数理解析研究所講究録
534巻 1984年 274-285

組合せ最適化問題に対するSimulated Annealing 法

大阪大学工学部通信工学科　中野 秀男

中西 義郎

1．はじめに

ＮＰ完全なクラスに属する組合せ最適化問題に対する有効な近似解法に、逐次改善法がある。逐次改善法はまた近傍探索法とも呼ばれ、このアプローチのもとで例えば巡回セールスマン問題やグラフの２分割問題の近似解法が考えられてきているし、また最近ではＣＡＤ関係の問題の近似解法としても用いられてきている。

逐次改善法の評価に関しては、最悪の場合の解析および平均的なふるまいの解析等が行なわれているが、問題の規模が大きくなるにつれて最悪の場合の解析は著しく意味のないものになり、平均的な良さが実際的な意味をもってくると考えられる。このような所から、最近 Kirkpatrickらは物質を溶融状態にしてから注意深い冷却によってグランドステートに到達させるプロセスを、組合せ最適化問題でのある初期解から最適解に到達させるプロセスに対応させた、逐次改善法の一般化ともいえる方法 --- Simulated Annealing法 --- を提案し、この方法をいくつかのＣＡＤ問題や巡回セールスマン問題に適用して良い結果が得られたことを報告している。[1,2]

ここでは Simulated Annealing法について、特にアルゴリズム構成にあたってのパラメータ設定に注目し、この方法を巡回セールスマン問題とグラフの２分割問題に対して適用し、これまでの近似解法との比較を試みてみる。

2. Simulated Annealing法

温度を低下させていった極限で物質系がどのような状態になるかを考察することは、統計力学の基本の問題であり、物質の低温での状態を決定する実験は注意深い Annealing（焼き戻し）によって行なわれる。Annealingプロセスのシミレーションにおいて、中心的な役割を演じるのは、ある与えられた温度で平衡状態にある分子（原子）集団の熱運動をシミュレーションすることであるが、これについては Metropolisらによる次のようなアルゴリズムが使える。

ある温度Tの各ステップに於いて任意の１つの分子の変位を与え、それによるエネルギの変化ΔＥを計算する。ΔＥ≦０ならこの変位は受理される。ΔＥ＞０の場合には、この変位は

$$p(\Delta E) = \exp(-\Delta E / k_B T) \qquad (1)$$

の確率で受理される。ここで、 k_Bは Boltzmann定数である。このステップを繰り返すことにより温度Tに於ける熱平衡状態での分子の熱運動がシミュレートされる。

Kirkpatrick らは、注意深く構成された annealingプロセスによって物質系の低温状態を見い出す操作と、組合せ最適化問題で最良解、近似解を見い出す操作との間の類似性を認め、組合せ最適化問題の近似解法として Simulated Annealing法を提案した。この方法は、エネルギのかわりにコスト関数を使い、パラメータの集合によって解空間の輪郭(Configuration) を定義するとき、ある温度でのある与えられた最適化問題の解の集合を生成する操作は Metropolis 法そのものであるとして、システムをまず高い温度での状態にし、ついでゆっくり温度を下げ、システムが凍結しもはやそれ以下の変化の起こらない所までもっていくものと要約できる。

Kirkpatrick らは、この方法を回路の分割、配置、配線問題および巡回セールスマン問題に適用しているが、回路の分割問題では目的関数を２次式にすることにより、磁気スピ

ンの問題と類似性をもたせ、このスピンのグランド・ステートが安定していることから、回路の分割問題に対しても以下のことが言えるとしている。

1）失敗はあっても、ランダムな初期解から大きい改善が得られる。

2）多くの良い局所最適解があるので、Simulated Annealing 法のような確率的探索法はこれらのいくつかを見つける。

3）どのグランド・ステートも他のグランド・ステートより著しくは良くないので、真の最適解を見つけることは実りが少ない。

Simulated Annealing 法を組合せ最適化問題に適用するにあたっては、以下の４つのことを考えなければならない。

a）解をどう表わすのか。たとえば、巡回セールスマン問題では巡回路を枝の部分集合または節点の順序とする２通りの表現ができる。

b）ランダムな解の動きをどう表わすのか。

c）目的関数の表現をどうするのか。

d）annealing のスケジュール、すなわち温度Ｔの変化と、各Ｔに於ける解の動きの数をどう設定するのか。

３．　逐次改善法としてのSimulated Annealing 法

Metropolisらのアルゴリズム、したがってSimulated Annealing 法は、解の探索にアップヒル・ステップをも伴わせているという点で、逐次改善法をより一般化した方策といえる。

