

シミュレーテッドアニーリングにおける重要温度領域に関する考察 Consideration on the important temperature in simulated annealing

三木 光範[†]
Mitsunori Miki

廣安 知之[†]
Tomoyuki Hiroyasu

米澤 基[‡]
Motoi Yonezawa

1. はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA)[1] 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。SA は評価関数値の改善方向への推移を確率によって制御することにより局所解に陥りにくいという大きな利点を持つ。しかしながら、解探索の振る舞いを制御する温度スケジュールの設定が容易でないという欠点を有している [2]。この温度スケジュールについての研究は数多く行われ、多くの例より効果的な探索は温度スケジュールの途中で行われることが明らかになっている [3, 4]。さらに一定温度のみで探索を行うことにより良好な解が得られることも示されている [5, 6]。本研究ではこの一定温度の探索で良好な解が得られる温度領域を重要温度領域と呼ぶ。このような重要温度領域はこれまで 1 つの領域であることを前提に研究が行われてきた。しかしながら、重要温度領域のみの探索では良好な解が得られない問題も存在する。SA において良好な解探索を行うためにはこの重要な温度領域について考察する必要がある。

そこで本研究では、代表的な組合せ最適化問題である巡回セールスマン問題 (TSP) を対象として、意図的に重要温度領域が複数存在する問題を作成し、そのような問題について詳細な解析を行う。また、それにより組合せ最適化問題の特性を検証する。

2. TSP における重要温度領域

2.1 重要温度領域の確認

本研究では、クーリングを行わない一定温度の SA を TSP に適用し、重要温度領域について検証を行った。対象問題には 5 つの TSP (eil51, eil76, pr144, berlin52, st70)[7] を用いた。最高温度に 100000、最低温度に 0.001 という値を用い、最高温度から最低温度まで等比的に 32 分割し、各温度における解の精度を比較した。また終了条件は都市数 $\times$ 3200 回探索が行われた時点 [8] とした。eil51 における結果を図 1 に示す。図の横軸は探索を行った各温度、縦軸は得られた解の経路長を示す。右側の図は重要温度領域と考えられる温度付近を拡大したものである。なお、試行回数は 30 回とし、実験結果は各試行における最良解の平均値である。

図 1 より、eil51 において特定の温度範囲による一定温度 SA が良好な結果を示しており、重要温度領域が確認できる。また、その他の問題でも同様の結果が得られた。これらの結果から重要温度領域を決定する。本研究では Connolly による定義 [5] を用いた。複数の温度で実行した一定温度 SA の中で、最も良好な解を得た温度を重要温度とし、その解から誤差 1% 以内の解を得た温度

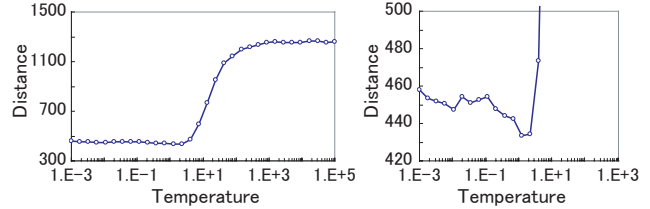


図 1: eil51 における各温度と経路長の関係

領域を重要温度領域と決定する。表 1 に各 TSP の重要温度および重要温度領域を示す。

表 1: 各 TSP における重要温度領域

問題名	重要温度	重要温度領域
eil51	1.5	1.0~2.4
eil76	1.2	0.9~1.5
pr144	80.0	15.6~92.8
berlin52	24.0	18.0~38.0
st70	2.3	1.1~2.7

表 1 より、重要温度の値や重要温度領域の範囲は問題に依存していることがわかる。

2.2 逐次 SA と重要温度のみで探索を行う SA の比較

本節では、重要温度のみの一定温度で探索を行う SA (以下単一温度 SA と示す。) と、一般的な高温から低温まで探索を行う逐次 SA の解探索能力について比較を行う。実験では前節の実験で用いた 5 種の TSP に逐次 SA を適用し、その結果得られた経路長と、単一温度 SA で得られた経路長とで精度の比較を行った。結果を図 2 に示す。図の横軸は問題名、縦軸は最適解と得られた経路長との相対誤差を示す。なお試行回数は 30 回とし、得られた経路長は各試行における最良解の平均値である。

