

# 進化的シミュレーテッドテンパリング： 新しいヒューリスティックサーチ

三木 光範<sup>†</sup> , 廣安 知之<sup>†</sup> , 吉田 武史<sup>††</sup> , 窪田 耕明<sup>††</sup> , 小野 景子<sup>††</sup>

<sup>†</sup> 同志社大学工学部    <sup>††</sup> 同志社大学大学院

〒 610-0321 京都府京田辺市多々羅都谷 1-3

Phone: 0774-65-6930

E-mail: mmiki@mail.doshisha.ac.jp

シミュレーテッドアニーリングは組み合わせ最適化問題の解法として、よく用いられる。この方法の性能向上のために、高温から急冷し、また上昇させる焼き戻しが有効である。この方法をシミュレーテッドテンパリングと呼ぶ。この時、良好な焼き戻し温度がある範囲を持つ場合がある。このような場合には、進化的アプローチを用い複数の焼き戻し温度で探索を行う方法が、極めて良好な結果をもたらす。本論文では、新しいヒューリスティックサーチとしてこれらの手法を提案し、組み合わせ最適化問題を対象に提案手法の有効性を議論する。

キーワード 最適化, シミュレーテッドアニーリング, 進化的手法, 遺伝的アルゴリズム, シミュレーテッドテンパリング, 巡回セールスマン問題

## Evolutionary Simulated Tempering: A New Heuristic Search

Mitsunori MIKI<sup>†</sup> Tomoyuki HIROYASU<sup>†</sup> Takeshi YOSHIDA<sup>††</sup> Koumei KUBOTA<sup>††</sup> Keiko ONO<sup>††</sup>

<sup>†</sup> Knowledge Engineering Dept., Doshisha University

<sup>††</sup> Graduate School of Engineering, Doshisha University

1-3 Miyakodani, Tatara, Kyo-tanabe, Kyoto, 610-0321 Japan

Phone: +81-774-65-6930

E-mail: mmiki@mail.doshisha.ac.jp

This paper proposes a new heuristic search method for discrete optimization problems. The simulated annealing is one of effective optimization methods, but a huge amount of computation is required to obtain good solutions. This is due to the excessive high starting temperature, but it is very difficult to determine it. The proposed method firstly uses a very high temperature and rapidly the temperature is cooled down to a very low temperature, and the temperature is increased to a certain value, which is called simulated tempering. The effective tempering temperatures are sought by using multiple search processes and genetic algorithms. From the experiments on traveling salesman problems, the method is found to be very effective and useful.

Keyword Optimization, Simulated Annealing, Evolutionary Method, Genetic Algorithms, Simulated Tempering, Travelling Salesman Problem

## 1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing : SA)<sup>1)</sup> は、広範囲の組み合わせ最適化問題に有効な汎用近似解法である。従来の非線形最適化手法では局所最適解に陥る傾向があるが、SA では確率的に改悪方向の状態遷移を認めることにより局所解から脱出可能になる。また、次状態が現在の状態より一意的に定義される状態遷移 (マルコフ連鎖) をたどることにより、理論上、最適解に到達する事が保証されている<sup>2)</sup>。しかしながら、SA で得られる解は「温度」と呼ばれる制御パラメータに大きく依存しており、任意の問題に対する一般的な温度スケジュールは明らかになっていない。

この温度スケジュールを原理的に不要にしたのが温度並列 SA (TPSA)<sup>3)</sup> で、計算時間および解の精度の点で逐次 SA より優れていることがわかっている。しかし、温度スケジュールは自動化されるが、最高温度や最低温度などは最初に決定しなければならず、パラメータの初期設定が重要になる。

一方、これまでの研究において、特定範囲の温度でのアニーリングによって効率の良い探索が行なえることが明らかになっている<sup>4)</sup>。しかし、その温度は問題に特化したもので、事前に膨大な予備実験が必要になる。

本研究ではまず、巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem : TSP) において、特定範囲の温度でのアニーリングが効率の良い探索をもたらすかどうかを確認し、その温度と探索中に生じる改悪エネルギーとの関係を実験により検証する。また、新しいヒューリスティックサーチとして、この重要な温度を自動的に求め、その温度で探索を行うシミュレーテッドテンパリング (Simulated Tempering : ST) を提案する。さらに、この手法に GA を組み込み、特定範囲の温度を進化的手法により見つける進化的 ST を提案する。そののち、提案した手法を代表的な離散問題である TSP に適用し、従来の逐次 SA と比較することでその有効性を検証する。

