

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温度設定に関する考察

The applications of Temperature Parallel Simulated Annealing to the Traveling Salesman Problem and consideration about temperature establishment

窪田耕明 (知的システムデザイン研究室)

Koumei KUBOTA (Intelligent Systems Design Laboratory)

Abstract There are many kinds of parallel simulated annealings. In this time, I propose Temperature Parallel Simulated Annealing and I studied to apply Temperature Parallel Simulated Annealing to Traveling Salesman Problem and I considered about temperature establishment.

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング法 (Simulated Annealing 法: 以後 SA 法) は, 広範囲の組み合わせ最適化問題に適用可能な汎用アルゴリズムである。繰り返し法に属する多くのアルゴリズムが局所最適解にトラップされると言う問題点を抱えているのに対し, SA 法は改悪方向への状態遷移を確率的に認めることによって, 理論上は真の最適解に到達することが保証されている。しかしそのためには非現実的に長い計算時間が必要となる。また一方で, 温度とよばれる SA 法の振る舞いを決定する制御変数のスケジュールが問題に適していなければ, 解の品質に大きな影響を及ぼしてしまう。そこで本研究では, 並列処理によるスピードアップが得られやすく, 解の品質の劣化が少ない並列 SA 法の一つとして温度並列 SA 法 (Temperature Parallel SA 法: 以後 TPSA 法) を扱った。

TPSA 法は解交換の瞬間のみプロセッサ間通信を行うだけであるので「並列処理との親和性が高い」, また解が自分自身で温度の上げ下げを決定するので「温度スケジュールを自動化できる」という長所を持つ。

本論文では, 第2章で TPSA 法について簡単に説明した後, TPSA 法, 逐次 SA 法のアルゴリズムに巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem: 以後 TSP) を組み込んで TSP のベンチマーク集に適用して評価し, 第3章では, その結果に基づいて, より効率的な近傍の定義, 第4章で温度設定の変更について報告する。最後に第5章でまとめを行なう。

2 TPSA 法の TSP への適用

2.1 対象問題

TPSA 法のアルゴリズムを詳細に評価するためには, 以下のような条件を満足している問題を扱う必要があると考えた。

- 最適解が既知
- 比較すべきアルゴリズムの実装方法が明確かつ容易
- 連続設計変数を持つ最適化問題は様々な問題に適用可能な一般的な近傍は明らかにされていないので, 本研究を考察する際, 近傍の決定が困難

そこでこれらの条件を満足する問題として, TSP を対象問題とすることにした。

一様乱数で生成されたランダムデータでは, 理論的には与えられた領域に点が一樣に分布している。しかし実際の問題では偏りのあるものも多く存在しており, それらの問題に対しても比較評価を行なう必要がある。そこで TSP のベンチマーク集である TSPLIB¹ を利用することにした。

2.2 2-opt 近傍

TSP の近傍として, 最も古典的で基本的な近傍である 2-opt 近傍を用いた。

ここで 2-opt 近傍について説明する。今, ある巡回路 π の 2-opt 近傍 $\mathcal{N}_2(\pi)$ とは, π 上の 2 つの枝 $e_1 = (a, b), e_2 = (c, d)$ (但し, b, d は π 上で a, c 次の点) を, $e_3 = (a, c), e_4 = (b, d)$ に置き換え, bc 間 (あるいは da 間) の全ての点を逆順にした巡回路の集合である。(図 1)

¹TSPLIB

<http://www.iwr.uni-heidelberg.de/iwr/comopt/soft/TSPLIB95/TSPLIB.html>

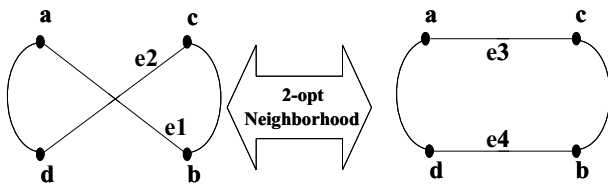


図 1: 2-opt 近傍

本論文における実装では 2opt 近傍を用い、巡回路長が減少していれば巡回路を更新するという手続きを繰り返す。この際、確率的に改悪方向への更新も受理するようにしている。

2.3 パラメータの決定

TPSA 法では、時間の関数としての温度スケジュールは自動的に決定されるが、最高温度、最低温度、温度数、温度の振り分け、解交換周期は指定する必要がある。以下に本研究で使用したパラメータの決定方法を示す。いずれも実験的に決定した。

