

SA におけるアニーリング数の検討  
吉田 昌太

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) は, Kirkpatrick らによって提案された最適化問題を解く近似解法の 1 つである. 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, 欠陥の少ない結晶構造を得る物理プロセス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である. SA では, 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り, その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 Rosenbrock 関数の連続最適化問題に適用し, アニーリング数が解探索能力に与える影響について検討を行った.

2 SA の概要

2.1 SA とは

SA は, 高温で溶融状態にある金属を徐々に冷やすことによって, もとの金属より欠陥の少ない優れた結晶構造を作る物理プロセス (焼きなまし) を計算機上に模倣することにより最適化問題を解こうとする手法である.

2.2 SA のアルゴリズム

SA のアルゴリズムを Fig. 1 に示す. SA は, 与えられた初期状態から出発して, 次々と状態を推移させ, 理論的には真の最適解を求めることが可能なアルゴリズムである. SA のアルゴリズムでは生成 (Generate), 受理 (Accept), およびクーリング (Reduce) の 3 つが必要なプロセスとなる.

SA のアルゴリズムについて詳しく述べると次のようになる.

- 初期設定
  1. 温度  $T$  を初期化する.
  2. 初期状態  $x_0$  を与える.
  3. 初期状態  $x_0$  でのエネルギー  $E$  を計算する.
- アニーリング
  1. 現在の状態から次状態  $x'$  を生成する.
  2.  $x'$  でのエネルギー  $E'$  を計算する.
  3. エネルギーの差分  $DE (=E'-E)$  と温度  $T_k$  により, 次状態を受理するか否かの判定を行う.
  4. 受理の場合は次状態に推移する.
- クーリング
  1. 一定期間アニーリングを行った後, クーリングを行い, 次の温度  $T_{k+1}$  を求める.

2. アニーリングに戻る.

● 終了

温度が十分下がり, 終了条件に達すればその時の  $x$  を最適状態, エネルギー  $E$  を最適値として出力する.

本報告では, アニーリング回数を変化させることで, それが解にどのように影響を与えるか検討する.

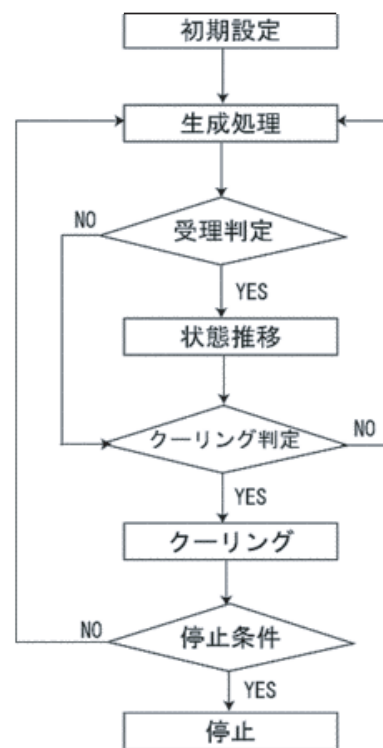


Fig. 1 SA のアルゴリズム

3 実験

本実験では, アニーリング数, および各アニーリング数で求められた値の信頼性の検討を行った. 対象問題は, 式 (1) で表される 2 次元 Rosenbrock 関数である. Rosenbrock 関数は, 設計変数間に依存関係を持つ単峰性関数である. Fig. 2 に 2 次元の場合の外形とエネルギーの等高線を示す.

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

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

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

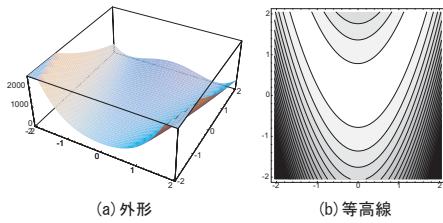


Fig. 2 Rosenbrock 関数 (2 次元)

### 3.1 アニーリング数に関する実験

#### 3.1.1 実験概要

アニーリング数以外のパラメータの初期値を Table 1 に示す. アニーリング数は 16000 から 6400 ずつ増やし 1080000 まで検討を行う. この実験では, 各アニーリング数における 100 回試行の最良エネルギーの平均値, および中央値の解探索履歴を比較する.

