

# 探索中の良好な解と交叉を行うシミュレーテッドアニーリング

平岩 健一郎

Kenichiro HIRAIWA

## 1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing:SA) は、熱力学のアニーリングを計算機上でシミュレートすることにより、エネルギーと呼ばれる目的関数値が最小となる状態 (大域的な最小状態) を見つける汎用最適化手法である。

SA では近傍内での解摂動により次状態を生成し、それが受理判定において受理された場合、現在の解を次状態に移させる。すなわち、SA では探索に過去の探索履歴を用いていない。

しかしながら SA で探索した過去の解の中に、現在の解が失ってしまった良好な部分を有する解が存在する可能性があることが本研究より明らかとなった。そのため、過去の解の中から良好なものをアーカイブとして保存し、そのアーカイブと現在の解との情報交換を行うことにより、より優れた探索が可能になると考えられる。

本研究では、その情報交換の方法として遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithms:GA) における交叉を用い、過去の探索点の中から良好な解を保存したアーカイブの中の解と、現時点で最も評価値の良い解 (最良解) との交叉を行うシミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing with Archive based Crossover:SA/AX) を提案し、過去の探索履歴を利用することの意義、さらに組合せ最適化問題における交叉の有効性を検証する。

## 2 交叉による良好な解の生成

### 2.1 過去の探索点との情報交換

組合せ最適化問題では、目的関数の評価値だけでなく設計変数値も重要である。すなわち、同程度の評価値であっても、設計変数値の異なる解が存在する。

Fig. 1 の例において A 点と B 点は同程度の評価値を示しているが、必ずしも設計変数の値が類似しているとは限らない。この A と B の間で情報交換を行い、設計

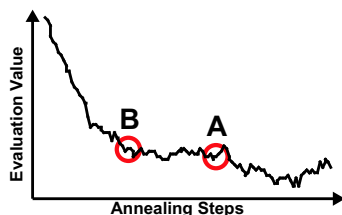


Fig. 1 探索履歴

変数の良好な部分を集めることで、より良好な解を作る

ことができると考えられる。

### 2.2 情報交換としての交叉

交叉とは GA の遺伝的操作の一つで、複数の個体内の染色体の一部を組み替えて新たな個体を生成する操作のことを指す。本研究ではこの操作を解の間の情報交換の手法として SA に適用する。交叉による情報交換のイメージを Fig. 2 に示す。SA に交叉を組み込んだ例と

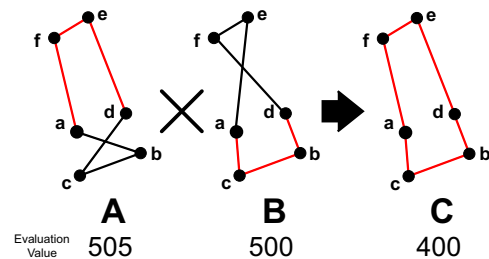


Fig. 2 異なる部分解を持つ解間の交叉

して、遺伝的交叉を用いた並列 SA<sup>2)</sup> の有効性が示されているが、この手法は連続最適化問題に特化したものであり、組合せ最適化問題においては SA における交叉の有効性は示されていない。

本研究では、組合せ最適化問題を対象として、過去の良好な探索点との交叉による情報交換を行う SA (Simulated Annealing with Archive based Crossover) を提案し、その有効性を検証する。なお、対象問題は代表的な組合せ最適化問題の一つである巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem:TSP) とする。

### 2.3 探索履歴における部分解の存在

ここでは SA の探索履歴の中に、異なる部分解を持つ解が存在しているかを検証するため実験を行う。実験では、通常の SA (SimpleSA) で探索を行い、一定周期ごとにその周期の最良解をアーカイブに保存する。そしてそのアーカイブ内の解を考察する。対象問題を eil51<sup>4)</sup> とし、アーカイブ数は 4 とする。