従来からの逐次改善法は基本的に以下のステップから構成される。

《逐次改善法》

```
n1.   初期解をxとする。
n2.   repeat
n2.1      if  xより良い解がまわりにあれば  then  x ← x'
n2.2  until  良い解がまわりにない。
n3    x' を局所最適解とする。
```

実際にある問題に逐次改善法を用いる場合には、ステップ．n１で初期解をランダムに選んだり、他の近似解法の近似解を使う。ステップ．n２．１については、良い解に遭遇すればすぐ改善するとか、良い解のうち１つ、たとえば最も良い解を選ぶとかの選択が可能である。

これに対して、Simulated Annealing 法は概略次のように記述できる。

《Simulated Annealing 法》

```
s1.   初期解xを生成する。
s2.   repeat  {各温度Tに対して}
s3.       repeat  {各ランダムな動きに対して}
s3.1          if  良い解になれば  then  受理する。
s3.2          else  {悪い解になる}
                  ある確率pで受理する。
          until  解の値の分布が定常状態になる。
s4.1      次のTを選ぶ。
s4.2  until  グランド状態になる。
```

Simulated Annealing 法について詳しく述べる前に、この方法の直観的なイメージを少し述べる。逐次改善法は、非常に多くの節点（解）と枝（変換関係）からなり、各節点に高さという重みのついたネットワークにおける谷下り問題（最小問題を考える）となる。簡単のために、解空間を図１のように一次元的に描く。Ｇの点がグランド状態である。従来の逐次改善法ではＬ地点のような谷に入っても、これを局所最適解とした。これに対し

てSimulated Annealing 法では、Lのような値がそれ程良くない解では、値が悪くなる解の動きも受理するため、更に良い解に到達する可能性が非常に高くなる。また、M地点のように比較的良い解であっても、適切に annealingスケジュールを選択してやれば、Gのグランド状態に到達させられる。更に、各グランド状態は互いに値がそれほど違わないから、この解法は annealing スケジュールという大きな自由度を持っているが良い解法であると言うのが Kirkpatrickらの言わんとする所である。

3．1　初期解の生成

初期解はランダムにとる。初期解をランダムにとれば、ほぼ解の集合の中間値になる。もし、初期解を他の近似解法の近似解としても、Tの値を最初大きく取れば、Simulated Annealing 法により解は中間値の方へ動く。これは熔融(melting) と言われ、図１で言えば、この近似解がLやMの地点にあっても、最初は熔融を行なうことにより、小さな谷より出してやろうとするものである。

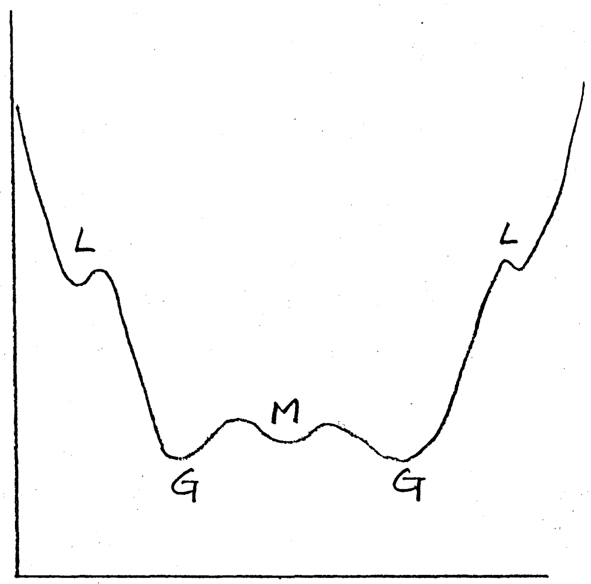

図１．解空間の１次元的イメージ

3．2　温度Tの系列

統計力学の温度Tは、組合せ最適化問題では解の動き易さの指標と考えることができる。温度と違って、一般には組合せ最適化問題では値に最大値と最小値があるので、解の動きも下方向だけでなく上方向も制約をうける。Simulated Annealing 法では、極低温や最小化問題を考えるので、値の下がる動きはすべて受理し、値の悪くなる方だけ制約している

ので、Tをいくら大きくしても高々中間値程度までしか解の値は悪くならない。

Kirkpatrick らは、ステップ．ｓ３．２の受理する確率を

$$p(\Delta f) = \exp(-\Delta f / T) \qquad (2)$$

とし、温度Tは組合せ最適化問題で解の動きを制約するものと規定している。ここでΔｆは値の変化値である。Tが十分大きいとき、ｐ(Δｆ)は１に近づき、すべての解の動きは受理される。逆に、Tが０に近づけばｐ(Δｆ)も０に近づくので、解は良くなる方向にしか受理されない。