## 2 SA における従来の温度スケジュール

SA は組み合わせ最適化問題を解く汎用近似解法であるが、温度スケジュールを決定する最高温度、最低温度、クーリング周期および冷却率の 4 個のパラメータを設定する必要がある。具体的な温度パラメータの設定方法として次のようなものが挙げられる<sup>5)</sup>。

- クーリング周期

対象問題のサイズに依存し、近傍の大きさに比例した大きさを設定する。

- 最高温度

解生成の受理率が一定数以上 (例えば 0.8 以上) となる温度や、最大の改悪となる状態遷移が一定の確率で受理される温度を予備的な実験で求める。

- 最低温度

最小の改悪となる状態遷移がクーリング周期で一回は受理されるような温度、もしくは受理率が一定数以下になる温度。

- 冷却率

指数型アニーリング  $T_{k+1} = \gamma T_k$  において  $0.5 \leq \gamma \leq 1.0$  が望ましい。

SA における温度スケジュールは解の性能に大きく依存し、良好な解を得るためのパラメータチューニングは容易ではない。

この温度スケジュールの自動化を可能にしたアルゴリズムに温度並列 SA がある。次節では温度並列 SA について説明する。

## 3 温度並列 SA (Temperature Parallel Simulated Annealing : TPSA)

温度並列 SA<sup>3)</sup> は SA の並列化手法の一つである。TPSA は複数のプロセッサが一定温度でアニーリングを行い、プロセッサ間で解交換を行う。TPSA には、以下に示すような特徴がある。

- プロセッサ間で解の確率的交換を行うことにより温度スケジュールを自動化することができる。
- 時間的に一様であるので、任意の時点で終了することができ、継続すれば解の改善を続けることができる。
- 解の品質を劣化させることなく、温度数までの並列化が可能である。

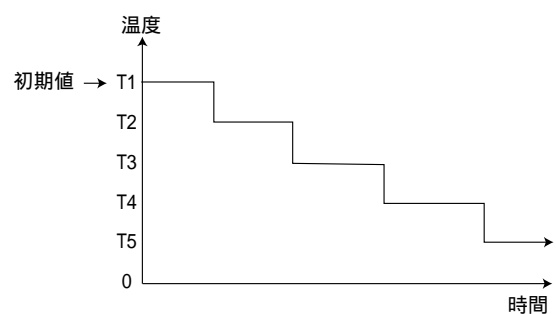


図 1: 逐次 SA の温度スケジュール

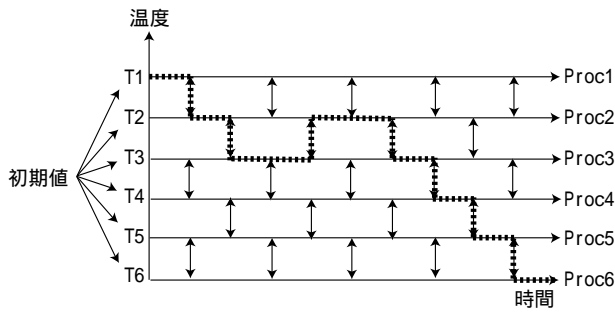


図 2: 温度並列 SA の温度スケジュール

図 1 および 2 は、逐次 SA および温度並列 SA の温度スケジュールの概念図である。逐次 SA では、経験的に決めた温度スケジュールで温度を単調減少させるのに対して、温度並列 SA では各プロセッサに異なる温度を与え一定温度でアニーリングを行い、異なる温度間で確率的に解交換を行う。逐次 SA でクーリングすることは、温度並列 SA では異なるプロセッサ間で解を交換することに相当する。つまり、プロセッサ間で解を確率的に交換することにより温度スケジュールを不要にしている。

しかしながら、すべてのパラメータチューニングが不要になるのではなく、最高温度、最低温度、各プロセスへの温度の割り当ておよび解交換周期は設定しなければならない。また、従来の最高温度、最低温度の決定方法<sup>6)</sup>では、一部のプロセッサに良好な解が集中し、特に高温部のプロセッサでの解探索が TPSA の性能に与える影響は小さい。そこで本研究では、各温度が解に与える影響を調べる。

#### 4 TPSA における重要温度

重要温度でのアニーリングが効率の良い探索を行なえているかどうかを TSP を用いて確認する。本研究では、TSP のベンチマーク集である TSPLIB を用い、対象問題として表 1 に示す 5 つの TSP を取り上げた。そしてそれらの問題に対して、図 3 のような解交換を行わない TPSA を適用することで、各温度での解の精度を比較した。