なお、本研究では、SA の近傍構造に、巡回路の 2 本の枝を交換する 2-change を用いた。また、重要温度である 1.7 度の一定温度探索とし、終了条件は都市数 × 32 回探索が行われた時点とした。ここで重要温度とは一定温度探索で良好な解が得られる温度のことを指す。

実験の結果を Fig. 3 に示す。アーカイブとして選出された順に解 A, B, C, D とする。太線は最適解と一致しているエッジ、点線はそれ以外のエッジである。ま

た、それぞれの最適解との誤差率 (Error ratio) と最適解と一致しているエッジ数 (最適エッジ数) を Table 1 に示す。 Table 1 から、解 C と D は誤差率が等しいが最

Table 1 評価値と部分最適解数

	Error ratio (%)	最適エッジ数
解 A	0.7042	38
解 B	1.6431	40
解 C	1.4084	36
解 D	1.4084	35

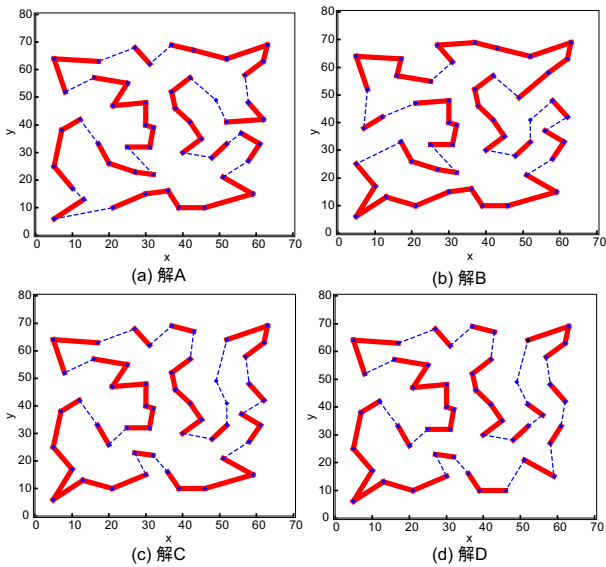


Fig. 3 探索履歴中の 4 つの良好な解

適エッジ数は異なることが確認できる。このことは、同程度の評価値であっても設計変数値の異なる解が存在することを示している。また、最適エッジ数は 1 しか変わらないが、Fig. 3 を見ると、実際には残りの 35 個も完全に一致しているわけではないことがわかる。また、最適エッジ以外のエッジについても同様である。

以上より、探索履歴の中に異なる部分解を持つ解が存在することがわかった。

### 3 SA/AX のアルゴリズム

提案手法 (SA/AX) のアルゴリズムは以下の通りである。 Fig. 4 にアルゴリズムのフローチャートを示す。提案手法による探索のイメージは Fig. 5 のようになる。

