

シミュレーテッドアニーリングの温度に着目した視覚化システム

上田 祐一郎

1 はじめに

最適化問題を解くための手法として、シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing:SA) や遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm:GA) などがある。

本報告では、SA において重要なパラメータである「温度」に着目して、この「温度」を変化させた際の探索の様子を可視化すると共に、探索における「温度」の影響について考察する。

2 SA

2.1 SA の概要

SA は Metropolis らによって 1953 年に発表された、最適化問題を解く汎用近似解法の 1 つである。この手法は、焼きなましと呼ばれる、もとの金属より安定度の高い優れた結晶構造を作るための冷却プロセスをシミュレートしたアルゴリズムに基づいている¹⁾。

2.2 SA のアルゴリズム

SA は与えられた初期状態からエネルギーが確率的に小さくなるように状態を変化させ、最終的にはエネルギーが低い状態になることが期待されている。このアルゴリズムは、生成処理、受理判定、状態遷移、クーリングから成り立つ。以下に、SA のアルゴリズムについて示す。また、Fig. 1 にフローチャートを示す。

1. 初期設定

- 温度 T を初期化する ($T_k = T_0$)。
- 初期状態 x_0 を与え、初期状態でのエネルギー E_0 を計算する。

2. 現在の温度 T_k で一定期間、次の処理を繰り返す (アニーリング)。

- 現在の状態 x からランダムに次状態 x' を生成する。
- 次状態 x' でのエネルギー E' を計算する。
- エネルギーの差分 $\Delta E (= E' - E)$ と温度 T_k を用いて、次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 (x' が x に、 E' が E となる)。

3. クーリング

一定期間アニーリングを行った後に、式 (1) に示す指数型アニーリングを用いて、次の温度 T_{k+1} とする。この操作をクーリングと呼ぶ。

$$T_{k+1} = T_k \quad (1)$$

4. 終了

温度が十分に下がり、停止条件に達すれば探索中に得た最良の x を最適状態、そのときのエネルギーを最適値として終了する。

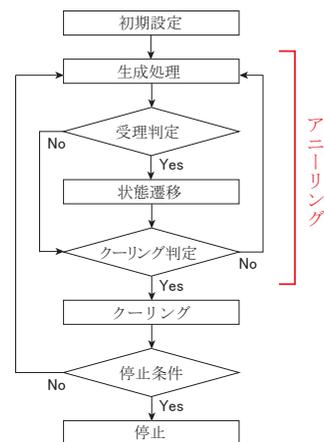


Fig. 1 SA のアルゴリズム (出典：自作)

2.3 SA の特徴

2.3.1 長所

- クーリングが適切であれば、論理的には容易に局所最適解に陥ることはなく、真の最適解が得られる。
- アルゴリズムが極めて汎用的であり、離散的な問題などにも対応できる。

2.3.2 短所

- 最適解を得るためには、多くの計算時間がかかる。
- パラメータチューニングを行う必要があり、その調節は容易でない。

3 数値実験

3.1 SA における温度の重要性

SA における温度は受理判定をする際に非常に重要であり、式 (2) に示すメトロポリス基準が用いられる。

$$ACCEPT(E, E', T) = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta E < 0 \\ \exp(-\frac{\Delta E}{T}) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

式 (2) において、現在の状態と次状態のエネルギー差 ΔE が負、すなわち次状態が改良の方向へ進むのであれば受理することを意味し、それ以外は次状態が改悪の方向へ進む場合でも確率的に受理することを意味する。このように、次状態が改悪の場合でも確率的に受理することが、SA の特徴である。そして、この確率は温度 T によって変化する。各温度におけるエネルギー値の差 ΔE と受理率の関係を Fig. 2 に示す。

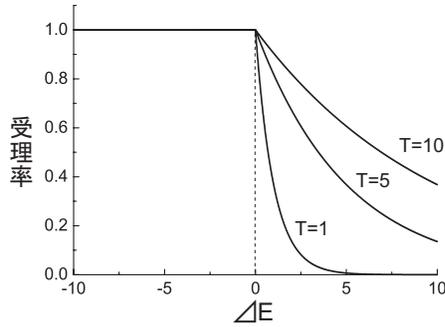


Fig. 2 メトロポリス基準 (出典：自作)

Fig. 2 より、エネルギー差が正の場合、温度が高いほど受理率が大きくなっていることがわかる。すなわち、温度 T は改悪の方向への推移確率に大きな影響を与える。したがって、この温度の設定によって、局所最適解に陥りにくいメカニズムを有するため、最適な温度設定が解探索性能の向上につながる。

3.2 対象問題およびパラメータ

本実験では、式 (3) に示す Rastrigin 関数を対象問題とした。これは、設計変数間に依存関係を持たない多峰性関数である。なお、次元数は 1 次元とした。

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

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

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

また、本実験で用いたパラメータを Table 1 に示す。

パラメータ	値
総アニーリング数	32000
クーリング数	32
近傍幅	1.0
最高温度	100.0 / 10.0 / 1.0
最低温度	0.1

3.3 実験結果

本実験では、Table 1 より 3 種類の最高温度に対して SA を実行した。この結果を Fig. 3 に示す。なお、Fig. 3 は縦軸にエネルギー値を対数表示で、横軸にアニーリングステップ数を示す。

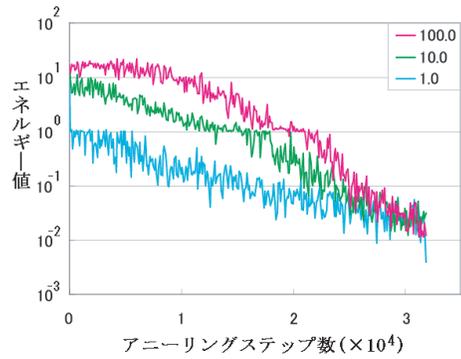


Fig. 3 実行結果 (出典：自作)

Fig. 3 より最低温度が同じ場合、最高温度が高い方が収束が遅く、エネルギー値が小さくなるのに時間がかかっている。これは、最高温度が低い場合は改悪を受理しにくいいため、主に局所的な探索が中心になるが、最高温度が高い場合は初めに大域的な探索をしているためであると考えられる。したがって、最高温度が高すぎる場合、探索が非効率になることがわかる。

3.4 GUI による可視化

本実験の結果を GUI によって可視化した画面を Fig. 4 に示す。本システムでは、各パラメータを入力でき、[START] ボタンを押すことにより、探索している過程を可視化している。また、スクロールバーによって、指定した温度でのアニーリングの様子を可視化することができる。これにより、SA を実行した際の異なる温度における解の動きを視覚的に確かめることが可能となる。

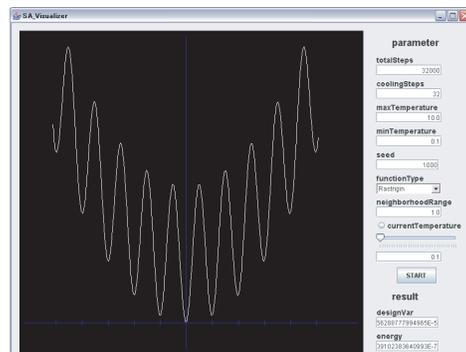


Fig. 4 実行画面 (出典：自作)

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温度に着目して、温度の変化が解探索に与える影響について検討した。数値実験により考察し、さらに探索の様子を視覚化することにより、高温では大域的探索を、低温では局所的探索をしていることが確認できた。

以上より、SA において温度の設定は解探索に大きな影響を与えるため、非常に重要であると言える。

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 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.