- 最高温度：最大の改悪となる状態遷移が 50 % の確率で受理されるような温度。
- 最低温度：最小の改悪となる状態遷移がほとんど受理されないような温度。
- 温度数：32 温度。
- プロセッサへの温度の振り分け：最高温度と最低温度の間を、通常の SA 法で用いられる指数型アニーリングに従うように等比的に割り当てた。
- 解交換周期：都市数の 20 倍の遷移。
- 終了条件：温度数の 5 倍だけ解交換が行われた時点。

ここで終了条件についてのみ説明する『温度並列シミュレート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』で以下のようにいわれていた。

終了条件

TPSA 法では、異なる温度を担当する全てのプロセスそれぞれに初期解を与える。この際、最も高温の温度を担当するプロセスに与えられた初期解が、最終的な局所探索を行なう最低温度を担当するプロセスに到達するには、最低でも温度数だけの解交換が必要である。このことから TPSA 法の終了条件は温度数の定数倍であると考えられる。そして予備実験により、得られる巡回路長と実行時間の関係から温度数の 5 倍が妥当な値であるという結果を得た。

つまり本研究は 32 温度で実験を行なったので 160 回の解交換が行なわれた時点で終了するようにした。

表 1: TSPLIB の 6 データに対して 10 回の実行を行なった場合の最適解からの距離:TPSA 法

Data	Best	Ave.	Wor.
ulysses16	-0.12	-0.12	-0.12
ulysses22	-0.36	-0.36	-0.36
berlin52	0.00	0.00	0.00
gr96	-1.18	5.20	8.15
ch150	92.63	178.61	238.92
a280	68.92	110.02	174.33

表 2: TSPLIB の 6 データに対して 10 回の実行を行なった場合の最適解からの距離:逐次 SA 法

Data	Best	Ave.	Wor.
ulysses16	-0.12	-0.12	-0.12
ulysses22	-0.36	-0.36	-0.36
berlin52	0.00	0.00	0.00
gr96	-1.42	3.14	7.79
ch150	24.26	76.51	139.78
280	-27.04	51.16	104.15

2.4 実験結果

TSPLIB の中から最適解既知の問題を 6 個選び出し、前述した方法で決定したパラメータで作成した TPSA 法を適用させた。結果を表 1 に示す。なお、実験結果は各データに対して 10 回の実行を行なった場合の最良値 (Best)、平均値 (Ave.)、最悪値 (Wor.) の最適解からの距離である。

ここで逐次の SA 法でも同様に比較して性能を評価してみたところ表 2 のようになった。

3 近傍構造

前述した TPSA 法および逐次 SA 法のアルゴリズムでは、2 つの町をランダムに選んで前述の 2-opt 近傍を用いて、順路を組み換えていく方法を採用している。この方法だと、任意の点 a を選択すると点 b は一意に決定されるが、点 c は点 a, b を除いた残りの全ての町が候補となり、探索空間が膨大なものになる。

そこで、効率よく点 c を決定するために、近傍を定義することを考えた。まず任意の点 a を選択し、点 b が一意に決定される。ここで点 c の候補集合を、点 a を中心とし a, b の距離を半径 $r(a, b)$ とした円内に存在する点 (但し、a, b は除く) にしぼることにした。

これは巡回路長が短くなるような 2-opt 近傍に遷移するためには、次式

$$r(a, b) + r(c, d) > r(a, c) + r(b, d) \quad (1)$$

表 3: TSPLIB の 6 データに対して 10 回の実行を行なった場合の最適解からの距離:TPSA 法 (近傍を用いたもの)

Data	Best	Ave.	Wor.
ulysses16	-0.12	-0.12	-0.12
ulysses22	-0.36	-0.36	-0.36
berlin52	0.00	0.00	0.00
gr96	1.66	8.21	15.35
ch150	52.28	45.98	170.56
a280	58.59	87.77	144.71

表 4: TSPLIB の 6 データに対して 10 回の実行を行なった場合の最適解からの距離:逐次 SA 法 (近傍を用いたもの)

Data	Best	Ave.	Wor.
ulysses16	-0.12	-0.12	-0.12
ulysses22	-0.36	-0.36	-0.36
berlin52	0.00	0.00	0.00
gr96	-1.42	2.46	9.25
ch150	-36.39	35.01	50.42
a280	43.51	64.01	110.06

が成立する必要がある, そのためには次式

$$r(a, b) > r(a, c) \text{ または } r(c, d) > r(b, d) \quad (2)$$

の少なくとも一方が成立する必要があるという事実に基づいている. 本研究の実装では式 (2) の前半の不等式に当てはまる点を, 点 c の候補として探索していることになる.