1. 次状態生成
2. 受理判定
3. 状態遷移
4. アーカイブへの追加

上記の処理を一定期間繰り返した後、一定周期の中で最も評価値の良いものをアーカイブとして選出。

5. 交叉判定

一定周期ごとに過去の探索の中でアーカイブからランダムに選んだ解と最も評価値のよい解 (最良解) とを交叉させ、一定個数の解を生成する。

6. 現在の解への反映

交叉によって生成した複数の子と親の内、最も評価値の良いものを探索点とする。

7. クーリング

8. 終了

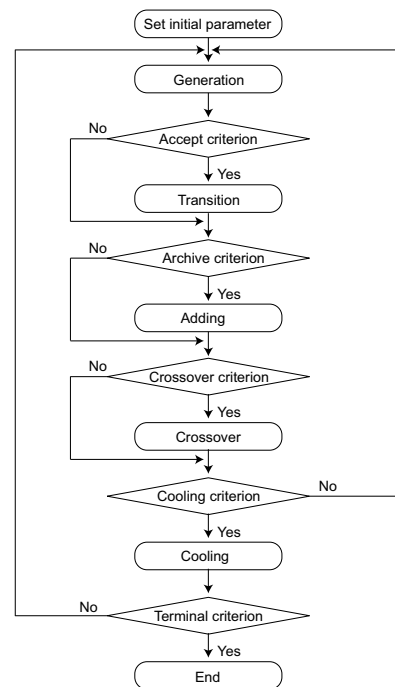


Fig. 4 SA/AX のアルゴリズム

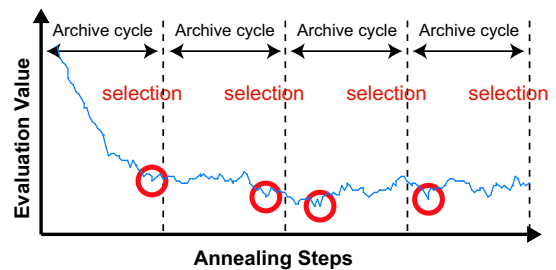


Fig. 5 探索履歴中の良好な解の取得

### 4 数値実験

#### 4.1 実験の交叉法

本研究では、TSP に対応した交叉法として枝交換法 (Edge Exchange Crossover: EXX)<sup>3)</sup> を用いる。これは前川らによって提案された交叉法で、親の表す巡回路に含まれる枝に注目するものである。EXX では、親個体の持つ枝のみから子個体の巡回路を生成するため、親の持つ巡回路の形質の大部分が継承される。具体的な交叉の操作を以下に示す。

1. 二つの巡回路  $T^X$ ,  $T^Y$  のそれぞれについて、これらに含まれる枝を通過順に並べ、

$$E^X = \{e_1^X \cdots e_N^X\} \quad E^Y = \{e_1^Y \cdots e_N^Y\}$$

とする。ただし、枝  $e = (\text{始点 } e_S, \text{終点 } e_T)$  で表し、

$$e_k^X = (e_k S^X, e_k T^X) = (t_k^X, t_{k+1}^X)$$

$$e_k^Y = (e_k S^Y, e_k T^Y) = (t_k^Y, t_{k+1}^Y)$$

とする。

2.  $E^X$  から一つの枝  $e_{i_1}^X$  を選ぶ。さらに、 $E^Y$  から同じ始点  $e_{i_2 S}^Y = e_{i_1 S}^X$  を持つ枝  $e_{i_2}^Y$  を選ぶ。
3.  $e_{j_2 S}^X = e_{i_1 T}^X$  となる枝  $e_{j_2}^X$ 、および  $e_{j_1 S}^Y = e_{i_2 T}^Y$  となる枝  $e_{j_1}^Y$  を選び出す。
4. 枝  $e_{i_1}^X$  と枝  $e_{i_2}^Y$  とを交換する。  $e_{i_1 T}^X = e_{i_2 T}^Y$  であれば終了。
5. 枝  $e_{i_1}^X$  と  $e_{j_1}^Y$  の間にある部分巡回路

$$E_{i_1 j_1}^X = \{e_{i_1+1}^X e_{i_1+2}^X \cdots e_{j_1-1}^X\}$$

を逆順にする。

$$\bar{E}_{i_1 j_1}^X = \{\bar{e}_{j_1-1}^X \bar{e}_{j_1-2}^X \cdots \bar{e}_{i_1+1}^X\}$$

となる。ここで、 $\bar{e}_k^X$  は  $e_k^X$  の始点と終点を入れ替えた枝  $(e_{kT}^X, e_{kS}^X)$  である。

6. 枝  $e_{i_2}^Y$  と枝  $e_{j_2}^Y$  の間の枝  $E_{i_2 j_2}^Y$  について、5. と同様に  $\bar{E}_{i_2 j_2}^Y$  を作成し、 $E_{i_2 j_2}^Y$  を  $\bar{E}_{i_2 j_2}^Y$  で置き換える。
7.  $i_1 = j_1$ ,  $i_2 = j_2$  として3.へ。

## 4.2 パラメータ検討

### 4.2.1 交叉開始時期

交叉開始時期とは、一連のアンニーリングプロセスの中でどの時点から交叉を始めるかを表すパラメータである。交叉を行う上で、解の多様性は重要である。そのことから提案手法においてもアーカイブから多様性を失わせないための工夫が必要である。提案手法において早期からの交叉を行ってしまうと解が早期収束を起し、アーカイブから多様性が失われてしまうと考えられる。また、現在の解がまだ収束していないため、解に悪影響を及ぼす可能性がある。