図 4 にその中の一つである eil51 の結果を示す。また eil51 に用いたパラメータを表 2 に示す。各プロセスの温度は、最高温度から最低温度までを等比的に割り当てた。図 4 では横軸に各プロセスの温度、縦軸に経路長を示している。なお実験結果は 20 回試行した平均値を示す。図 4 より、eil51 では 2 度付近で最も最適解に近い解を得られた。

今回取り上げた 5 つの問題において、上のようにして求めた重要温度を表 3 に示す。

表 3 より、どの問題にも重要温度というものが存

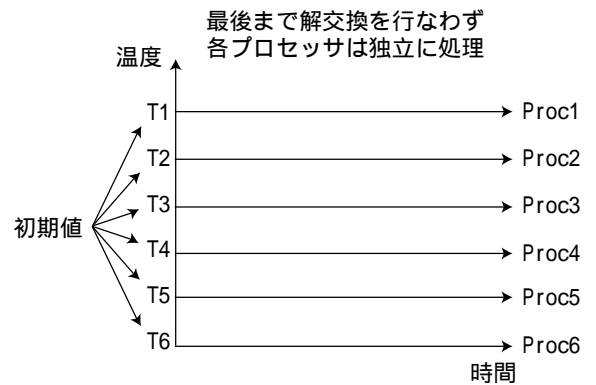


図 3: 解交換を行わない TPSA

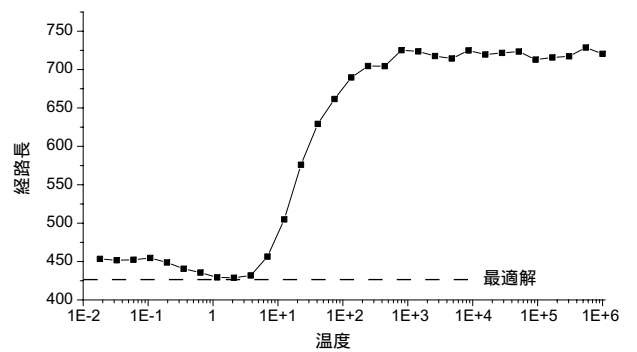


図 4: 各温度での解の精度の違い

在するが、大きさや重要温度範囲は各問題に固有なものであることがわかる。さらに、重要温度の傾向として、最適解が大きくなるにつれ重要温度も高くなるが、その割合は都市数によって異なるということもわかる。

ここで、SA の受理判定基準について考える。通常、SA における摂動の受理判定は式 (1) に示す Metropolis 基準を用いる。式 (1) より SA における温度は、改悪エネルギーと密接な関係があることがわかる。

$$A(E, E', T) = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta E < 0 \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

TSP において、重要温度があるということは、問題ごとに固有な受理すべき改悪エネルギー、つまり、重要な改悪が存在する可能性が高い。次節では、温度ではなく改悪の大きさによる受理基準を用いることで、改悪エネルギーと解の精度の関係について検証する。

#### 5 重要な改悪エネルギー

改悪と解の精度の関係を、異なる受理基準を用いたアルゴリズムを用いて検証する。

表 1: 対象問題

問題	都市数	最適解
eil51	51	426
kroA100	100	21282
pr152	152	73682
bier127	127	118282
pr76	76	108159

表 3: 対象問題と重要温度の関係

問題	重要温度
eil51	1.5 ~ 2.8
kroA100	40 ~ 70
pr152	120 ~ 200
bier127	90 ~ 140
pr76	250 ~ 300

表 2: eil51 に用いたパラメータ

アニーリング数	163200
温度数	32
最高温度	1.0E + 06
最低温度	1.0E - 02

1. 指定する範囲の改悪のみ受理する (Method-1)  
改悪の受理判定として式 (2) を用いる .

$$A(E, E') = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta E_0 \leq \Delta E < \Delta E_0 + h \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

この基準では  $\Delta E$  が幅  $h$  に含まれるとき 100% の確率で受理する . つまり ,  $\Delta E_0 = 2, h = 2$  の場合 , 2 ~ 4 の改悪が生じた時のみ必ず受理するが , それ以外の改悪は受理しないということである .

2. 指定する改悪以下を受理する (Method-2)  
改悪の受理判定として式 (3) を用いる .

$$A(E, E') = \begin{cases} 1 & \text{if } 0 < \Delta E \leq \Delta E_0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

この基準では  $\Delta E_0$  以下の改悪を 100% の確率で受理する .

