シミュレーテッド アニーリング法の動作モデル
－ＴＳＰを例にとって－

松本 雅央 （沼田 一道助教授、池辺 淑子助手）

1. はじめに

現実の計画問題には巡回セールスマン問題（Traveling salesman problem; TSP）をはじめ、組み合わせ最適化問題として定式化されるものが数多く存在する。

組み合わせ最適化問題とは、有限個の組み合わせの中から最適な目的関数値を与えるものを見出す問題であり、整数や0,1のような離散的値をとる変数を用いて定式化される。ＴＳＰをはじめとする組合わせ最適化問題の多くに対しては能率の良い解法が知られていない。このような場合、変数のとりうる値の組み合わせをすべて調べて最適解を求めることも考えられるが、計算時間がかかりすぎ実用的ではない。そこでＧＡ（Genetic Algorithm）、タブサーチ（Tabu Search）、ＳＡ（Simulated Annealing）などの発見的解法が盛んに研究されている。発見的解法とは厳密な最適解を求めようとするのではなく、実用的な計算時間内に準最適解を求める方法である。

2. 目的

本研究では特にＳＡ法を取り上げ、ＴＳＰを例題としてその理論的正当性を実験的に検証する。具体的には最適解をあらかじめ求めたＴＳＰに対して、ＳＡ法の動作過程をマルコフ連鎖でモデル化し、最適解に至る様子を数値計算して観察する。

3. 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題（ＴＳＰ）とは、ｎ個の都市と、各都市間の移動距離が与えられたとき、すべての都市を一度ずつ訪問して出発点に戻る巡回路の中で、総移動距離が最小のものを求める問題である。ｎを都市数, S_n を全巡回路の集合, $\sigma(i)$ を順列 σ において i 番目に訪問する都市 $(i=1,\dots\dots,n)$, $\sigma(n+1)=\sigma(1)$, C_{ij} を都市 i,j 間の移動距離 $(C_{ij}=C_{ji},\ i,j=1,\dots.n,\ i\neq j)$ とするとき巡回セールスマン問題（ＴＳＰ）は次のように定式化される。

$$
(\mathrm{TSP})\quad \left|\begin{array}{ll} \textit{Minimize} & F=\sum_{i=1}^{n} C_{\sigma(i)\sigma(i+1)} \\ \textit{Subject to} & \sigma\in S_n \end{array}\right.
$$

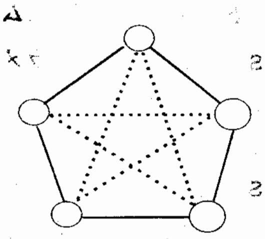

図1:TSPの5都市の例

巡回路の個数は都市数ｎに対し $(n-1)!/2$ 通りとなる。

4. ＳＡ法の概要［2］

物質を高温に熱した後、温度を下げていく処理を焼きなまし（アニーリング）というが、ＳＡ法はこの現象を模擬（シミュレート）して関数の最小値を求めようとするものである。

4．1 SA法の動作

SA法では目的関数値を熱力学を模した系のエネルギーとして考える。

暫定解x_1に対応するエネルギーをE_1、新たに探索された更新解候補x_2に対応するエネルギーをE_2としたとき、暫定解への更新確率$P(\Delta E)$を次式で与える。

$$P(\Delta E)=\begin{cases}1 & (\Delta E \le 0)\\ \exp(-\Delta E/T) & (\Delta E > 0)\end{cases}$$

ただし$\Delta E = E_2 - E_1$は更新解候補と暫定界の目的関数値の差、Tはその系の温度である。多くの発見的解法では、目的関数の減少方向のみの解の探索を行うが、SA法では暫定解に対し目的関数の値を増加させるような解候補も温度Tに依存した確率であえて受け入れることによって、局所解への収束を防ぎ、最適解の探索を進めていく。次の解候補は現在の解の近傍の中からランダムに探索して進める。ここで近傍とは、現在の解に簡単な操作を施して得られる新たな解の集合のことで、現在の解から移動できるものである。

