

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  
山元佑輝

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 を連続最適化問題である Rastrigin 関数に適用し, 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

2.1 SA とは

SA の基礎となる考えは Metropolis ら<sup>1)</sup> 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シミュレート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に特徴がある. この特徴により, 現在では組合せ最適化問題にだけでなく, 複数の局所解を持つ連続変数最適化問題にも用いられている.

2.2 SA の長所と短所

2.2.1 長所

● 頑強性

多くの最適化手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.

2.2.2 短所

● 操作性

汎用手法であるため, 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.

3 数値実験

3.1 実験概要

連続最適化問題では一般に現在の解を中心とし, 移動距離に関する確率分布を与えることによって近傍を定義

する. つまり, 現在の状態から, どれだけ遷移できるかという幅が近傍パラメータである.

実験は近傍パラメータのみを変化させ, 近傍が解探索に与える影響を検討した. 検討を行った近傍の値は 0.1, 0.5, 0.9, 1.0, 2.0, 5.0 である. その他のパラメータは Table 1 の値を用いた.

対象問題は, Equ. (1) 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. 1 に 2 次元の場合の外形とエネルギーの等高線を示す.

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

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

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

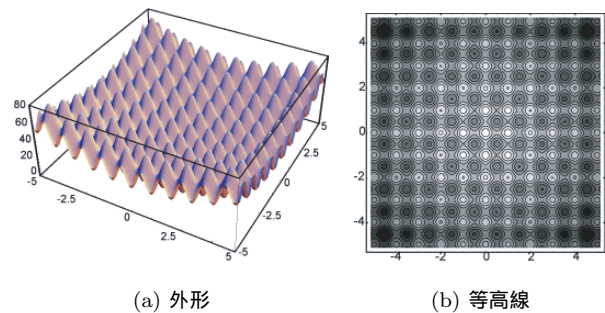


Fig. 1 Rastrigin 関数 (2 次元)

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
近傍	1.0
次元数	2
クーリング周期	10000
総アニーリング数	320000

### 3.2 実験結果

近傍パラメータに関する検討結果を Table 2, Fig. 2 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. 2 では平均値のおよび中央値の解探索履歴の比較を行った. Fig. 2 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. 平均値と中央値を取ったが, 中央値の方が信頼性がある. なぜなら, 複数の局所解が存在し, しかもそれらの関数値に大きな差がある場合には, 平均値は最悪値に大きく影響され, 正しい評価とはならないからである. <sup>2)</sup>

Table 2 近傍を変化させた結果

近傍	Energy (平均値)	Energy (中央値)
0.1	0.089674	0.002876
0.5	0.012979	0.005368
0.9	0.001136	0.000627
1.0	0.001085	0.000835
2.0	0.003421	0.002250
5.0	0.022578	0.016049

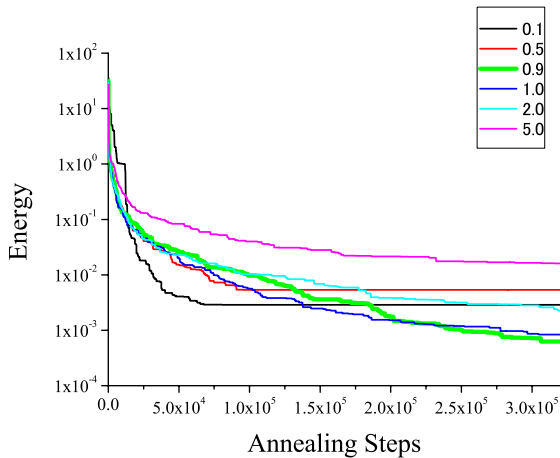


Fig. 2 中央値での解探索履歴

Fig. 2 を見ると, 近傍の設定が, 解探索に影響を与えていることが分かる. Rastrigin 関数では, 近傍を 0.1, 0.5 とした場合, 探索序盤で局所最適解に収束し Table 2 に示すようにエネルギー値が十分小さくならなかったと考えられる. また近傍を 1.0, 2.0 を比較した場合, 近傍 2.0 よりも 1.0 の方がよい結果を得ることができた. この実験の中では, 近傍幅 0.9 が最良のエネルギーを示した. 最後に近傍を 5.0 にした場合は, それほど良い値は得られなかった. これは, 隣接する局所最適解の幅を飛び越えて, 大きく移動したためと考えられる.

### 4 考察

どの近傍幅が最適かを見るために, 0.1 間隔で 0.1 ~ 5.0 まで近傍を変化したときの最良エネルギーを Fig. 3 に示す.

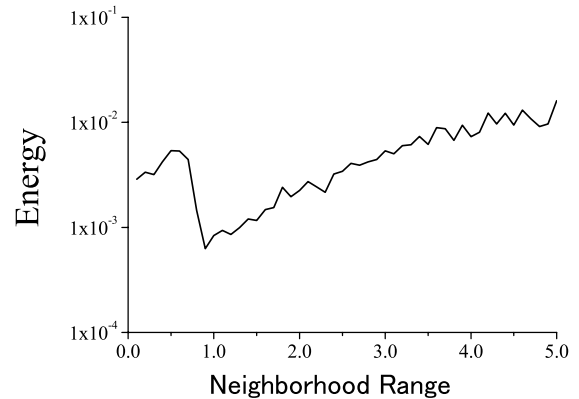


Fig. 3 近傍別の最良エネルギー

Fig. 3 を見ると, 近傍幅 0.5 を境にして, 最良エネルギーが下がっている. つまり, 近傍幅 0.5 が局所解を抜けられる境となっている. 0.5 を越えると近傍幅 1.0 付近まで最良エネルギーの値は下がっていく. 近傍幅が 1.0 というのは, Fig. 1 の (b) の等高線からも分かるように隣接する局所最適解同士の間隔に等しいため, 局所解を抜け出すのに適していると考えられる.

近傍幅 1.0 付近を超えると, 確率的に遷移する移動幅が大きくなるので, 最良のエネルギーに落ち着くことが難しい. これも局所最適解同士の間隔が 1.0 であることに起因している.

### 5 まとめ

本報告では, SA のパラメータである近傍パラメータについて検討を行った. その結果, 近傍の設定は, 解探索能力に大きく影響を与えることが分かった. Rastrigin 関数では近傍が 1.0 付近のときに最も良好な解探索能力を得ることができた. 今回の実験によって, この連続最適化問題では近傍パラメータが特に重要であることが分かった. なぜなら, 小さすぎると山を越えられないが, 大きすぎると最適な谷を飛び越えてしまうからである. このことより, 適切なパラメータチューニングが解探索性能に影響することが分かった.

### 参考文献

- 1) Kirkpatrick, S., Gelett Jr. C.D., Vecchi, M.P.: Optimization by Simulated Annealing. Science, 1983.
- 2) 三木光範, 廣安知之, 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. 5Y-5.