実験では Method-1 の  $h$  を 2 と 0.2 に設定し , 各アルゴリズムで  $\Delta E_0$  を 0 から 20 まで変化させた . 結果を図 5 に示す . 図 5 の横軸は  $\Delta E_0$  の大きさ , 縦軸は得た解の経路長である . なお実験結果は 20 回試行した平均値を示す .

図 5 より , Method-1 では ,  $h = 0.2$  より  $h = 2$  の方が解の精度が良いことがわかる . この理由として ,  $h = 0.2$  では受理する改悪の幅が狭すぎて , 改悪をほ

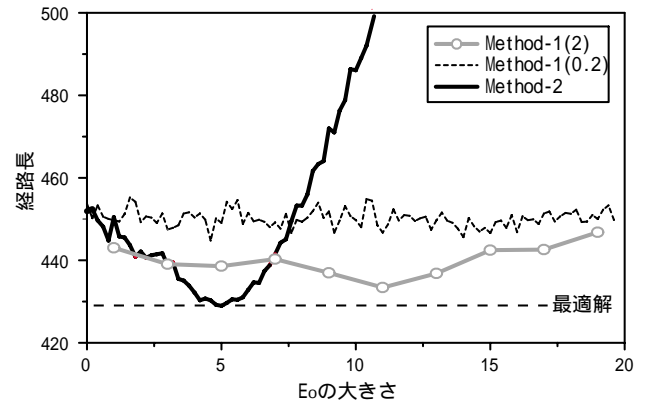


図 5: Method-1 および Method-2 による実験結果

んど受理せず局所解に収束するが ,  $h=2$  では受理する改悪の幅が広くなり , ある程度の改悪を受理するようになるということが考えられる . しかし , いずれにしても Method-1 では局所解に収束していることがわかる .

一方 , Method-2 では  $\Delta E_0=5$  付近で最適解が得られていることがわかる . また , 受理する改悪が 5 より小さいと局所解に収束し , 5 より大きいと解が収束せず悪くなることもわかる . つまり , ある大きさまでの改悪以下を受理することが非常に重要ということができ , eil51 では 5 以下の改悪が重要な改悪と考えられる .

このことは , ある適切なレベルまでの改悪であれば , 100% の確率で受理しても最適解が得られるということで , この原理は SA における新しい方法を示唆しているといえる .

## 6 受理確率と改悪

第 5 節において , 重要な改悪以下を 100% の確率で受理することで良好な精度を示すことがわかった . しかし , 通常の受理判定では式 (1) に示す Metropolis 基準を用いているため , 確率的に改悪を受理する . そこで Method-2 における改悪の受理確率を変化させて実験を行う .

## 6.1 受理確率による比較

Method-2における改悪の受理確率を100%, 50%, 10%に設定して解の精度を比較する．実験結果を図6に示す．図6の横軸は $\Delta E_0$ の大きさ, 縦軸は経路長である．なお実験結果は20回試行した平均値を示す．

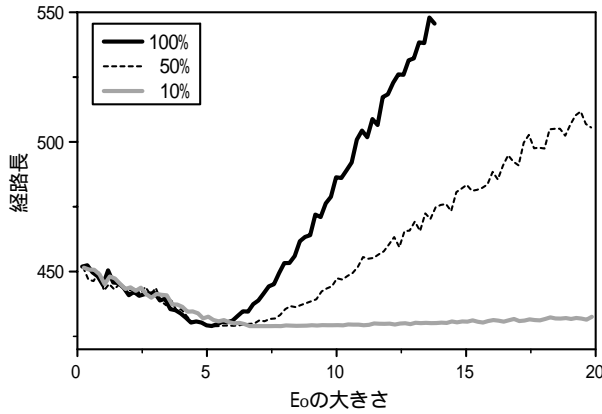


図 6: 受理確率が異なる Method-2

図6より, どの受理確率においても,  $\Delta E_0$  が重要な改悪の上限 (約 5.0) に近づくとともに, 解の精度が向上することがわかる．受理確率が100%の場合,  $\Delta E_0$  が重要な改悪の上限に達すると最適解を得るが,  $\Delta E_0$  がその値より大きくなると解の精度が悪くなることわかる．一方, 受理確率が100%より低い場合には, 大きい改悪をほとんど受理しなくなるので, 最適解を得る  $\Delta E_0$  の上限が増加し, 最適解を得る  $\Delta E_0$  の範囲が広がることがわかる．