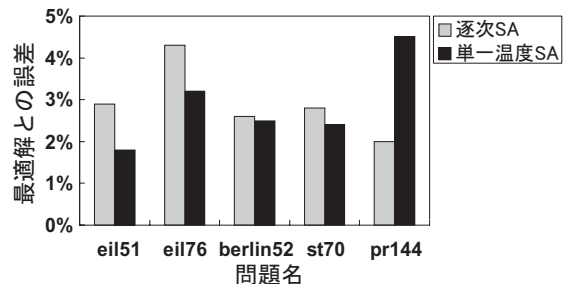


図 2: 逐次 SA と単一温度 SA の解精度の比較

図 2 より、単一温度 SA は、逐次 SA と同等、あるいは逐次 SA より良好な解が得られていることがわかる。しかしながら、pr144 のように単一温度のみの探索では良好な解が得られない問題が存在することもわかった。pr144 は都市配置に疎な部分と密な部分が混在する問題である。そのため、このような問題には複数の重要な温

[†]同志社大学工学部

[‡]同志社大学大学院

度が存在しており、重要温度のみの探索では良好な解を得ることができないと考えられる。

このことを検証するために、次章からは意図的に重要温度領域が複数存在する問題を作成し、それを詳細に解析することでこのような問題の特性を明らかにすることを試みる。

3. 重要温度領域が複数存在する問題

本章では意図的に重要温度領域が複数存在する問題の作成を試みる。重要温度領域が複数存在する問題を作成し、その問題を詳細に解析することで、組合せ最適化問題に SA を適用する際の温度パラメータ設定に関する指針が得られると考えられる。

3.1 問題の作成

TSP における重要温度領域は、問題の厳密解における平均経路長(最適解/都市数)に比例することが報告されている [9]。例えば、重要温度領域が 1.5 付近に存在する $eil51$ の場合、そのスケールを 1000 倍に拡大すると、重要温度領域は 1000 倍、すなわち 1500 付近となる。また、都市数を増加しても、平均経路長が変化しない問題を作成した場合、重要温度領域は変化せず 1.5 付近に存在することになる。したがって、平均経路長が大きく異なる問題を組合せることにより、それぞれの平均経路長に比例した温度に重要温度領域が存在する問題を作成できる。

そこで、図 3 のようにスケールの異なる $eil51$ を組合せた問題を 8 種類作成した。図 3 に示した問題は 1000 倍に拡大した $eil51$ の原点 (0,0) からユークリッド距離で最も近い都市が、 $eil51$ を 4 つ格子型に隣接させた問題で構成される問題である。なお、 $eil51$ を 4 つ格子型に隣接させた問題の平均都市間距離は $eil51$ の平均都市間距離とほぼ等しいため、重要温度領域も等しくなる。また、作成した問題の名前は、 $eil51^*(\text{隣接個数})-(\text{拡大率})$ と表記する。

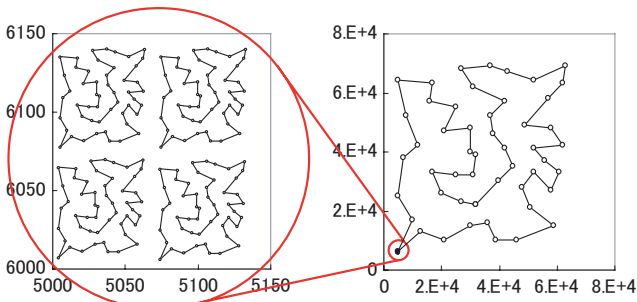


図 3: スケールの異なる問題を組合せた問題 ($eil51^*4-1000$)

3.2 複数の重要温度領域の確認

作成した 8 種の問題に 2.1 節と同様の、一定温度の SA を適用する実験を行い、重要温度領域について検証を行った。 $eil51^*4-800$ の結果を図 4 に示す。図の横軸は各温度、縦軸は得られた経路長を示す。