よって、交叉を開始する時期を探索開始直後、探索1/4後、探索1/2後、探索3/4後の4パターンに分け交叉開始時期実験の検討を行う。探索開始直後とは探索開始から一定周期で交叉を繰り返すもの、探索1/4後は、探索回数がアンニーリングステップ数の1/4と等しくなっ

Table 2 パラメータ

対象問題	lin318
クーリング周期	都市数 × 20
総アンニーリング数	クーリング周期 × 32
アーカイブ数	交叉回数 × 4
試行回数	20

た時点から一定周期ごとに交叉を行うものである。この実験のパラメータを Table 2 に示す。交叉回数は32回、子数は2としている。

実験結果を Fig. 6 に示す。Fig. 6 を見ると交叉開始を探索後半にするに従い評価値は良くなっている。また、Fig. 7 にそれぞれの最も評価値の良かった温度での20試行の結果を示す。横軸は各試行を評価値の誤差率順にソートしている。2つのグラフより探索3/4後に交叉を開始するものが最も良い結果となっていることがわかった。

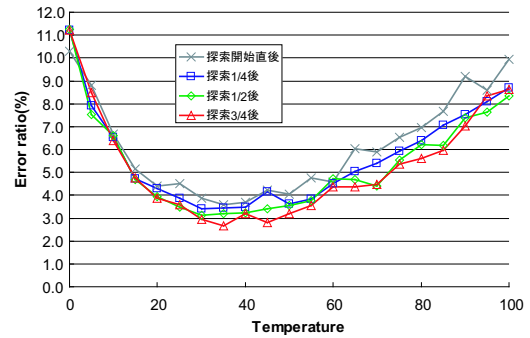


Fig. 6 交叉開始位置パラメータの実験

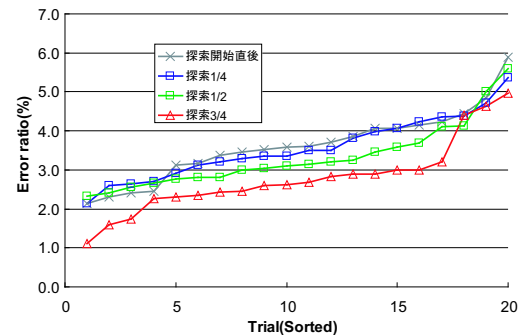


Fig. 7 各試行をソートした図

### 4.2.2 交叉回数

本研究では親と子の中で最も評価値の良いものを探索点とするため、交叉によって生成された子の評価値が良好でなかった場合は、親が探索点となる。そのため交叉によって少なくとも評価値が悪くなることはなく、交叉回数を増やすに従って結果は良くなると考えられる。よってこれを確認するため交叉回数を8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024, 2048の9つに変更して比較する。

このときの基本パラメータは Table 2 と同じで子数は 2 個体としている。

実験結果を Fig. 8 に示す。Fig. 8 より交叉回数を増やすに従って良くなっていることがわかる。

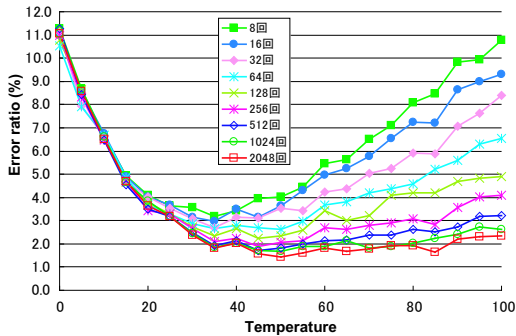


Fig. 8 交叉回数パラメータの実験

#### 4.2.3 子数

子数とは、2つの解から交叉によって生成される解の数を表す。子数が増えるに従って2つの親の良好な部分解が組合わさる可能性が高くなるため、良好な結果になると考えられる。これを実験によって確認するため、子数を 4, 8, 16, 32, 64, 128 個と変更して比較する。このときのパラメータは Table 2 と同じであり交叉回数は 32 回としている。