ここで, 重要温度での受理確率を図7に示す．図7の縦軸は受理確率, 横軸は改悪の大きさ ( $E$ ) である．図7より, 重要温度とは, 先の実験で得られた重要な改悪の部分は高確率で受理し, 大きい改悪に関してはほとんど受理しないという極めて優れたメカニズムを持つ温度ということがわかった．

TSPにおける重要温度の存在および重要温度のメカニズムは確認できたが, この温度は各問題に固有なもので, 事前に膨大な予備実験が必要である．次節では, 重要温度を自動的に求め, その温度で探索を行なうシミュレーテッドテンパリングを提案する．

## 7 シミュレーテッドテンパリング (Simulated Tempering : ST)

図4より, TSPにおける重要温度の存在を確認し, 一定温度でのアニーリングの有効性を示した．また, 同図より TSPにおける局所解が最適解と非常に近い値であることもわかった．これらのことから, 重要温度に到達するまでの過程として, 必要以上に高い温

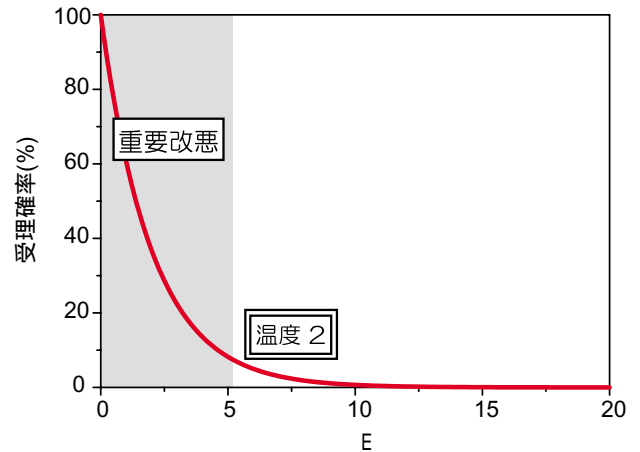


図 7: 重要温度での受理確率

度におけるアニーリングは無駄であり, 一度急激に温度を下げ, 局所解に収束させてから温度を少し上げるほうが効率的であると考えた．このようにして生まれたのが, 本論文で提案するシミュレーテッドテンパリング (Simulated Tempering : ST) である．

STとは, 焼き戻し (Tempering) を模倣した新しいヒューリスティックサーチである．基本アルゴリズムはSAとほぼ同じであるが, 処理の前半に極低温でのアニーリング (焼き入れ) で局所解に収束させるため, 非常に早い段階で最適解に近づくことが大きな特徴である．また, そこから一定の割合で温度を上げ (焼き戻し), 評価基準を用いて自動的に重要温度を求めるのも大きな特徴である．

### 7.1 STのアルゴリズム

STのアルゴリズムを図8に示す．

STのアルゴリズムにおいて, 生成, 受理, 摂動については従来のSAと同じであるが, 大きな特徴として以下の点が挙げられる．

- 極低温での探索

初期解を生成後, 一定の間, 改善のみを認め, 局所探索と等価の探索を行う．この操作により, 非常に早い段階で局所解に到達する．局所解に到達したら, その局所解を新たな初期解として, 従来のSAで用いていた最低温度を用いて解探索を行ない, 一定の割合で温度を上げていく．

- 評価値を用いた重要温度の自動探索

極低温での処理によって求められた局所解の値を評価基準とし, アニーリング中にその評価基準を下回る値の受理に対して, 相応の評価値を加算する．頻繁に評価基準を下回る重要温度付近の評価値は高くなる．各温度で評価値を計算

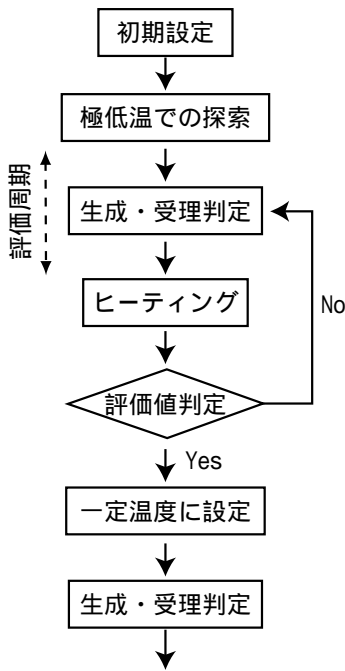


図 8: ST のアルゴリズム

すると、重要温度を挟んで図 9 のようになると考えられる。図 9 のような評価値の山が得られたら、その時点で一度処理を中断し、その山の中で評価値が最も高い温度を重要温度として、その後は重要温度で処理を続ける。

