

最良解を基準とする SA の適応的温度スケジュール

Simulated Annealing with adaptive temperature based on best solution

輪湖 純也

Junya WAKO

Abstract: Simulated annealing (SA) is an effective general heuristic method for solving many combinatorial optimization problems. This paper deals with two problems in SA. One is the long computational time of the numerical annealings. The other one is the determination of the appropriate temperature schedule in SA. The proposed method is based on concept of Equilibrium Binary Search which proposed by Jonathan, and controls temperature schedule adaptively. In addition, It can reduce the computational time of the numerical annealings maintaining the searching ability. The proposed method is applied to solve many TSPs (Traveling Salesman Problems), and it is found that the method is very useful and effective.

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing : SA) は, 広範囲の組合せ最適化問題に有効な汎用近似解法である. 温度と呼ばれるパラメータを用いて, 改悪方向への状態遷移を確率的に受理することにより, 局所解に陥らず大域最適解に到達することが期待される. しかしながら SA は, 総探索回数, 最高温度, 最低温度, クーリング率, クーリング周期など数多くのパラメータ設定を要し, これらのパラメータ設定により解探索能力が大きく左右される.

本研究では, SA のパラメータのうち, 総探索回数, クーリング率, クーリング周期に注目し, パラメータ数の低減を試みる. そこで, まず従来の SA に良く用いられてきたパラメータ設定に関してまとめ, 温度パラメータの特徴を示す. 次にこの温度パラメータの特徴を考慮した Jonathan らの Equilibrium Binary Search¹⁾ を示す. そして, この手法にヒントを得て, 温度スケジュールを自動化する新たな手法を提案する. 提案手法を巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem : TSP) に適用し, 従来の SA と比較することで提案手法の有効性を検討する.

2 Simulated Annealing

SA は, 金属の焼きなましと呼ばれる加熱炉内の固体の冷却過程をシミュレートするアルゴリズムに端を発し, 組合せ最適化問題に有効な汎用的近似解法として用いられている. SA は式 (1) に示すメトロポリス基準を用いることによって, 理論上は真の最適解に到達することが保証されている²⁾.

$$P(\Delta E) = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta E < 0 \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

最適解への漸近収束性を保証するには, $T_{k+1} = T_1 / \log k$ で与えられる対数型アニーリング以上に急速に冷やしてはならない. ここで, T_k は, アニーリング (徐冷) の第 k ステップの温度, T_{k+1} は次のステップの温度である. しかし, 対数型を用いた場合, 極端に計算スピードが遅いため, 実際には真の最適解への収束を犠牲にして, $T_{k+1} = \gamma T_k$ ($0.8 \leq \gamma < 1$) で与えられる指数型アニーリングがクーリング関数として良く使われる.

クーリング関数に指数型アニーリングを用いた場合, SA のパラメータには, 次の 6 つのパラメータを挙げる事ができる.

- 最高温度 (初期温度)
- 最低温度 (終了温度)
- クーリング周期 (1 つの温度での繰り返し回数)
- クーリング回数
- クーリング率
- 総探索回数

これらのパラメータの決定方法について, これまで多くの研究がなされてきたが, 特定の方法が確立されているわけではない.

例えば, 最高温度, 最低温度に関する設定方法に関して, 山田らは, ある遷移回数に対する改悪方向への受理遷移の比率 (μAG 比) を基に, 最高温度を μAG 比が 50%, 最低温度を μAG 比が 0.2% とした方法を用いている³⁾.

また, 小西らは次の設定方法を用いている⁴⁾. この設定方法は, 簡単な予備実験により決定できるため本研究ではこの方法を採用する.

- 最高温度: 最大の改悪となる推移を 50% の確率で受理する温度
- 最低温度: 最小の改悪となる推移がクーリング周期内で最低 1 回は受理される温度

次に、クーリング周期であるが、理論的には系が平衡状態に達するまで一定温度でのアニーリングを行う必要がある。しかしながら実際には問題を構成する要素数の整数倍だけアニーリング処理を実行することが多い。小西らは、TSPを対象問題とした場合、都市数×20という値をクーリング周期に用いている⁴⁾。

さらに、総探索回数について、1) 一回の温度の下げ幅は十分に小さくなければならない、2) 一回の試行に極端に長い時間をかけない、3) ひとつの実験の間に十分多くの解を生成しなければならないなどを考慮して実験的に定める必要がある³⁾。

