

シミュレーテッドアニーリング
及川 雅隆

1 前回からの課題

文献調査によってシミュレーテッドアニーリングの基礎理論を学び、今後の研究の基礎固めをする。具体的な進め方は、書籍「モダンヒューリスティック」第 2 章 (焼きなまし)、及び「最適化問題の最新手法」第 2 章 (シミュレーテッド・アニーリング手法) を、あらかじめ分担を決め、各自が担当した部分をゼミ形式で学習を行い、理解を深める。

2 課題の達成状況

文献調査によって理解を深めた内容を以下に示す。

- SA の特徴および、長所と短所
- SA の基本アルゴリズム
- マルコフ連鎖理論の理解
- 制約条件下における SA の収束の証明
- 回路分割問題への SA の適用
- 状態遷移図の最適分布

3 SA による収束性

具体的に、マルコフ連鎖による SA の収束を示す。

推移確率は、生成確率 p_{ij} と受理確率 A_{ij} によって決まる。状態数を有限の n 、状態 S_i の近傍を構成する状態の集合を $n(S_i)$ とする。また、状態の生成に優先性を考えず、改悪方向への推移は Metropolis 基準に従って受理されるとする。温度 T における状態 S_i から状態 S_j への推移確率を $P_{ij}(T)$ とすると、次式で表せる。

$$P_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{|n(S_i)|} & (\Delta Cost_{ij} \leq 0, S_j \in n(S_i)) \\ \frac{1}{|n(S_i)|} \cdot e^{-\frac{\Delta Cost_{ij}}{T}} & (\Delta Cost_{ij} > 0, S_j \in n(S_i)) \\ 1 - \sum_{k, k \neq i} P_{ik} \cdot A_{ik}(T) & (i=j, S_j \in n(S_i)) \\ 0 & (S_j \notin n(S_i)) \end{cases}$$

ただし、 $\Delta Cost_{ij} = (Cost_j - Cost_i)$ とする。

この各推移確率は、推移行列とよぶ $n \times n$ 行列 $P(T)$ にまとめることができる。

$$P(T) = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots & P_{1n} \\ P_{21} & P_{22} & \dots & P_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{n1} & P_{n2} & \dots & P_{nn} \end{pmatrix}$$

この推移行列は、各状態の評価値と、そのときの温度 T にしか依存していないので、非斉時的マルコフ連鎖である。また、任意の状態から別の任意の状態に推移できる確率が常に正であるので、このマルコフ連鎖は既約である。マルコフ連鎖は複数の定常分布を取りうるが、既約であれば定常分布は一意的となる。

マルコフ連鎖の理論では、有限、既約、斉時、非周期的の場合をエルゴード的といい、

$$\pi = \pi P(T)$$

を満たす定常分布 π が存在することが証明されている。状態 S_j に到達する確率は、定常分布 π の $\pi_j(T)$ 要素として与えられる。生成に優先性を与えず、改悪方向への受理を Metropolis 基準とすると、次の定常分布となる。

$$\pi_j(T) = \pi_0(T) e^{-\frac{\Delta Cost_{i_0j}}{T}}$$

ただし、 S_{i_0} を最適な構成とし、 $\pi_0(T)$ は、次式で示される、正規化のための係数である。

$$\pi_0(T) = \frac{1}{\sum_{k=1}^n e^{-\frac{\Delta Cost_{i_0k}}{T}}}$$

さらに、

$$\lim_{T \rightarrow 0} \pi_j(T) = \begin{cases} \frac{1}{|\Omega_0|} & (S_j \in \Omega_0 \text{ のとき}) \\ 0 & (S_j \notin \Omega_0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

ここで、 Ω_0 は最適な構成の集合である。

このようにして、SA のアルゴリズムは一様確率分布で最適な構成のうちの 1 つに到達し、準最適な構成に到達する確率は 0 になる。

4 翌月への課題

- 上に挙げた文献の調査を引き続き継続するとともに、新たな文献の調査を実施する
- プログラミング言語 (C++) の学習