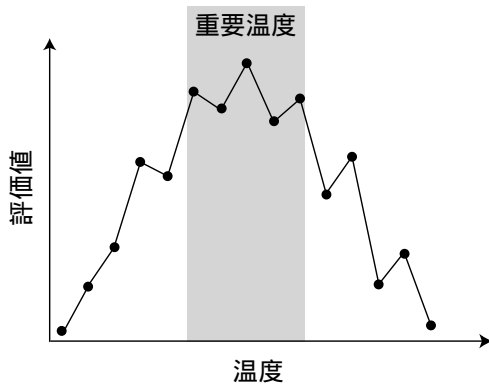


図 9: 各温度における評価値

## 7.2 実験結果

図 10 に逐次 SA と逐次 ST の解探索能力の比較を行った実験結果を示す。本実験では最適解が既知の 5 つの対象問題に逐次 SA と逐次 ST を適用し、最適解から誤差 1% 以内の解を発見したときのアニーリングステップ数を比較した。図 10 の横軸は問題名、縦軸にはアニーリングステップ数を示す。なお実験結果は 20 回試行した平均値を示す。また図 11 に各

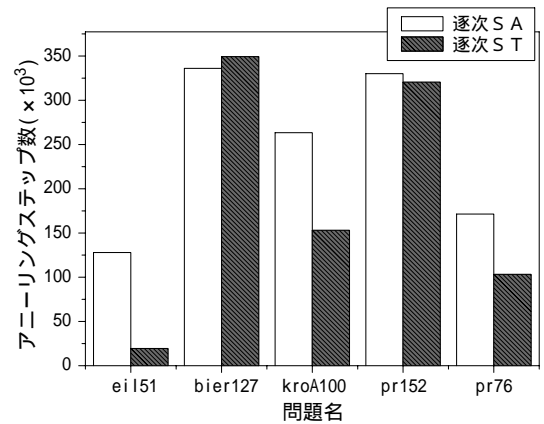


図 10: ST と逐次 SA の性能評価

問題における重要温度と逐次 ST を 20 試行行ったときに設定した一定温度の分布を示す。図 11 では横軸に問題名、縦軸に温度を示す。図 10、図 11 より、

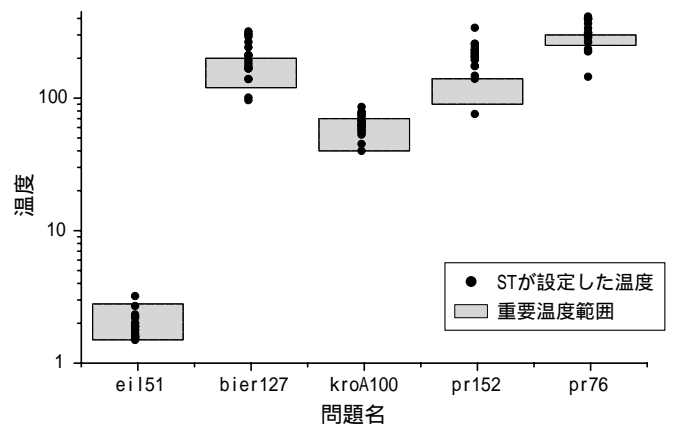


図 11: 重要温度と逐次 ST における設定温度の分布

重要温度を選択できた問題ほど、早い段階で良好な解を得ることがわかる。一方、bier127 や pr152 では選択した温度が重要温度範囲に含まれないことが多く、良好な解を発見することが困難である。これは評価値の推移と各問題における最適解の形状に依存していると考えられる。

まず評価値についてであるが、図 12 に bier127 に逐次 ST を適用したときの評価値の推移を示す。また表 4 に各試行での実験結果を示す。

図 12、表 4 より、局所探索で生成される局所解が良好な場合には評価値が全体的に低下し、逆に局所解が悪い場合には評価値が増大する。つまり、局所解にばらつきが生じる問題では、局所解の精度が評価値の推移に影響し、その結果、重要温度範囲内に温度設定ができないという問題点が生じる。