ｐ(Δｆ)として(２)式が採用されたのは統計力学とのアナロジーによるもので、エネルギの変化が分子の位置の変化の２次式になることによる。ｐ(Δｆ)はTが０のとき０になり、Tが大きくなれば１に近づく単調増加関数となればよいから、

$$P(\Delta f) = T \quad (0 \leqq T \leqq 1) \qquad (3)$$

と置いてもよいが、これについては６章で考察する。

Tの系列として、Kirkpatrickらは

$$T_n = (T_1 / T_0)^n \cdot T_0 \qquad (4)$$

とし、

$$T_1 / T_0 = 0.9 \qquad (5)$$

としているが、Tの系列を変化させることにより、良い結果を与える系列が経験的に選ばれる。

３．３　ある温度Tでの解の動きの数

Tが与えられた時、次のTに移るまでに何回解を動かすかは、定性的に解の値の分布が定常状態になったときであり、少くとも解を構成する要素がそれぞれ１回以上は動かなければならない（但し、受理されるかどうかは別である）。Kirkpatrick らは回路の分割問

題では、解の構成要素数ｎに対して、１０ｎ回の受理があるか、１００ｎ回試行したかのどちらかの条件が満足したとき、次のＴに移るようにしている。

新しいＴに移行するときの解は、それまでの最良解ではなく、前のＴの最後の解をとる方が解法のシミュレータとしての性質からみて適切であると思われる。

３．４　グランド状態の判定

連続した３回のＴで受理される回数が規定値より少なければ凍結したものと考え、グランド状態と見なしている。したがって、回路の分割問題では３００ｎ回の試行で解があまり動かなければ終了する。

３．５　Annealing スケジュール

Annealing スケジュールは３．２，３．３，３．４におけるそれぞれの値を決める。最適なスケジュールを決めるには、最初に計算時間の短いスケジュールを選び、各パラメータを計算時間の長くなる方向に変化させながら、いくら計算時間を増してもグランド状態の値が変わらなければよい。

４．巡回セールスマン問題に対するSimulated Annealing 法とその評価

４．１　巡回セールスマン問題に対するSimulated Annealing 法

巡回セールスマン問題は、枝に重みの付いたネットワークに於いて、各節点をすべて通る枝の重みの和の最小なハミルトン閉路を求める問題である。この問題は、ＮＰ完全なクラスに属する解き難い問題の中でも古くからある問題であり、多くの厳密解法や近似解法が提案されてきている。近似解法の中でもっとも有効であると言われているのが、Linと

Kernighan による近似解法であり、以下ＬＫ法と呼ぶことにする[3]。ＬＫ法はλ-opt法とも呼ばれるλ本の枝の入れ替えを効率良く適用したものである。

巡回セールスマン問題に於いて、解を構成するｎ本の枝のうち２本の枝を、解を構成しない２本の枝と入れ替える方法を２-opt法といい、３本の入れ替えなら３-opt法となる。Kirkpatrick らは、この２本または３本の枝の入れ替えを解の動きとし、Simulated Annealing 法を適用した。ここでは、Simulated Annealing 法として以下のアルゴリズムを構成する。

```
          《巡回セールスマン問題に対するSimulated Annealing 法》
t1    ｗｈｉｌｅ　試行回数ｋ回繰り返す　ｄｏ
t2        初期解を生成する
t3        ｒｅｐｅａｔ　｛Ｔのスケジュールに従って｝
t4.1          ＵＰ＝０，ＥＶＥＮ＝０，ＤＯＷＮ＝０
t4.2          ｒｅｐｅａｔ　｛ｓ回繰り返す｝
t4.3              ランダムに枝の入れ替えを考え、解の値の変化をΔｆとする
                  ｃａｓｅ
t4.4                  Δｆ＜０：　解を変える。ＤＯＷＮ＝ＤＯＷＮ＋１
t4.5                  Δｆ＝０：　解を変える。ＥＶＥＮ＝ＥＶＥＮ＋１
t4.6                  Δｆ＞０：　確率ｐ（－Δｆ／Ｔ）で
                                      解を変えて　ＵＰ＝　ＵＰ＋１
              ｕｎｔｉｌ
          ｕｎｔｉｌ　ＤＯＷＮ＝０
```

４．２　巡回セールスマン問題に対するSimulated Annealing 法の評価

逐次改善法の利点は、多くの局所最適解の中から最良解を選べることにある。従って、巡回セールスマン問題のいくつかの逐次改善法を考えるとき、一定の試行回数でなく、一定時間内の解の良さが問題になる。表１には、一定時間（２００秒、ＡＣＯＳ１０００）に於ける各解法の比較を試行回数、最良値、最良値の得られた試行の回数で示した。

計算例からみて解法の良さの順はＬＫ法、Simulated Annealing 法、３-opt法、２-opt法となる。ただし、Simulated Annealing 法はスケジュールをうまく選ばなければ、３-opt法より悪い結果を与える。