最後に、クーリング率 γ について、例えば0.9や0.95という値が直に設定される場合もあるが、上記のパラメータが先に決定されている場合、式(2)を用いて決定することができる。

$$\gamma = \left(\frac{MinT}{MaxT} \right)^{1/(N-1)} \quad (2)$$

ここで、最高温度は $MaxT$ 、最低温度は $MinT$ 、クーリング回数は N である。クーリング回数は、(総探索回数/クーリング周期)で算出できる。

なお、これ以外にもSAでは近傍構造を対象問題毎に定義する必要があるが、本研究では対象問題をTSPとし、SAの近傍構造に2-change⁴⁾を用いる。

3 SAにおける温度の特徴と初期温度の推定¹⁾

SAではある温度で十分アニーリングを行うと、ある状態 x を固定して次状態 x' を複数発生させた時に得られる ΔE の頻度分布 $P(\Delta E)$ が、(擬)平衡状態になる。このことを数学的に定義すると次の式(3)のようになる。($E(\cdot)$: 期待値)

$$E(\Delta E) = 0 \quad (3)$$

$$E(\Delta E) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Delta E P(\Delta E) P_{Acc}(\Delta E) d\Delta E \quad (4)$$

$P_{Acc}(\Delta E)$ は、 $P(\Delta E)$ における受理遷移の頻度分布である。これを、式(1)に示すSAのメトロポリス基準を用いて展開すると、次の式(5)のようになる。

$$E_- = E_+ \quad (5)$$

$$E_- \equiv \left| \int_{-\infty}^0 \Delta E P(\Delta E) d\Delta E \right| \quad (6)$$

$$E_+ \equiv \int_0^{\infty} \Delta E P(\Delta E) e^{-\Delta E/T_{eq}} d\Delta E \quad (7)$$

すなわちSAにおける平衡温度 T_{eq} とは、状態遷移が改悪となる場合の ΔE の期待値 E_+ と、改善となる場合の ΔE の期待値 E_- が等しくなることを意味している。

Jonathanらは、この点に注目し初期温度の推定手法として、Equilibrium Binary Search(EBS)¹⁾を提案した。この手法は、初期解 x_s に対して $P(\Delta E)$ を生成し、式(5)を満たすように温度 T を変動させることによって、最高温度を決定するものである。EBSのアルゴリズムは次の通りである。

1. ある初期解に対して、SAの生成処理を繰り返し適用し $P(\Delta E)$ を計測する。このとき、遷移処理は行わないものとする。
2. 初期温度 T_s を任意に設定する。
3. T_s に基づき、 $P_{Acc}(\Delta E)$ を計算する。
4. E_- と E_+ を計算する。
5. もし、 $E_- < E_+$ であれば、 T_s を減少させ3へ。もし、 $E_- > E_+$ であれば、 T_s を増加させ3へ。もし、 $E_- = E_+$ であれば、 T_s は平衡温度 T_{eq} であるので終了。

このように、Jonathanらの提案するEBSは、初期解 x_s に対して $P(\Delta E)$ を生成し、式(5)を満たすように T を変動させることによって、最高温度を決定するものである。

4 EBSによる温度スケジュールの適応的決定

EBSは、SAにおける最高温度を決定する手法として提案されたが、この考え方は初期解のみでなく、SAで得られるアニーリング途中の解に対しても用いることができる。Fig. 1は、eil101における頻度分布 $P(\Delta E)$ を探索の初期、25%、50%経過した時点での解について計測した図である。横軸に ΔE 、縦軸に $P(\Delta E)$ をとる。

この図から、探索が経過する、すなわち温度が下がるにつれて頻度分布は右にシフトしていく様子が分かる。これは、エネルギー値が改善されるにつれて、改悪方向への遷移が多くなるためである。つまり、各温度で到達する平衡状態において形成される頻度分布は、温度によって異なる。

このことは、探索途中のある状態 x から生成される $P(\Delta E)$ が与えられる時、この分布の平衡温度 T_{eq} は式(5)を満たすことによって導くことができるということを意味している。