4．2 2-OPT近傍

TSPに対してSA法を適用する際の近傍として2-OPT近傍を採用する。いま巡回路$\sigma \in S$は都市を$X_1, X_2, X_3, \ldots, X_n$の順に訪問するようなものであるとし、このことを$\sigma = (X_1, X_2, \ldots, X_n)$で表すことにする。そして自然数$i, j (i < j)$に対して巡回路σから、新しい巡回路：$\sigma[i,j] = (X_1, \ldots, X_{i-1}, X_j, X_{j-1}, \ldots, X_{i+1}, X_i, X_{j+1}, \ldots, X_n)$を考える。つまり都市$X_i$から$X_j$までを逆順に並べたものを作っていく。このような巡回路の全体を巡回路σの2-OPT近傍という。

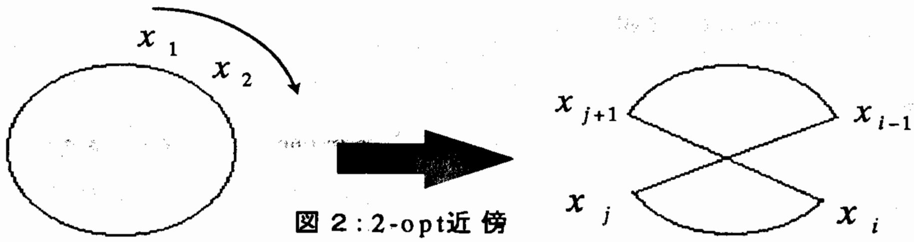

図2：2-opt近傍

4．3 SA法のアルゴリズム（TSPに即して）

SA法のアルゴリズムは次のように書ける（ここで$F(\sigma)$は巡回路σの長さを表す）

ｓｔｅｐ１：温度パラメータTの設定

ｓｔｅｐ２：初期解σの選択

ｓｔｅｐ３：更新解候補σ′のランダムな選択$\sigma' \in U(\sigma)$

ｓｔｅｐ４：$\Delta = F(\sigma') - F(\sigma)$として$\Delta < 0$（つまり$F(\sigma') < F(\sigma)$）ならば$\sigma \leftarrow \sigma'$とし、そうでないときは一様な乱数$r$ $(0 \le r \le 1)$を発生し、$r < \exp(-\Delta/T)$ならば$\sigma \leftarrow \sigma'$とする

ｓｔｅｐ５：ｓｔｅｐ３からｓｔｅｐ４をあらかじめ決めておいた回数繰り返し行ったならばTを減少させてｓｔｅｐ３へ戻る。

ｓｔｅｐ６：$T = 0$のとき終了

本研究では温度Tを固定した場合の数学的モデルを作成し、その挙動をいくつかのTの値について数値実験し、SA法の正当性を検証する。

5．SA法の確率モデル［1］

SA法の実行過程は、現在の巡回路（解）から、次の巡回路（解）へ現在の巡回路のみに依存する確率で推移していくことである。これは巡回路全体の集合を状態空間とするマルコフ連鎖に他ならない。状態空間を $S=\{\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_n\}$、巡回路 σ_i の総移動距離を $F(\sigma_i)$ とする。近傍系を全空間（$U(\sigma_i)=S$）としたときの推移確率行列 P は次のように与えられる。

$$P=(p_{ij}),\qquad p_{ij}=\begin{cases}\frac{1}{(n-1)}\min\left\{1,\exp\left[-\left(F(j)-F(i)\right)/T\right]\right\} & ,i\neq j\\ 1-\sum_{j(\neq i)}p_{ij} & ,i=j\end{cases}$$

近傍系を2－opt近傍としたときの推移確率行列 Q は次のようになる。ただし $k=\left|U_{2opt}(\sigma_i)\right|$

$$Q=(q_{ij}),\qquad q_{ij}=\begin{cases}0 & \sigma_j\notin U_{2opt}(\sigma_i),\ i\neq j\\ \frac{1}{k}\exp\{-[F(\sigma_j)-F(\sigma_i)]/T\} & \sigma_j\in U_{2opt}(\sigma_i),\ i\neq j\\ 1-\sum_{j(\neq i)}q_{ij} & ,i=j\end{cases}$$