また問題の形によって、解探索中に生じる改悪工

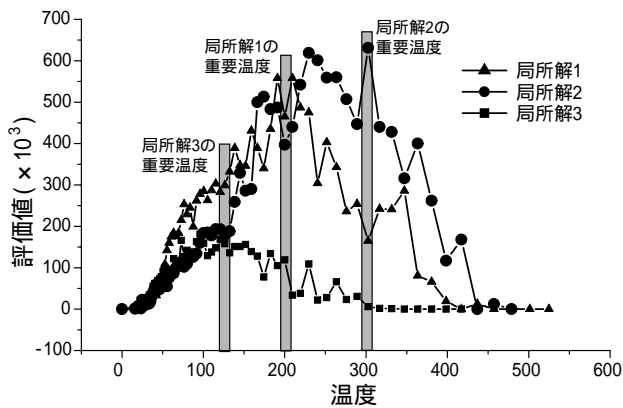


図 12: 各温度における評価値

表 4: 図 12 における実験結果

	局所解 1	局所解 2	局所解 3
局所解の経路長	129198	131272	124908
逐次 ST の経路長	119162	120271	119845
設定した温度	191.091	302.488	95.949

エネルギーの大きさが大きく変化する．図 13 に eil51 と bier127 の最適解を示す．

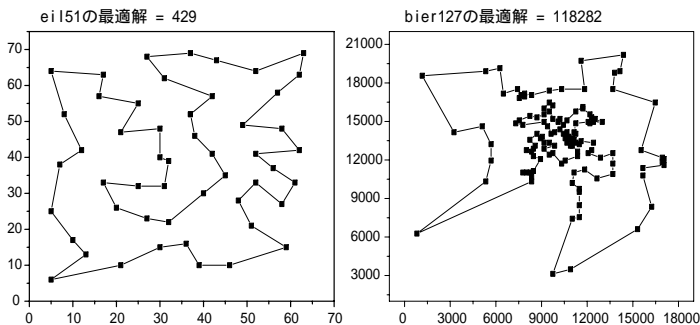


図 13: eil51 と bier127 の最適解

eil51 が含む経路長は、ほぼ同じであるのに対して、bier127 では経路長にばらつきが生じている．そのような問題においては、解探索中に生じる改悪エネルギーに大小が存在するため、逐次 ST において重要温度範囲内の一つの温度に設定したとしても、良好な結果を得ることが困難になると考えられる．

そこで温度に多様性を持たせた ST の温度並列モデルとして、並列遺伝的シミュレーテッドテンパリングを提案する．

## 8 並列遺伝的シミュレーテッドテンパリング (Parallel Genetic ST:PGST)

### 8.1 PGST のアルゴリズム

図 14 は PGST の概念図で、図 15 は PGST のアルゴリズムである．PGST では、ある一定期間アニーリングを行った後、各プロセッサの評価値を元に GA の選択・交叉処理を施し、次状態の温度を決定する．この処理により、評価値の高い温度が残り、評価値の低い温度は淘汰され、最終的に重要温度付近でのアニーリングを行なうことになる．

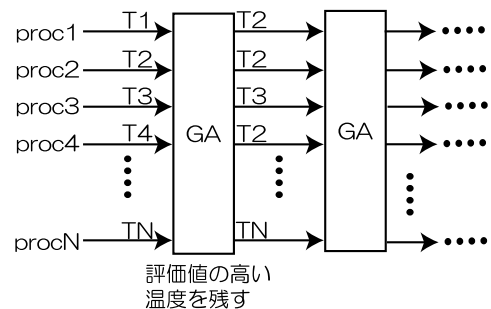


図 14: PGST

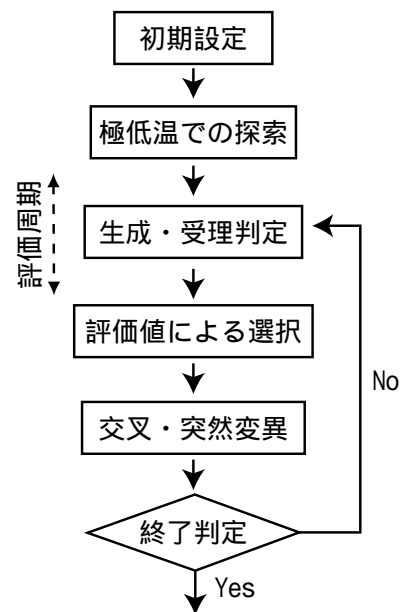


図 15: PGST のアルゴリズム

PGST は以下のような優れた性質を持つ．

- 温度スケジュールの自動化

遺伝的操作により、効率のよい探索を行なう温度だけが生き残り、無駄な探索を行なう温度は淘汰される．

● 温度の多様性

重要温度にはある程度の幅があり、一つの温度だけでアニーリングを行なうと解の精度に偏りができる可能性がある。PGSTでは、遺伝的操作により温度に多様性があり、重要温度の幅に対しても対応している。