このように考えると、探索のフェーズに合わせて適切な温度を求めることができ、これを繰り返すことによって、SAの温度スケジュールを自動化することができる。

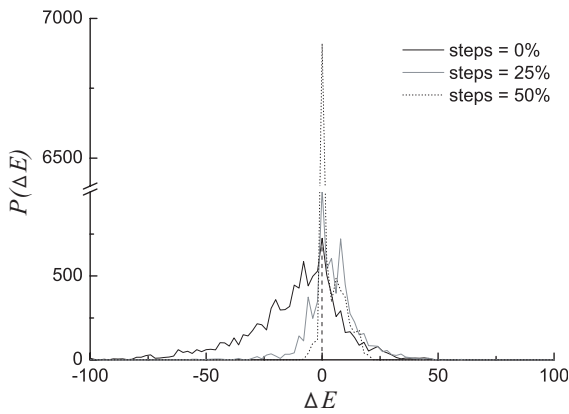


Fig. 1 頻度分布 $P(\Delta E)$ の推移

以下では、そのアプローチについて具体的に説明する。なお本研究では、このアプローチ方法を EBS を用いた適応的溫度スケジュールを持つ SA(SA with Adaptive Temperature determined by EBS : SA/AT(EBS)) と呼ぶことにする。

5 SA/AT(EBS) のアルゴリズム

EBS は、ある状態 x に相応しい温度、つまりその状態の平衡溫度を求めるものである。これを溫度を一定比率で減少させる指数型クーリング処理の代わりに用いることで、溫度スケジュールの自動化が図れる。具体的な SA/AT(EBS) のアルゴリズムを Fig. 2 に示す。

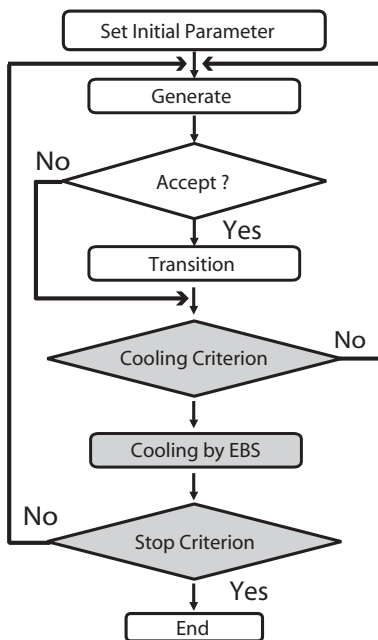


Fig. 2 SA/AT(EBS) のアルゴリズム

1. 最高溫度を設定する。

2. クーリング周期まで一定溫度で生成処理、受理判定、遷移処理からなるアニーリングを行う。なお、本研究ではクーリング周期は可変である。これについては後述する。
3. この一定溫度でのアニーリングでの最良解に対して EBS を適用する。なお、本研究では EBS による生成数を Jonathan らが用いた 10^4 に固定する¹⁾。
4. 終了条件は $E_- = 0$ とする。 $E_- \neq 0$ ならば、2) に戻る。なお $E_- = 0$ というのは、改良方向への遷移が全く生成されない状態を意味し、これ以上探索しても改良される余地がないため終了条件として適当である。

さらに、提案手法ではクーリング周期を一定値ではなく可変値にすることを考える。クーリング周期は、理論上系が平衡状態に達するまで一定溫度でのアニーリングを行う必要があるが、実用上は近傍数の整数倍だけアニーリングを実行することが多い。

しかしながら筆者らの経験では、溫度によって平衡状態に到達するまでのアニーリング回数に大きく偏りがあるため、近傍数の整数倍という一定値では非常に非効率な探索となる。そこで、本研究では、クーリング周期を次のように設定する。

- クーリング周期：最良解がある一定期間更新されなくなるまで。

ここで、ある一定期間は、予備実験より 都市数 $\times 80$ とする。予備実験の結果については後述する。このように、最良解がある一定期間更新されなければ系が平衡状態に到達したと判断する。

このように SA/AT(EBS) は、総探索数、クーリング回数、クーリング率といったパラメータの設定を不用にし、解が探索のフェーズに合わせて、適応的にクーリング周期とクーリング率を調節するものである。

6 数値実験

6.1 実験方法

SA/AT(EBS) の有効性を検討するために、数値実験を行う。対象問題は、巡回セールスマン問題 (TSP) の代表的なベンチマーク問題の中から 6 つの問題を選択する。比較手法は、逐次 SA (Sequential SA : SSA) である。解探索能力に関しては、最適解からの誤差率 (Error ratio)(%) を用いて評価する。誤差率は、次の式 (8) を用いて計算される。ここで、 f_{ave} は 30 回試行の解の平均値、 f_{opt} は最適解である。