図 4 より、 $eil51^*4-800$ には重要温度領域が 1200 付近および 5 付近以下の 2 つ存在することがわかる。これはそ

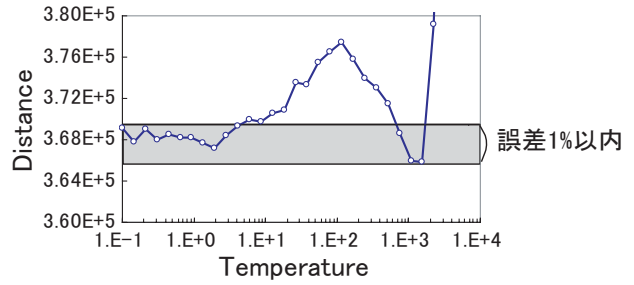


図 4: $eil51^*4-800$ の重要温度領域

れぞれ、 $eil51$ を 800 倍にした問題の重要温度領域 (1200 付近)、 $eil51$ の重要温度領域 (1.5 付近) とほぼ一致する。その他の問題では $eil51^*4-10$ が 1.5 付近、 $eil51^*4-100$ が 4 付近以下、 $eil51^*9-1000$ 、 $eil51^*16-1000$ が 5 付近以下、 $eil51^*1-1000$ および $eil51^*4-1000$ が 1500 付近、 $eil51^*4-10000$ が 15000 付近に重要温度領域を確認できた。

3.3 重要温度領域のパターン

前節の実験より、スケールの異なる問題が組合さって構成される問題では、重要温度領域が 2 つ存在することがわかった。また、問題の構成によって、解の精度と温度の関係について様々なタイプが存在することを確認できた。それらは、図 5 に示す 4 種類に分類することができる。

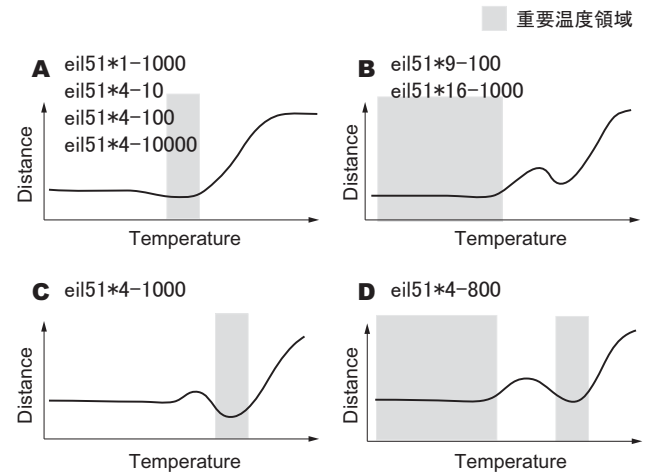


図 5: 重要温度領域のバリエーション

A は組合さっている問題のスケールの差が小さいもしくは大きい場合、どちらかの影響を強く受け、重要温度領域を 1 つしか確認できない場合である。B はそれぞれの重要温度領域の影響は見られるが、スケールの小さい問題の影響がやや強い場合、重要温度領域はスケールの小さい問題の重要温度領域と一致する場合である。C はそれぞれの重要温度領域の影響は見られるが、スケールの大きい問題の影響がやや強い場合、重要温度領域はスケールの大きい問題の重要温度領域と一致する場合である。D は組合さっている問題の影響がほぼ等しく、重要温度領域を 2 つ確認できる場合である。

4. 逐次SAにおける最高温度と解精度の関係

本節では重要温度領域が複数存在する問題と重要温度領域が1つしか存在しない問題に対し、最低温度を固定し、最高温度を様々な値に設定しアニーリングを行い、得られる解の精度が劣化する温度について検証を行った。最高温度は100000から0.1まで等比的に32分割し、最低温度は0.01に固定した。また終了条件は都市数×3200回探索が行われた時点とした。対象問題にはeil51, eil51*4-800, eil51*4-100およびeil51*4-1000を用いた。eil51における結果を図6に示す。図の横軸は設定した最高温度、縦軸は得られた経路長を示す。なお、試行回数は300回とし、実験結果は各試行の最良解の平均値である。

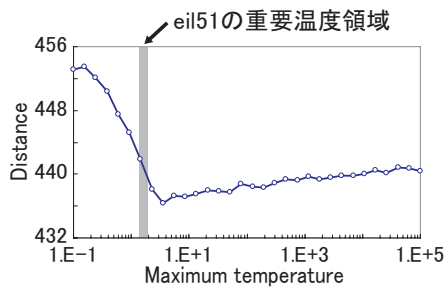


図 6: 最高温度と経路長の関係 (eil51)

図6より、重要温度領域である温度1.5付近よりやや高い温度を最高温度とすることで良好な解が得られていることがわかる。また、スケールの異なる問題が組合さっている問題においては、eil51*4-100が温度150付近、eil51*4-800が温度1200付近、そしてeil51*4-1000が温度1500付近よりやや高い温度を最高温度とすることで良好な解が得られた。これらの結果よりわかったことを以下に示す。