8.2 実験結果

eil51 温度の履歴を図 16 に示す。図 16 の横軸はアニーリングステップ数、縦軸は温度を示している。表 3 より eil51 での重要温度は 2 度付近である。PGST では各プロセスにランダムに初期温度を割り当てるが、評価値の計算により重要温度に収束していることが分かる。しかし、ST とは異なり PGST では突然変異や交叉により重要温度でない温度も生成するため、一つの温度に収束せずある程度の温度の幅を保ちアニーリングが行われている。

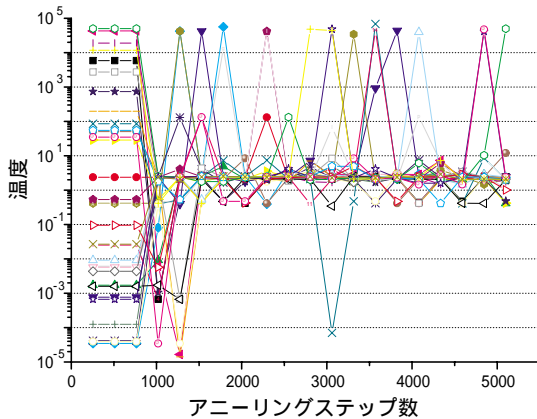


図 16: PGST の温度履歴

5つの対象問題でPGSTと逐次STの性能評価したものが図 17 である。横軸は対象問題、縦軸は最適解との誤差が1%以内になるのに必要なアニーリングステップ数を示している。なお実験結果は20回試行した平均値を示す。図 17 より、どの対象問題においても、逐次SAでは最適解との誤差が1%以内になるのに十分なアニーリングステップ数が必要であるのに対し、PGSTは解探索初期で最適解との誤差が1%以内になっていることが分かる。

9 結論

本論文では、TPSAにおける重要温度の存在を確認し、それが各問題に固有な温度であるため、自動的に重要温度を見つけるシミュレーテッドテンパリングを提案した。さらに、STに遺伝的操作を組み込んだ並列遺伝的STを提案し、それらと従来の逐次SAと比較することでその有効性を確認した。な

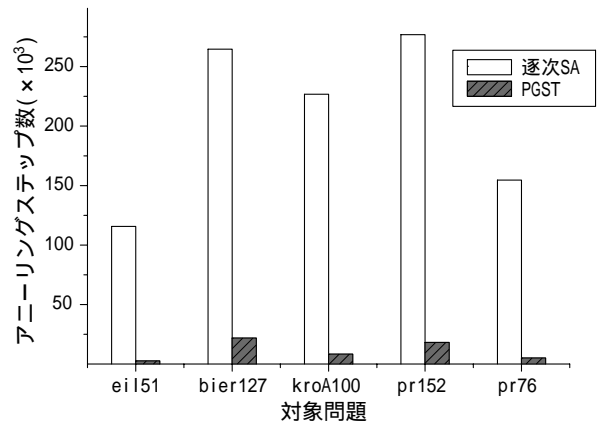


図 17: PGST と逐次 SA の性能評価

お本論文では対象問題として TSP を取り上げたが、今後は他の組合せ最適化問題に適用し、有効性を検証することが課題である。

謝辞

本研究は、文部科学省科学研究費補助金研究、および文部科学省学術フロンティア推進事業に関わる研究の一部として実施された。ここに記し謝意を表す。

参考文献

- 1) Kirkpatrick, S., Gelett Jr. C. D., and Vecchi, M. P.: Optimization by Simulated Annealing, Science, Vol. 220, No. 4598, pp. 671-680 (1983).
- 2) EmileAarts, Jan Korst, 『Simulated Annealing and Boltzmann Machines』,(JOHN WILEY & SONS, 1989)
- 3) 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, Vol.36, No.4, pp.797-807 (1995)
- 4) David T.Connolly. An improved annealing scheme for the QAP. European Journal of Operational Research, 1990.
- 5) Aarts, E. and Korst, J.: Simulated Annealing and Boltzmann Machines, John Wiley & Sons (1989)
- 6) 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)
- 7) TSPLIB, <http://www.iwr.uniheidelberg.de/iwr/comopt/software/TSPLIB95>