$$Error\ Ratio \equiv (f_{ave}/f_{opt} - 1) \cdot 100 \quad (8)$$

これは、TSP に対するアルゴリズムの評価においては一般的に用いられるものであり、この数字が小さいほど最適解に近いといえる。

実験に用いる SSA のパラメータを次の Table 1 に示す。なお、最高温度、最低温度については第 2 節での設定方法を用いる。

パラメータ	値
総探索数	都市数 × 3200
クーリング周期	都市数 × 20
クーリング回数	160

次に、SA/AT(EBS) のパラメータを次の Table ?? に示す。なお、最高温度、最低温度については、SSA と同様に第 2 節での設定方法を用いる。最高温度については、本来 EBS を用いて決定するのが良いと考えられるが、付録に示すように、対象問題が TSP の場合 EBS で最高温度を決定することができないため、汎用的な決定法を用いた。それ以外のパラメータである可変クーリング周期は、最良解が都市数 × N 回更新されない時点として、 N を 60, 80, 100 と変えて実験を行う。

6.2 実験結果

6.2.1 解探索能力

解探索能力に関する実験結果を Fig. 3 に示す。図の横軸は対象問題、縦軸は誤差率 (%) である。結果は、30 回試行の最悪値、平均値、最良値である。

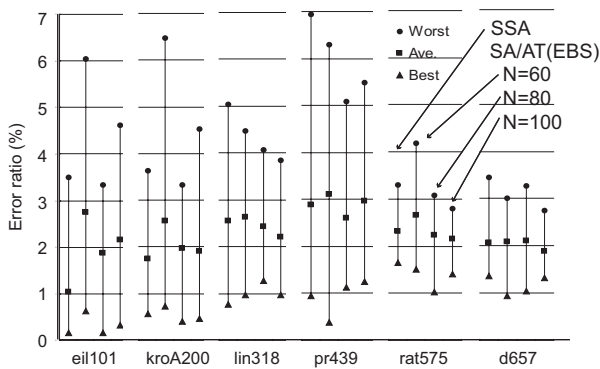


Fig. 3 SA/AT(EBS) の解探索能力

この図から、SA/AT(EBS) のパラメータ N を 60 から 80 に増やすにしたがって明らかに解探索能力の向上が見られるものの、80 から 100 ではあまり差が見られない。一方、 $N = 80$ の SA/AT(EBS) と SSA を比較すると平均値、最良値ともにほぼ同等の性能を示すことが分かる。

6.2.2 総評価計算回数

次に、総評価計算回数の比較結果を Fig. 4 に示す。図の横軸に対象問題、縦軸に SSA の総評価計算回数に対する SA/AT(EBS) の総評価計算回数の割合 (%) をとる。結果は、30 回試行の平均値である。

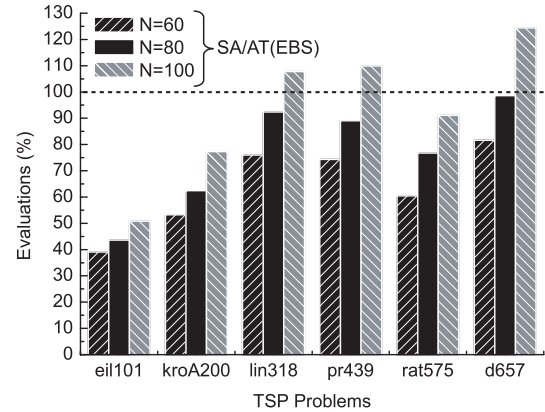


Fig. 4 SA/AT(EBS) の評価計算回数

この図から、SA/AT(EBS) のパラメータ N を増やすにしたがって、評価計算回数は増加することが分かる。しかしながら、 N が 80 程度までなら SSA より明らかに高速なアルゴリズムであることが分かる。

以上、解探索能力、総評価計算回数の 2 点から考慮して、SA/AT(EBS) のパラメータ N は 80 とする。

6.2.3 SA/AT(EBS) の温度スケジュール

SSA で与えた温度スケジュールおよび SA/AT(EBS) で結果として得られた温度スケジュールを Fig. 5 に示す。横軸に評価計算回数、縦軸に温度をとる。なお、対象問題は eil101 である。

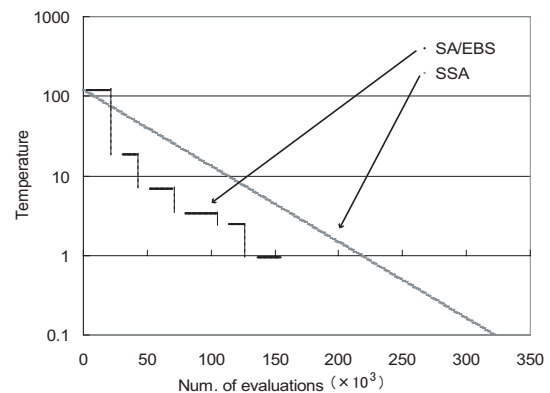


Fig. 5 SA/AT(EBS) の温度スケジュール

この図から、SSA では、高温から低温まで規則正しい階段状の温度スケジュールを与えるのに対し、SA/AT(EBS) では、ある温度でのアニーリングで得られた最良解を基準にして適応的に次の温度を決めるた