実験結果を Fig. 9 に示す。Fig. 9 より、子数が多いほど良好な結果が得られた。

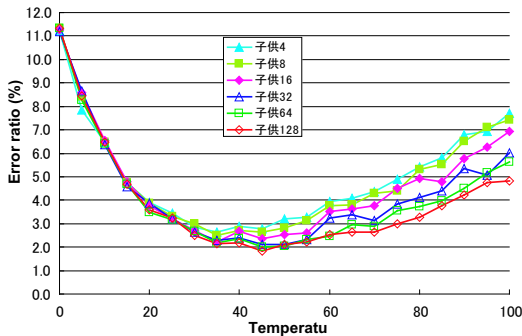


Fig. 9 子数パラメータの実験

以上のことから交叉回数と子数は増やすに従って結果が良くなることが示された。しかし、交叉によって付加される評価計算回数は交叉数×子数となり、双方をあまりに多くしすぎると膨大な計算時間がかかると考えられる。

#### 4.3 SA との比較

提案手法の有効性を検証するため、対象問題を eil101, kroA200, lin318, pr439, rat575, d657 とし SA との比較実験を行う。数値実験のパラメータは Table 3 とする。

それぞれの重要温度での実験結果を Fig. 10 に示す。

Fig. 10 より全ての問題において提案手法が最も良い結果が得られた。

Table 3 数値実験パラメータ

クーリング周期	都市数×20
総アニーリング数	クーリング周期×32
交叉開始時期	探索 3/4 後
交叉回数	512
子数	64
アーカイブ数	交叉回数×4
試行回数	20

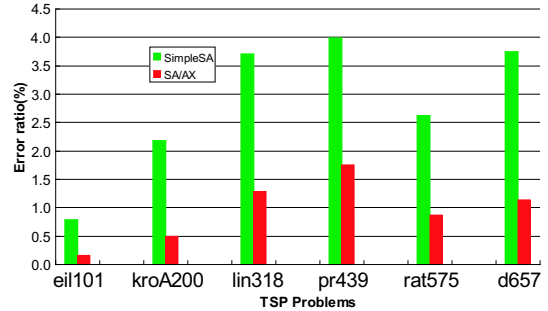


Fig. 10 各対象問題における比較

## 5 まとめ

本報告では過去の探索履歴から選出した良好な解と現在の最良解を交叉させる SA(SA/AX) を提案した。提案手法を代表的な組合せ最適化問題である TSP に適用した結果、通常の SA に比べ良好な結果を示し、過去の探索履歴を利用することの意義、また、組合せ最適化問題において SA に交叉を適用することの有効性が示された。

## 6 今後の課題

提案手法では交叉に EXX 以外の交叉を用いていない。そのため、他の交叉法での提案手法の有効性を検証する必要がある。また、重要温度での一定温度探索を行っているため、クーリングを用いた探索との比較検討や、TSP 以外の組合せ最適化問題(ジョブショップスケジューリング問題、ナップサック問題、…etc) に対して提案手法の有効性を検証することが挙げられる。

## 参考文献

- 1) 小西健三, 屋鋪正. 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. 電子情報通信学会論文誌, Vol.J80-D-I No.2, pp.127-136. 1997.
- 2) 廣安知之, 三木光範, 小椋真貴, 岡本祐幸. 遺伝的交叉を用いた並列シミュレーテッドアニーリング. 情報処理学会論文誌: 数理モデルと応用, Vol.43, No.SIG7(TOM6), pp.70-79, 2002.
- 3) 前川, 玉置, 喜多, 西川. 遺伝的アルゴリズムによる巡回セールスマン問題の一解法, 計測自動車制御学会誌論文集, Vol.31, No.5, pp.598-605(1995) 同志社大学工学部知識工学科 卒業論文. 2000.
- 4) Tsplib. Technical report.  
<http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/comopt/software/TSPLIB95/>.