このように定義した近傍のアルゴリズムを組み込んだ TPSA 法, 逐次 SA 法を先に使用した 6 個の問題に適用した結果を以下に示す. (TPSA 法は表 3, 逐次 SA 法は表 4)

4 温度設定の変更

TPSA 法の巡回路長 (評価関数値) の履歴 (図 2) を見て, 低温プロセスに解が収束し始め, 高温プロセスが明らかに無駄な計算をしている場合, それらを低温プロセスにまわして, 低温プロセスの計算時間を増やすことで効率向上につながるのではないかと考えた.

本研究では今回, 3 つの方法を考えた.

1. 全体の試行回数の 10 分の 8 だけ試行がおわった段階と, 10 分の 9 だけ試行がおわった段階で, 全体の温度を最低温度に近づけるように急激に下げる. 温度を下げたとき各温度は等比にはなっていない.

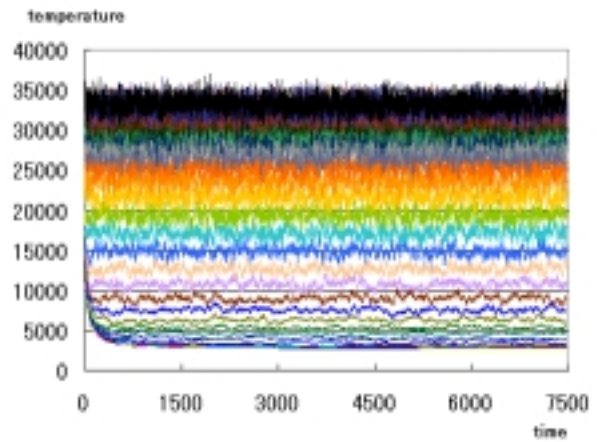


図 2: 巡回路長の履歴

表 5: TSPLIB の 6 データに対して 10 回の実行を行なった場合の最適解からの距離:TPSA 法 (温度設定変更-1)

Data	Best	Ave.	Wor.
ulysses16	-0.12	-0.12	-0.12
ulysses22	-0.36	-0.36	-0.36
berlin52	0.00	0.00	0.00
gr96	1.01	5.11	10.92
ch150	27.99	97.53	151.17
a280	-19.27	80.11	132.86

2. 全体の試行回数の 10 分の 1 だけ処理が終わるごとに温度を下げて, 全体として徐々に温度が下がっていくようにする. 温度を下げた時各温度は等比にはなっていない.
3. 初めに決定する最高温度から 0.9 ずつ等比によって温度を振り分けていき (このときの 32 温度の中で一番低い温度は最低温度とは異なる), 全体の試行回数の 10 分の 1 だけ処理が終わるごとに 32 温度の中で一番低い温度を最低温度に近づけるように下げ, その温度から等比率 0.9 で等比的に残りのプロセスに温度を振り分けて, 全体として徐々に温度が下がっていくようにする.

このように定義した温度設定のアルゴリズムを組み込んだ TPSA 法を, 先に使用した 6 個の問題に適用した結果を以下に示す. (温度設定変更-1 は表 3, 温度設定変更-2 は表 4, 温度設定変更-3 は表 5)

また巡回路長の履歴も示す. (温度設定変更-1 は図 3, 温度設定変更-2 は図 4, 温度設定変更-3 は図 5)

しかしこれら操作は, 本来 TPSA 法の利点であった温度スケジュールの自動化を失うことになる. つまり, いつ, どの程度, どの温度までといった判断が必要となるのである.

表 6: TSPLIB の 6 データに対して 10 回の実行を行なった場合の最適解からの距離:TPSA 法 (温度設定変更-2)

Data	Best	Ave.	Wor.
ulysses16	-0.12	-0.12	-0.12
ulysses22	-0.36	-0.36	-0.36
berlin52	0.00	0.00	0.00
gr96	14.36	25.57	37.44
ch150	50.01	91.28	177.74
a280	14.64	77.69	181.99

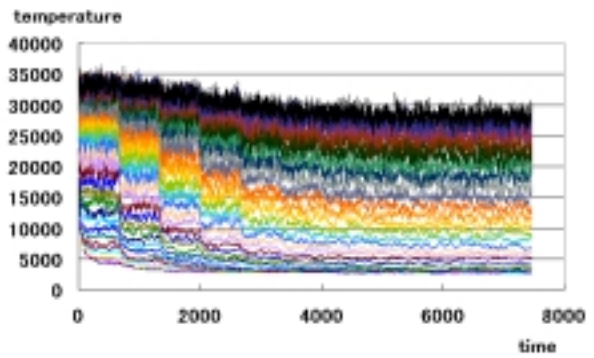


図 5: 巡回路長の履歴:温度設定変更-3

表 7: TSPLIB の 6 データに対して 10 回の実行を行なった場合の最適解からの距離:TPSA 法 (温度設定変更-3)

