

シミュレーテッドアニーリングの近傍に着目した解探索の可視化

福田 正輝

1 はじめに

最適化問題の解法として、シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) があり、SA においては、「温度」と「近傍」というパラメータが重要である。

本報告では、後者の近傍に着目し、数値実験により近傍幅が解探索性能に与える影響について考察する。さらに、探索の様子をリアルタイムに可視化し、近傍幅を変化させたときの探索の様子の相違を視覚的に確認する。

2 SA

2.1 SA の概要

SA は Kirkpatrick らによって提案された最適化問題のための近似解法の 1 つである。SA は高温で融解状態にある物質を徐々に冷却することで優れた結晶構造を得ようとする「焼きなまし」を模倣した最適化手法である¹⁾。

2.2 SA のアルゴリズム

SA では、アニーリング (「生成処理」, 「受理判定」, 「状態遷移」, 「クーリング (冷却)」) を繰り返すことにより、最適解を求める。

また、必要となるパラメータとして生成処理における近傍幅の他に最高温度、最低温度、クーリング数、総アニーリング数がある。

以下に SA のアルゴリズムを示す²⁾。

1. 初期設定

- 温度 T を初期化する ($T_0 = T_{max}$)。
- 初期状態 x_0 より、初期エネルギー E_0 を計算する。

2. 現在の温度 T で一定期間、次の処理を繰り返す。

- 現在の状態 x から次の状態 x' を生成する。
- 次の状態 x' のエネルギー E' を計算する。
- エネルギーの差分 $E (= E' - E)$ および温度 T より、次の状態に遷移するか否かを式 (1) により判定する。

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

- 受理の場合、次の状態に遷移する (x' が x に、 E' が E となる)。

3. クーリング

設定した回数のアニーリングの後に式 (2) に示す指数型アニーリング (γ はクーリング率) により、温度パラメータを下げ、次の温度 T' を求める。

$$T' = \gamma T \quad (2)$$

4. 終了

温度が十分に下がり、停止条件 (設定したアニーリング回数) に達すれば、探索中に得た最良の状態 x を最適状態、そのときの E を最適値とし終了する。

また、以上のフローチャートを Fig. 1 に示す。

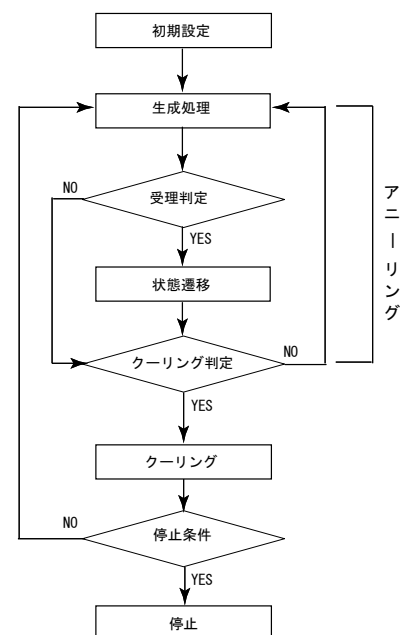


Fig. 1 SA のアルゴリズム (出典:自作)

2.3 SA の特徴

長所

- 頑強性 : 準最適解に到達できる。
- 汎用性 : 広範囲な問題に適用可能である。

短所

- 非効率性 : 多くの計算量を要する。
- 操作性 : パラメータチューニングが容易でない。

2.4 近傍の設計

最適化問題には、連続最適化問題と離散最適化問題があり、ここでは前者を対象とする。このとき、近傍はユークリッド空間内での距離に相当し、自由に決めることができる。次の探索点に摂動し得る最大値を「近傍幅」と呼び、このパラメータが近傍構造を決定する¹⁾。

一般に、近傍幅が小さい場合にはエネルギー値の変化は小さく、近傍幅が大きい場合にはエネルギー値の変化も大きい。さらに、その変化はエネルギー関数に大きく依存する。このため、連続最適化問題に SA を適用する場合、近傍幅の設計は探索性能に大きく影響する¹⁾。

3 数値実験

3.1 対象問題

近傍幅が探索性能に与える影響を比較するため、数値実験を行う。対象問題は、式 (3) に示す Rastrigin 関数である。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。

$$F_{Rastrigin}(x) = 10n + \sum_{i=1}^n (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)) \quad (3)$$

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

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

3.2 パラメータ

今回用いたパラメータを Table 1 に示す。

Table 1 実験に用いたパラメータ	
パラメータ	値
近傍幅	1.0/1.0/0.1
総アニーリング数	32000
総クーリング数	32
最高温度	10.0
最低温度	0.01

3.3 実験結果

連続最適化問題において近傍幅が解精度に与える影響を検証するために、数学的関数最小化問題を取り上げた。そして、この関数に様々な大きさの近傍幅を与え、それぞれの近傍幅で得た解の精度を比較した。Fig. 2 は、30 回試行を行ったときの中央値のエネルギー履歴を表す。Fig. 2 より、1 次元の Rastrigin 関数では近傍幅が 1.0 付近で最も良好な解が得られた。

3.4 作成したインターフェース

探索の様子を視覚化するため、GUI を作成した。この初期画面を Fig. 3 に示す。下段に表示されている

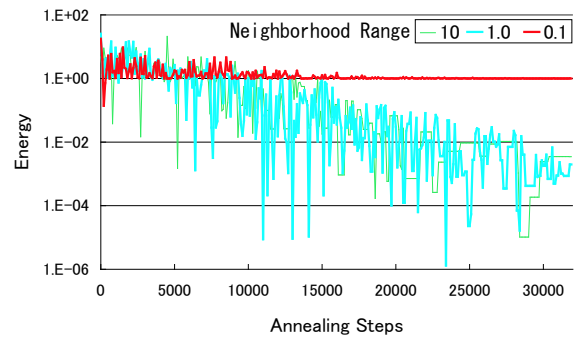


Fig. 2 各近傍幅ごとのエネルギー履歴 (出典:自作)

「Neighborhood Range」の右側のコンボボックスで近傍幅を選択できる。また、「Neighborhood Range」の左側で任意に近傍幅を追加、削除できる。そして上段の2つのボタンにより解探索の開始、停止ができる仕組みになっている。また、探索中は現在の解だけでなく、初期解と最適解も常に表示される。

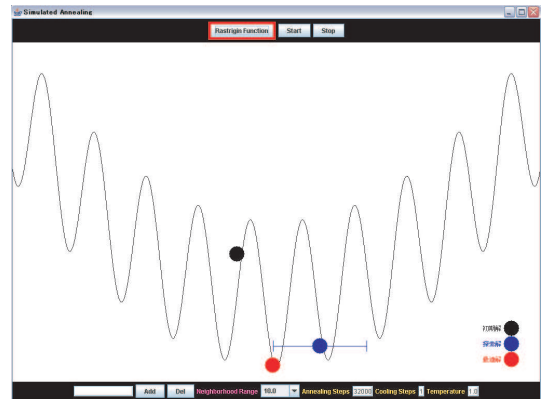


Fig. 3 作成した GUI の実行結果 (出典:自作)

4 まとめ

本報告では、SA の重要なパラメータのひとつである「近傍」に着目し、探索性能に与える影響について比較した。1 次元の対象問題に適用した結果、連続最適化問題において「近傍幅」の重要性が見られた。

他の対象問題や高次元な問題に適用し、近傍幅の与える影響について調べていくことが今後の課題として挙げられる。

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. Vol9, No.6, pp.875-880,1997.
- 2) 宮崎真. SA における総アニーリング数の検討. 知的システムデザイン研究室, 第 68 回月例発表会レジュメ. 2004.