め、大きな階段状の温度スケジュールとなる。また、各温度によってクーリング周期が異なることが分かる。なお、SA/AT(EBS)のグラフにおいてクーリング時に隙間を入れたのは、頻度分布生成時の評価計算回数 10^4 を考慮し、SSA と評価計算回数を合わせるためである。

6.3 考察

Fig. 5 から分かるように、SA/AT(EBS) ではクーリングを意図的に操作し、最良解を基準にして温度を下げるため、従来の SA よりも急速に冷却することになり、局所解に陥りやすい性質を持っているといえる。したがって、SA/AT(EBS) の複数試行の最良値が SSA と同等であっても、平均値で比較すると劣ると予想された。しかしながら、Fig. 3 が示すように、最良値でもあるいは平均値で比較しても同等の性能が得られたことは意外な結果であった。これは、従来の SSA の温度設定法が最適なものでなく、無駄な探索が多いためであると考えられる。

以上から、SA/AT(EBS) は局所解に陥りやすいというリスクを抱えつつも、良好な解を高速に求めることが可能である。次節では、このリスクを回避するために、並列モデルへの拡張を考える。

7 完全独立型並列モデルへの拡張

SA/AT(EBS) は従来の SA よりも急速に冷却するためやや過冷却気味であり、本来局所解に陥りやすい性質を持っている。したがって、このリスクを回避するためには、並列化による多点探索が有効であると考えられる。

SA の並列化手法は、プロセス間での情報交換の有無から 2 つのアプローチに分けることができる。

- 通信型アプローチ
- 非通信型アプローチ

通信型とは、プロセス間で探索途中になんらかの情報交換を行い、パラメータチューニングを行った上で処理を再開する方式である。例えば、小西らが提案する温度並列 SA(Temperature Parallel SA : TPSA)⁵⁾ は、このタイプに分類される。

一方、非通信型とは、プロセス間で情報交換を行うことなく、完全に独立に逐次 SA を並列に実行する方式である。このため、完全独立型とも呼ばれる。この方式では、異なるプロセスで実行される逐次 SA で得られた複数の解のうち、最良のものを最終的な解としている。Krishna らが提案する Distributed SA の 3 つのアルゴリズム⁶⁾ は、いずれもこのタイプに分類される。逐次 SA から並列モデルへ拡張する場合、この方式が最も単純である。

そこで、本研究では非通信型アプローチにより並列モデルに拡張した PSA/AT(EBS)(Parallel SA/AT(EBS))

を用い、解探索能力の向上を試みる。

8 数値実験

8.1 実験方法

PSA/AT(EBS) の性能を検証するために数値実験を行う。実験は、6 つの TSP を対象問題とし、完全独立型並列 SA(Parallel SA : PSA) および温度スケジュールが自動化される温度並列 SA(TPSA) と解探索能力を比較する。

温度並列 SA(TPSA)⁴⁾ は、複数のプロセスに異なる温度を与え、各プロセスは一定温度のアニーリングを行い、ある一定間隔で隣接する温度のプロセス間で確率的に解交換を行うということを繰り返すことによって解を探索する手法であり、PSA/AT(EBS) と同様、温度スケジュールは適応的に決定される。Table 2 に、TPSA のパラメータを示す⁴⁾。

