SA プログラムの作成およびパラメータ検討

吉井健吾

1 はじめに

本報告では, SA(Simulated Annealing) プログラムを実装し，その性能を検証するために研究室の標準の SA と比較を行った. 対象問題は Rastrign 関数であり，実装に用いたプログラム言語は JAVA である．そして Griewank 関数において，SA のパラメータの一つである，クーリングステップ数を変化させて，結果について検討を行った.

2 SA(Simulated Annealing)

SA(Simulated Annealing) とは組み合わせ最適化問題のための近似解法の 1 つである．物質の良い結晶を得るために，一旦高温に熱し，高温から徐々に温度を下げ結晶構造を形成させていく焼なまし (アニーリング) を，計算機上のシミュレーションで行うものである．このときいくつかの局所安定状態があっても，十分ゆっくり冷やして行けば最もエネルギーの低い安定な状態に落ち着く．SA は，与えられた初期状態から出発して，エネルギーが確率的に小さくなるように次々と状態を変化させ，最終的には最適な状態になることが期待されるアルゴリズムである.

2.1 基本アルゴリズム

SA の基本アルゴリズムは生成，受理，クーリングから成り立つ．SA の基本的なアルゴリズムを Fig. 1 に示す.

1. 初期設定
   - 温度 T を初期化する.
   - 初期状態を与え，初期状態でのエネルギーを計算する.
2. 現在の温度で一定期間，次の処理を繰り返す.
   - 現在の状態から次の状態を生成する.
   - 次の状態 でのエネルギーを計算する.
   - 次状態のエネルギーと現在のエネルギーの差分と温度 Tk を用いて，次の状態を受理するか否かの判定を行う.
   - 受理する場合は次の状態に推移する.

   以上の処理をアニーリングと言う.
3. クーリング
   - 一定期間アニーリングを行った後にクーリングを行い，次の温度を求める.
   - 再びアニーリングを行う.
4. 終了
   - 温度が十分に下がり，停止条件に達すればそのときの設計変数を最適状態，エネルギー を最適値として終了する.

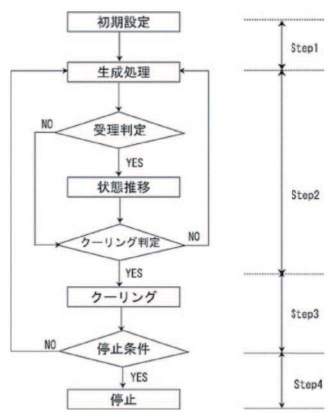


Fig. 1 SA のアルゴリズム

2.2 SA の特徴

2.2.1 長所

- 多くの最適化手法が局所最適解に陥ってしまうという欠点を持っているのに対して，SA は容易に局所最適解に陥らず，理論的には真の最適解が得られることが証明されている．これは解が改良される方向のみだけでなく，改悪の方向にも探索が進むという仕組みによるものである.
- アルゴリズムが極めて汎用に出来ているため，広範囲の問題に適応することができる.
- 目的関数に関する制約がほとんどなく柔軟である. 簡単に言うと，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.

2.2.2 短所

- 最適解を求めるためには長い計算時間が必要である．そのため，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行われている.

- 汎用解法であるために，問題を解くために必要なパラメータチューニングなどを個別に行う必要がある．

3　数値実験

作成したＳＡの精度を確かめるため，標準ＳＡと実行結果の比較を Rastrigin 関数を用いて行う．その後，Griewank 関数を用いて，クーリングステップ数に関するパラメータ検討を行い，クーリングステップ数が解探索能力に与える影響について検討する．

3.1　対象問題

今回 SA の性能比較に用いた Rastrigin 関数は，最適解の周辺に格子状に準最適解 (最適値に近い値を持つ局所的最適解) を持つ多峰性関数であり設計変数間に依存関係はない．以下に Rastrigin 関数を，Fig. 2 に Rastrigin 関数の 2 次元の形状を示す．