Data	Best	Ave.	Wor.
ulysses16	-0.12	-0.12	-0.12
ulysses22	-0.36	-0.36	-0.36
berlin52	0.00	0.00	0.00
gr96	3.36	11.25	19.48
ch150	40.18	110.91	188.33
a280	-5.96	123.12	166.24

5 結論

本論文では、TPSA 法、逐次 SA 法のアルゴリズムに TSP を組み込んで TSP のベンチマーク集に適用して評価し、その結果に基づいて、より効率的な近傍の定義、温度設定の変更について報告した。

近傍の定義に関して、逐次 SA 法ではあまりいい結果が出なかったが、TPSA 法ではその有効性が顕著であった。理由としては、逐次 SA 法では近傍は徐々に小さくなっていくだけだが、TPSA 法では温度の上昇と共に近傍も大きくなっていくことが許されるからというのが考えられる。解交換回数や、巡回路長によって自動的に変化していく適応的な近傍が望まれるところだが、今後の課題とする。

また、温度設定の変更に関して、最後に急激に温度を下げるアルゴリズムのものと、等比的に温度を下げていくアルゴリズムのものは、通常の TPSA 法よりもいい結果が出ている。この理由としては、2 つとも全体を通して、プロセスの温度どうしが極端に離れることなくアニーリングされたからというのが考えられる。このアルゴリズムも、解交換回数や、巡回路長によって自動的に変化していく適応的なものが望まれるが、今後の課題とする。

本論文の全体を通して逐次 SA 法の方が TPSA 法よりもいい解が得られるという結果になった。この原因としてはいろいろ考えられるが、その一つとして、ある解がその温度で行なう回数が少ないからというのが挙げられる。つまり最適解に辿り着くときに大事となる温度付近での回数が少ないということである。また他の一つとして、TPSA 法のプロセス間の温度差が大きすぎて解交換があまり行なわれないからというのも挙げられる。

そこで今後の研究は、大事となる温度を調査し、その付近を多くのプロセスで処理する TPSA 法のアルゴリズムの考案と、適応的にプロセス間の幅を調節していくアルゴリズムの考案を課題として取り組んでいくつもりである。

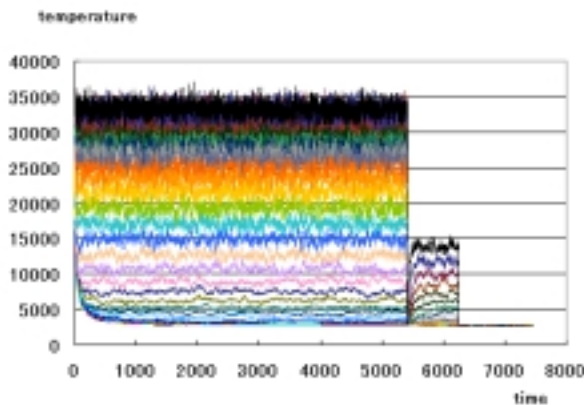


図 3: 巡回路長の履歴：温度設定変更-1

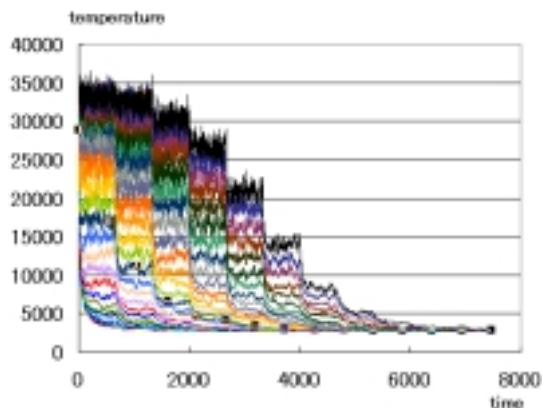


図 4: 巡回路長の履歴:温度設定変更-2

参考文献

- [1] 小西健三 瀧和男 木村宏一 『温度並列シミュレーション・アニーリング法とその評価』(情報処理学会論文誌 , 1995)
- [2] 小西健三 屋鋪正史 瀧和男 『温度並列シミュレーション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)
- [3] 木村宏一 瀧和男 『時間的一様な並列アニーリングアルゴリズム』(信学技報 , 1990)
- [4] J.L.Bentley, 『K-d trees for semidynamic point sets.』(Sixth Annual ACM Symp , 1990)
- [5] G.Reinelt, 『The Traveling Salesman-Computational Solution for TSP Applications』(Lecture Notes in Computer Science 840 , 1994)