パラメータ	値
プロセス数	32
1 プロセスの総探索数	都市数 × 3200
同期周期	都市数 × 20
同期回数	160

なお、PSA/AT(EBS)、PSA のパラメータは逐次的の場合と同じ値を用いる。プロセス数は、TPSA に合わせて 32 とする。

8.2 実験結果

実験結果を Fig. 6 に示す。図の横軸に対象問題、縦軸に誤差率 (%) をとる。

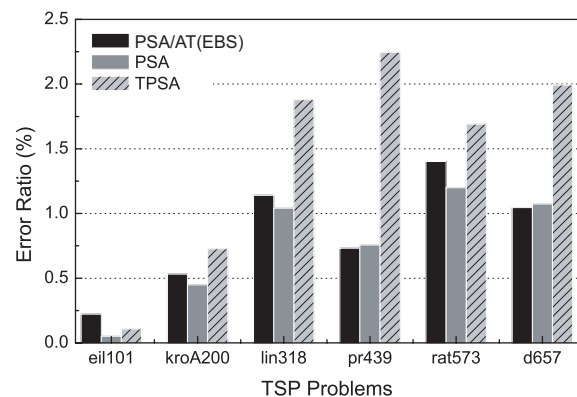


Fig. 6 PSA/AT(EBS) の解探索能力

この図から、PSA/AT(EBS) はほぼ全ての問題において TPSA より明らかに良好、PSA とほぼ同等の解探索能力を有することが分かる。

以上から、TPSA は温度スケジュールが適応的に決定できる利点から、探索性能の若干の悪化を無視して利用

されることが多かったが，PSA/AT(EBS)では，温度スケジュールの自動化と高い解探索能力の両立を可能とした．その上，PSA/AT(EBS)では，プロセス間通信がないのでTPSAに比べて並列化効果は極めて優れている．

9 結論

本研究では，Jonathanらが提案したEquilibrium Binary Search(EBS)を探索途中に用いることによって，温度スケジュールを自動化する新たなSA(SA/AT(EBS))を提案した．

提案手法は，総探索数，クーリング回数，クーリング率といったパラメータの設定が不要であり，解の探索フェーズに相応しい温度とクーリング周期を自律的に探索することが可能である．

巡回セールスマン問題(TSP)を用いた数値実験より，SA/AT(EBS)はSAと同等の性能をSAより高速に導くことができる手法であることが分かった．このことは，従来SAで用いられてきた緩慢に冷却する温度スケジュールではなく，提案手法の適応的溫度スケジュールが各対象問題に対して，より適切な温度を提案していることを示唆している．

また，SA/AT(EBS)の局所解に陥るリスクを回避するため，完全独立型並列モデルに拡張したPSA/AT(EBS)を提案した．TSPを用いた数値実験より，PSAとほぼ同等の性能を得ることができた．また，代表的な通信型並列SAモデルであるTPSAと比較すると，PSA/AT(EBS)は明らかに良好な性能を示すことが分かった．このため，提案手法は高い解探索能力を持ちかつ高速で適応的な温度スケジュールを持つSAであるといえる．

参考文献

- 1) Jonathan Rose, Jurgen Wolf and Wolfgang Klebsch. Temperature measurement and equilibrium dynamics of simulated annealing placements. IEEE Transactions of Computer Aided Design, Vol. 9, No. 3, 1990.
- 2) E. Aarts and J. Korst. Simulated Annealing and Boltzmann Machines. John Wiley & Sons, 1989.
- 3) 山田武士, Bruce E. Rosen, 中野良平. クリティカルブロックシミュレーテッドアニーリング法によるジョブショップスケジューリング問題の解法. 電気学会論文誌. 1994.
- 4) 小西健三, 屋敷正史, 瀧和男. 温度並列シミュレーテッドアニーリング法の巡回セールスマン問題への適用と実験的解析. 電子情報通信学会論文誌. 1997.
- 5) 小西健三, 瀧和男, 木村宏一. 温度並列シミュレーテッドアニーリング法とその評価. 情報処理学会論文誌. 1995.
- 6) K. Krishna, K. Ganeshan and D. Janaki Ram. Distributed simulated annealing algorithms for job shop scheduling. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, 1995.

A 付録

もし初期解の分布 $P(\Delta E)$ が，Fig. 7 に示すように $\Delta E = 0$ より左にシフトしている場合は，どんな温度を与えたとしても常に $E_- > E_+$ となってしまうため，温度は上昇し続け，最高温度を決定することができない．

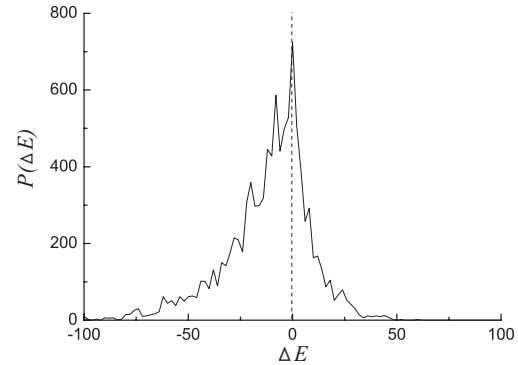


Fig. 7 eil101における初期解の分布 $P(\Delta E)$