Table 1 パラメータの初期値

パラメータ	値
最高温度	1.0
最低温度	0.001
近傍幅	0.002
クーリング周期	32
次元	2
試行回数	100

#### 3.1.2 実験結果

アニーリング数に関する検討結果を Table 2, Fig. 3, および Fig. 4 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, Fig. 3, Fig. 4 で平均値および中央値の解探索履歴の比較を行った. Fig. 3, 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 2 最良エネルギーの平均値, 中央値

アニーリング数	平均値	中央値
105600	$1.23 \times 10^4$	$3.78 \times 10^5$
310400	$7.77 \times 10^8$	$4.60 \times 10^8$
508800	$3.38 \times 10^8$	$1.73 \times 10^8$
662400	$1.44 \times 10^8$	$1.03 \times 10^8$
771200	$1.03 \times 10^8$	$7.64 \times 10^9$
880000	$9.31 \times 10^9$	$5.87 \times 10^9$
988800	$8.82 \times 10^9$	$5.53 \times 10^9$
1080000	$7.24 \times 10^9$	$5.36 \times 10^9$

Fig. 3, Fig. 4 から分かるように Rosenbrock 関数においてアニーリング数をを変化させた場合, アニーリ

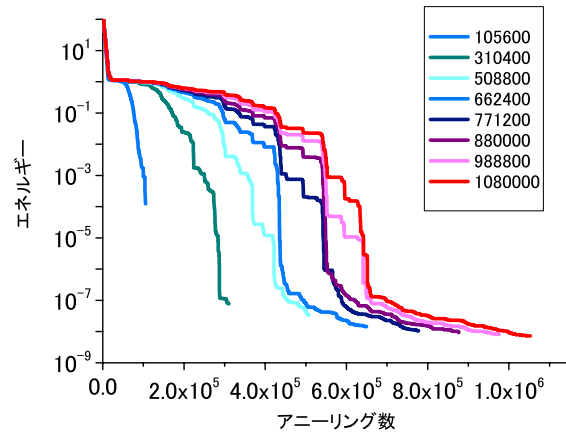


Fig. 3 各アニーリング数における平均値

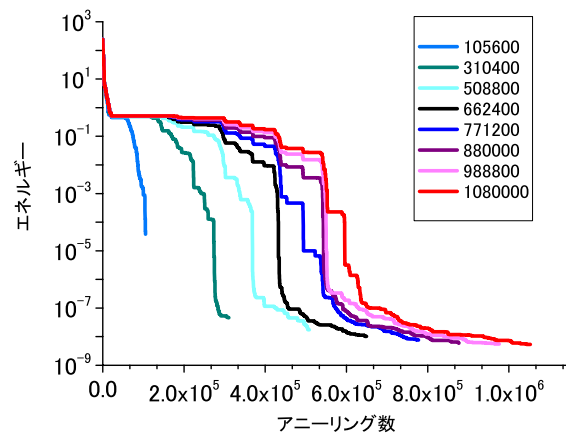


Fig. 4 各アニーリング数における中央値

ング数を増やせずにつれて最良エネルギーの値が良くなっていくことがわかった. しかし, アニーリング数が 662400 を超えたあたりからは, アニーリング数を増やしても解探索の向上が見られない.

### 3.2 各アニーリング数の信頼性に関する実験

#### 3.2.1 実験概要

アニーリング数以外のパラメータの初期値を Fig. 1 に示す. アニーリング数は 16000, 100000, 200000, 300000, 400000, 500000, 600000, 700000, 800000, 900000, 1000000 で検討を行う. この実験では, 各アニーリング数での 100 回試行の最良エネルギーの中央値, ベスト値, およびワースト値について比較, 検討を行う.

