いた。Table 7 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. 12 では平均値 Fig. 13 では中央値の解探索履歴の比較を行った。Fig. 12, Fig. 13 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 7 からわかるように温度 0 においても最適温度と思われるパラメータとあまり変わらない値が出た。つまり, Rastrigin 関数において温度パラメータ以外は Table 1 の値を用いる場合, 温度のとり方によって大きく解探索に影響するというわけではないということがわかった。

Table 7 温度別のアニーリングステップ数と温度の関係

Max temp.	Min temp.	Energy(Ave.)	Energy(Med.)
10.0	0.0001	0.000781	0.000497
10.0	0.01	0.001080	0.000811
0	0	0.000736	0.000520

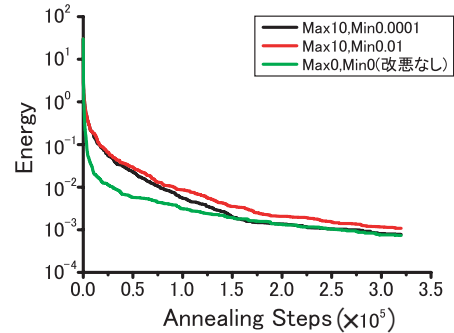


Fig. 12 温度パラメータ別の解探索履歴 (平均値)

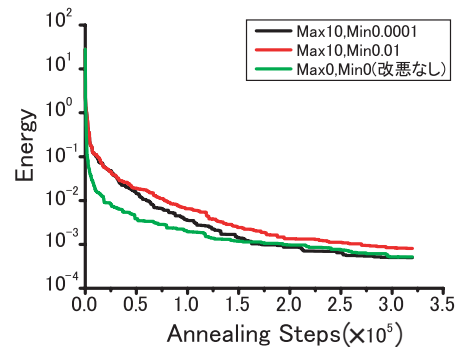


Fig. 13 温度パラメータ別の解探索履歴 (中央値)

## 5 まとめ

本実験では, 対象問題を Rastrigin 関数とし, 温度パラメータの検討を行った。検討の結果, 適切な最高温度としては 8~14 度, 最低温度としては 0.1 度以下という結果が得られた。しかし, 温度パラメータが解探索に与える影響はわずかなもので, 改良方向のみに進む温度 0 の場合と大きな違いは見られなかった。このことより温度パラメータは, 解探索に大きな影響を及ぼすものではないということがわかった。

## 参考文献

- 1) 喜多一, 日本ファジィ学会誌 Vol.9, No.6 “シミュレーテッドアニーリング”, 1997。
- 2) 三木光範, 知的システム工学講義資料 “最適化デザイン 2 - シミュレーテッドアニーリング”, 2004