- 重要温度領域を1つしか持たない問題の場合、重要温度領域よりやや高い温度を最高温度とすることで良好な解を得ることができる。ただし、eil51*4-100のようにスケールの異なる問題が組合さって構成される問題では、スケールの大きな問題の重要温度領域より高い温度に最高温度を設定しなければ、良好な解が得られない。
- 重要温度領域が複数存在する場合、最も高温である重要温度領域より少し高い温度を最高温度とすることで良好な解を得ることができる。

この実験において、eil51*4-100の温度150のように、一定温度SAでは確認できないが良好な解を得るために必要不可欠な温度が存在することがわかった。そこで重要温度領域を以下のように再定義する。

重要温度領域とは良好な解を得るために必要不可欠な温度領域、すなわちその温度を通らない温度スケジュールで探索を行うと良好な解が得られない温度領域のこととする。

5. 温度スケジュールに関する考察

重要温度領域が複数存在する問題に適した温度スケジュールを考察する。eil51*4-800を対象として、逐次

SA、一方の重要温度領域のみで探索を行う単一温度SA、そして両方の重要温度領域を高いものから順に探索するSAの4種類のSAを適用し、得られる解の精度の比較実験を行った。図2と同様の結果を図7に示す。なお、作成した問題では最適解が未知のため近似解を用いた。

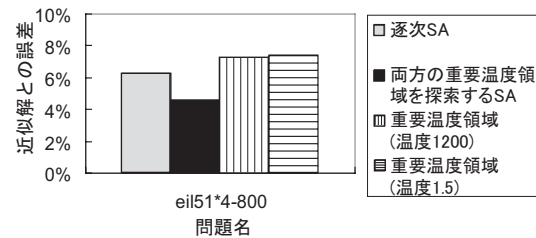


図 7: 解精度の比較

図7より、両方の重要温度を高いものから順に探索することで、最も良好な解が得られている。つまり、重要温度領域が2つ存在する問題で良好な解を得るためには、どちらか一方の重要温度領域を探索するのではなく、2つの重要温度領域を高いものから順に重点的に探索することが必要となる。

6. まとめ

本研究ではTSPに一定温度SAや逐次SAを様々な温度パラメータ設定で適用し、重要温度領域について検証を行った。その結果、スケールの異なる問題を組合せた場合、重要温度領域が複数存在することがわかった。このような問題では単一温度SAで良好な解が得られない。しかし、複数の重要温度領域を高いものから順に重点的に探索すれば良好な解を得ることができる。すなわち、ここで明らかになった知見を元に、効果的な温度スケジュールの決定が容易になる。

参考文献

- [1] Kirkpatrick, S., Gelatt Jr. C. D., Vecchi, M. P. Optimization by simulated annealing. *Science*, Vol. 220, No. 4598, pp. 671-680, 1983.
- [2] Ingber, L. Simulated annealing: Practice versus theory. *Journal of Mathl. Comput. and Modelling*, Vol. 18, No. 11, pp. 29-57, 1993.
- [3] K.A.Dowsland. Some experiments with simulated annealing techniques for packing problems. *EJOR*, 1992.
- [4] F.Glover and H.J.Greenberg. New approaches for heuristic search: abilateral link with artificial intelligence. *EJOR*, Vol. 39, pp. 119-130, 1989.
- [5] D.T.Connolly. An improved scheme for the qap. *EJOR*, Vol. 46, pp. 93-100, 1990.
- [6] Mark Fielding. Simulated annealing with an optimal fixed temperature. *SIAM J.*, Vol. 11, No. 2, pp. 289-307, 2000.
- [7] G.Reinelt. Tsplib - a traveling salesman problem library. *ORSA J.Comp.*, Vol. 3, pp. 376-384, 1991. Also available from online <http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/comopt/software/TSPLIB95>.
- [8] 小西健三, 屋鋪正史, 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, Vol. T80-D-I, No. 2, pp. 127-136, 1997.
- [9] 三木光範, 廣安知之, 窪田耕明, 吉田武史. 温度並列シミュレーテッドアニーリングにおける重要温度. 情報処理学会 第62回(平成13年後期)全国大会 講演論文集, Vol. 2, pp. 229-230, 2001.