#### 3.2.2 実験結果

各アニーリング数における解の信頼性の検討結果を Table 3, Fig. 5 に示す. Table 3 は各アニーリング数での 100 回試行の最良エネルギーの中央値, ベスト値, およびワースト値を示している. Fig. 5 はそのデータを

Table 3 中央値, ベスト値, ワorst値

アニーリング数	中央値	ベスト値	ワorst値
16000	$5.7 \times 10^6$	$4.91 \times 10^8$	$3.5 \times 10^0$
100000	$1.26 \times 10^7$	$1.23 \times 10^9$	$1.1 \times 10^3$
200000	$6.31 \times 10^8$	$8.42 \times 10^{11}$	$4.41 \times 10^5$
300000	$4.60 \times 10^8$	$3.80 \times 10^{10}$	$6.92 \times 10^7$
400000	$2.08 \times 10^8$	$1.55 \times 10^{10}$	$1.44 \times 10^7$
500000	$1.73 \times 10^8$	$6.28 \times 10^{11}$	$1.94 \times 10^7$
600000	$1.16 \times 10^8$	$3.17 \times 10^{10}$	$1.21 \times 10^7$
700000	$7.76 \times 10^9$	$2.87 \times 10^{10}$	$9.25 \times 10^8$
800000	$5.65 \times 10^9$	$2.37 \times 10^{10}$	$4.66 \times 10^8$
900000	$7.96 \times 10^9$	$8.59 \times 10^{11}$	$2.56 \times 10^8$
1000000	$4.52 \times 10^9$	$2.12 \times 10^{11}$	$3.86 \times 10^8$

ロットし, 各アニーリング数における最良エネルギーのばらつきを示している. 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.

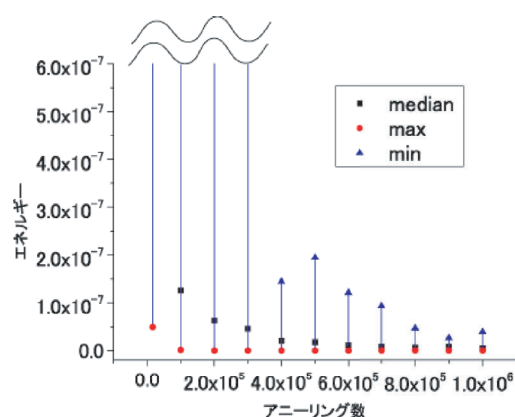


Fig. 5 各アニーリング数における最良エネルギー値のばらつき

Table 3 が示すように各アニーリング数において最良エネルギーのベスト値にほとんど差異は見られないが, ワorst値には差異が見られた. このことにより, 試行回数によってばらつきがあることがわかった. また, ワorst値にばらつきがあるのは, アニーリング数が少ないと探索できる回数が少ないので, 解の探索が十分に行われずに停滞してしまうためだと考えられる.

#### 4 考察

Rosenbrock 関数において, アニーリング数を増やすにつれてより良い解が求められることがわかる. また, Fig. 3, Fig. 4 および Fig. 5 が示すように, アニーリング数を増やすことで, 最良エネルギーの中央値, ベスト値, ワorst値の値が収束していくことがわかる. よってこの結果から, その求めた解はアニーリング数が少

ない場合に求めた値よりも信頼性があると考えられる. また, アニーリング数を増やすにつれて必ず良い値が出るという結果ではなかったが, これは局所的に見るのではなく, 大域的にグラフを見ることで, アニーリング数を増やせばよりよい値を得る方向へ向かっていると確認できる. これより, 最良エネルギーを求めるためにはアニーリング数を増やすことが必要だと考えられる.

また, Fig. 3 や Fig. 4 が示すように, クーリングが行われた回数が少ない場合, つまり温度が高い場合では, 解良方向へ探索が進みにくいことがわかる. これは Rosenbrock 関数は単峰性であるため解悪方向へ進む必要がなく, そのために温度が高いところでは無駄な作業が行われていると考えられる. よって, 単峰性である関数の解の探索をする場合は, 温度のパラメータチューニングをすればより良い解を求めることができると考えられる.

#### 5 まとめ

本報告では, SA のパラメータであるアニーリング数について検討を行った. その結果, Rosenbrock 関数において, アニーリング数による解探索性能の違いが見られ, アニーリング数を増やしていけばその解の信頼性が増すことが確認できた. しかし, アニーリング数を単調に増やしても, 常に求められる解が良くなっていくとは限らず, また, 他のパラメータにより解探索の性能に影響が出ていると考えられた.

よって今回の実験では, 良い解を得るためには, アニーリング数を増やすとともに他のパラメータチューニングが必要であると考えられる.

#### 参考文献

- 1) 喜多 一. シミュレーテッドアニーリング. 日本ファジィ学会誌 Vol.9 No.6. 1997.