P（あるいは Q）の極限推移行列 P^{∞}（Q^{∞}）の (i,j) 成分は巡回路 σ_i から出発したSA法が充分探索を行った後、巡回路 σ_j にいる確率を表すと考えられる。一般に $\{p_{ij}^{(\infty)}\}$ $(j=1,\ldots,n)$ は i に係らない同一の確率分布 $\{u_j\}$（$\{v_j\}$）$(j=1,\ldots,n)$ に収束する。実際のSA法は探索中に出会った巡回路（解）の中で最小のものを保持しておいて、最後にこれを近似解として出力するわけであるが、理論的には分布 $\{u\}$（$\{v\}$）が最適分布 $(r_1,r_2,\ldots,r_n)$ に近づくことを期待している。ただし、$(r_1,r_2,\ldots,r_n)$ は最小移動距離を与える巡回路（最適解）の集合を S_0、その要素数を $|S_0|$ とするとき、

$$r_i=\begin{cases}\frac{1}{|S_0|} & ,\sigma_i\in S_0\\ 0 & ,\sigma_i\notin S_0\end{cases}$$

である。

6．実験

まず都市数を5とし、適当に5点の座標をとる。このとき巡回路の数は $(n-1)!/2$ より12通りとなる。つぎに各々の巡回路の長さを測り、推移確率行列を算出し、2つの極限分布を求め、定常分布に至る様子が温度の違いや近傍系の違いによってどのように違うかを観察する。

7. 結果及び考察

まず実験によって分かったことは、近傍系の違いによって影響が現れるのは定常分布に至るまでの推移回数のみで、２つの定常分布は全く同じ物になる。温度が低い時は定常分布は最適分布に１に近い確率で収束するが、温度を高く設定するに従って、最適解（巡回路）以外にも正の確率をもつ非最適分布に収束するようになる。その代わり温度を高く設定した場合、定常分布への推移回数は少ない回数で求まる。実際のＳＡ法では温度を変化させながら更新解を探索していくのだが、各解の近傍の中に多くの更新解候補が数多く存在する場合，温度を低く設定し過ぎると探索終了までに時間がかかる。このためＳＡ法では温度を高い状態である程度の良い解に移っておき、その近傍から新たな更新解候補を見つけるという作業を温度を下げながら繰り返し行い最適解を求めようとしている。この方針の正当性は数値実験からも確認された。つぎに 2-opt 近傍を用いたＳＡ法では温度が高くなり過ぎると推移回数が大きくなっているが、これは温度が高くなった事により最適解からも移動する確率が大きくなり、2-opt 近傍ではどの巡回路からも５通りの更新先しかないからと思われる。

温度T	全解空間モデル	2-opt モデル
0.1	97	59
1	60	45
5	22	20
10	14	23
15	11	32
20	9	40
25	8	49
30	7	58
100	6	179

実験結果：近傍系と温度の違いによる状態推移確率行列の定常分布に至るまでの推移回数

8. まとめ

ＳＡ法の動作［１］をマルコフ連鎖によりモデル化し、定常分布を数値計算により求めた。その結果、系の温度が充分低ければ、近傍系として 2-opt 近傍を採用した場合にも（理論的に証明されている全近傍系の場合と同様）最適分布に収束することが確かめる事ができた。しかし温度を低く設定し過ぎると最適分布に収束するまでに時間がかかる。また温度が高いと最適分布へは収束しないが、少ない推移回数で局所最適解に達する。このことより初めは温度を高く設定し、温度を下げながら進めていくというＳＡ法の戦略はこの事実をふまえたものであることを納得した。また温度が同じならば、近傍系の違いによって定常分布に違いが無い事も確認された。

本件究で扱ったＴＳＰは都市数５（巡回路の数１２通り）と極めて小規模なので、本来のＳＡ法がその威力を発揮する大規模のＴＳＰにそのまま当てはめるには無理があるが、大体の傾向を確認することが出来た。

参考文献

［１］上坂　吉則　尾関　和彦：「パターン認識と学習のアルゴリズム」 文一総合出版　１９９０.
［２］横川　宣弘　　輸送制約付き施設配置問題に関する焼きなまし法の適用
東京理科大学経営工学科平成６年度卒業論文　１９９５.