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

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

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

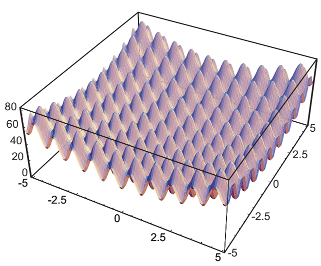


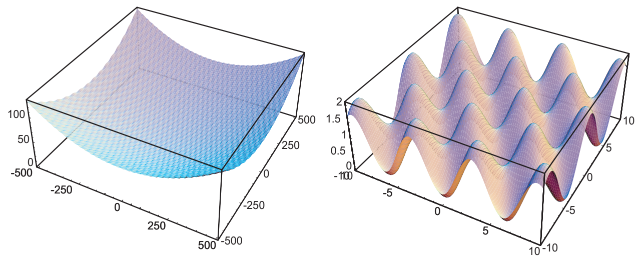
Fig. 2　Rastrigin 関数

また，パラメータ検討として取り上げた Griewank 関数は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が，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．以下に Griewank 関数を，Fig. 3 に Griewank 関数の 2 次元の形状を示す．

$$F_{Griewank}(x) = 1 + \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^{n} \left(\cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right)\right) \qquad (2)$$

$$(-512 \leq x_i < 512)$$

$$min(F_{Griewank}(x)) = F(0, 0, \ldots, 0) = 0$$



(a) 外形　　(b) 最適解付近

Fig. 3　Griwank 関数の形状

3.2　自作 SA の性能評価

自作 SA と標準 SA の解探索性能の比較を行う．テスト関数として Rastrigin 関数を使用する．用いたパラメータを Table 1 に示す．

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
クーリングステップ数	32
総アニーリング数	327680

300 回試行における中央値の解探索履歴比較結果を Fig. 4 に示す．縦軸はエネルギー値，横軸はアニーリング数である．

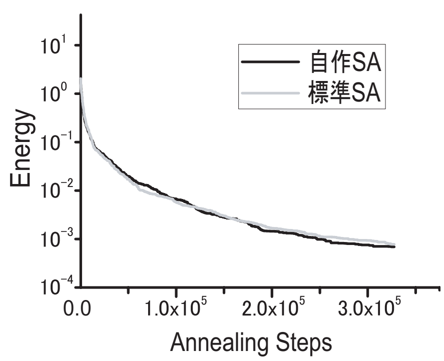


Fig. 4　自作 SA と標準 SA の比較

Fig.4 より，自作 SA と標準 SA の解探索性能はほぼ一致していることが確認できる．

3.3　パラメータ検討

クーリングステップ数に関するパラメータ検討を行う．対象問題は 2 次元 Griewank 関数であり，標準パラメータを Table 2 の通り指定する．

Table 2　標準パラメータ

パラメータ	値
最高温度	20.0
最低温度	0.001
近傍	5.0
次元数	2
クーリングステップ数	32
総アニーリング数	327680

標準パラメータからクーリングステップ数のみを変化させ，解探索に与える影響を検討した．検討を行ったクーリングステップ数は 1，2，4，8，32，および 32，128，512，10240，65536 である．各パラメータに関する探索過程をに示す．

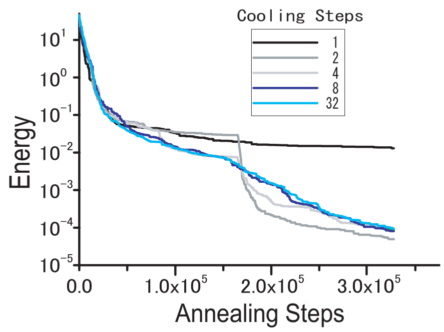


Fig. 5　結果 1

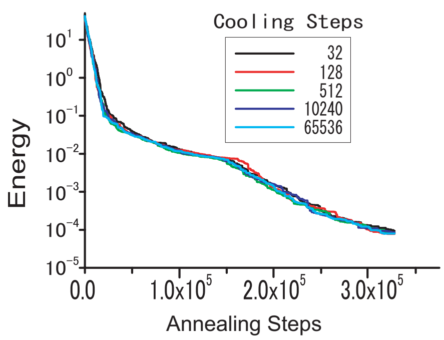


Fig. 6　結果 2

Fig.5 より，クーリングステップが 1 の時は，クーリングを 1 回も行わずに最高温度のみでアニーリングを繰り返しているため，最も改悪が受理されやすい．クーリングステップ数が 2 の時はクーリング回数は 1 回であり，始め半分は最高温度のため改悪が受理されやすいが，残り半分は最低温度でアニーリングを繰り返すため改悪が受理されにくくなり，解の精度は大幅に改良される．同じようにクーリングステップ数が 4，8 の時もクーリングを行うにつれ解の精度は改良されていくことがわかる．Fig.6 ではクーリングステップ数を増加させていった時の変化を調べたものであるが，どれもほぼ同程度の結果であるといえる．このことから，クーリング回数を増加させても解の精度は良くならないことがわかる．

4　考察

Fig.5 のグラフより，クーリングステップ数が 2 の時が最も解の精度が良いことがわかる．これは 1 回クーリングを行った後，最低温度となり，改悪が受理されにくい状態が長く続くためだと考えられる．つまり，改悪はほぼ受理せず，改良方向のみ受理する状態が他のクーリングステップ数と比べて，長く続くということである．Griewank 関数は最適解付近では多峰性 (Fig.3(b)) ではあるが，大域的に単峰性であり (Fig.3(a))，近傍を大きく設定しているために，局所解に陥っても抜け出しやすい．つまり，改悪方向に受理する必要性がないのである．よって最低温度が最も長く続く状態，つまり改良方向のみに受理する状態が長く続くと，最も精度の高い解が得られるのではないかと考えられる．

検証実験として，温度を最低温度 0.001 に固定し，クーリングステップ数を 1 としてクーリングを行わず最低温度のみでアニーリングの繰り返しを行った．この結果を Fig. 7 に示す．

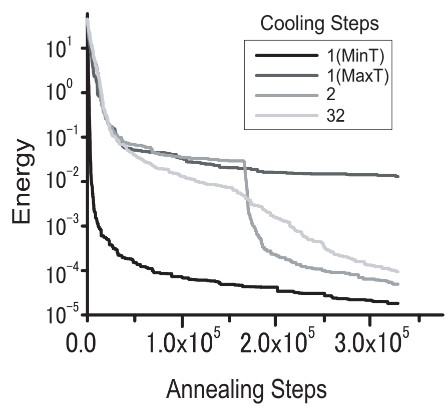


Fig. 7　結果 3

Fig.7 のグラフより，クーリングステップ数を 1 としてクーリングを行わず最低温度のみでアニーリングの繰り返しを行った場合，解の精度は向上した．よって Griewank 関数においては改良方向のみに受理する状態が長く続くと，より精度の高い解が得られることが証明された．

5　まとめ

本報告では，SA のプログラムを作成し，標準プログラムと Rastrigin 関数における解の精度を比較した．検証の結果，SA の探索履歴はほぼ同程度であることが確認できた．そして Griewank 関数において，クーリングステップ数に関するパラメータ検討を行った．その結果

Griewank 関数におけるクーリングステップ数について以下のようなことがわかった.

- クーリングステップ数を増やしても解の精度はよくならない.
- 最低温度でのアニーリング数が長く続くほど解の精度はよくなる.
- 改悪に受理する必要はなく，最低温度でアニーリングを繰り返すことにより，解の精度は最も良くなる.

なお，この結果は Griewank 関数が大域的に単峰性である関数であるためにいえる結果である．つまり，その他の多峰性関数では改悪に受理しないと，局所解に陥った時に抜け出せないということも考えられる．よってその他の関数では必ずしも最低温度でのアニーリング数が長く続くほど解の精度はよくなるとはいえない．しかし，Griewank 関数においてクーリングステップ数を調整することにより解の精度が向上したように，最適な解を得るためにはパラメータチューニングが必要であることがわかった.

参考文献

1) 2004 年度 SA・GA ゼミ資料
http://mikilab.doshisha.ac.jp/dia/seminar/2004/SAGA.pdf