５．回路の２分割問題に対する Simulated Annealing法とその評価

５．１　回路の２分割問題に対する Simulated Annealing法

回路の分割問題とは、与えられた回路を分割したとき、分割された回路のバランスを考慮しながらできるだけ分割間の線の数を少なくする問題である。これに対して、グラフの２分割問題とは、与えられたグラフの節点をちょうど２分割し、分割間の枝の数を最小にする問題である[(4)]。巡回セールスマン問題と同様、このグラフの２分割問題回路も逐次改善法を使った近似解法として、１-opt法と KernighanとLin によるＫＬ法がある。この逐次改善法を回路の分割問題に適用するときは、ちょうど２分割にするという制約がないので１-opt法やＫＬ法は少し変更され、素子の入れ替えだけでなく、素子の移動も考えれば良い。回路の２分割問題に対する Simulated Annealing法では、１素子の移動を解の動きとして、巡回セールスマン問題と同様な解法を構成する。

５．２　回路の２分割問題に対する Simulated Annealing法の評価

回路の２分割問題に対する Simulated Annealing法を他の逐次改善法である１-opt法とＫＬ法と比べてみる。但し、１-opt法とＫＬ法はどちらもグラフの２分割問題を扱っているため、ここでは１素子の移動だけを考えた解法にしてある。対象とする例題として、素子数４０９と６１０のＬＳＩ回路を使った。また４．２で述べたと同じように、各解法を表２で比較する。

６． Simulated Annealing法を構成するパラメータについて

ここでは、 Simulated Annealing法を構成するパラメータについて、巡回セールスマン問題と回路の２分割問題に対する計算例から検討する。

６．１ 温度Ｔの系列と解の動きの数

温度を減少させる割合ｒと、解の動きの数ｓは互に関連しあう値であり、ｒを１に近づける事とｓを増加させることはほぼ等価である。ｓの増加に比例して計算時間は増加する。また、ｓの増加で最良解の値は良くなったが、ｓを増せば増す程最良解の値を良くできるかは、 Simulated Annealing法の良さを決める最大の問題点と思えるが、２つの問題への計算結果からみて、限界があるのではないかと思われる。ただ、この解法はスケジューリングしだいであるので断定的には言えない。

６．２ 温度の初期値

温度の初期値はなるべく高い方が良いが、計算例からは解の動きの値が上方向と下方向に等しくなるような高い温度でなくとも、ほどほど高ければ十分であった。

６．３ グランド状態の判定

Annealingの終了の判定は、巡回セールスマン問題ではあるＴで下方向の解の動きがなければグランド状態とし、回路の２分割問題では値の整数部の無変化が何回かの温度で連続して起ればグランド状態とした。計算例からみて、このグランド状態の判定の低い温度で多くの処理時間を使うが、最良値はあまり変化しないので、問題に応じた効率の良い判

定を選べば良い。

7. むすび

Kirkpatrick らによって提案された Simulated Annealing法を紹介し、アルゴリズムを構成するパラメータについて考察を加えるとともに、これを巡回セールスマン問題と回路の２分割問題に適用し他の近似解法と比較する形で評価した。

良く研究されている巡回セールスマン問題では、 Simulated Annealing法がＬＫ法より優れた解法になるという結論は得られなかった。また、回路の２分割問題でも、この方法がＫＬ法よりも優れているとは言えなかった。ただし、 Simulated Annealing法はスケシューリング方法等、大きな自由度をもつため、ここでの考察ではいまだ不十分であり、スケジューリングの工夫等まだまだ考察の余地が多分にある。なお、ここで取り上げた以外の問題に対する適用、評価も必要であろう。

文献

(1) Kirkpatrick,S.,et.al.,"Optimization by simulated annealing",Science, 13 May 1983, Vol.220, No.4598, p.671, 1983

(2) Vecchi,M.P.,S.Kirkpatrick,"Global wiring by simulated annealing",IEEE Trans. on CAD, Vol.CAD-2, No.4, p.215, 1983

(3) Lin,S.,B.W.Kernighan,"An efficient heuristic algorithms for traveling-salesman problem",Operations Research, Vol.21, No.2, p.498, 1973

(4) Kernighan,B.W.,S.Lin,"An efficient heuristic procedure for partitioning graphs", BSTJ, Vol.49, No.2, p.291, 1970

表１．　巡回セールスマン問題における各解法の比較

解　法	40都市問題			80都市問題		
	試行回数	最良値	最良解回数	試行回数	最良値	最良解回数
２－ｏｐｔ	２３２５	１５	５	３５０	４８	１
３－ｏｐｔ	１２８	１０	１	１０	３５	１
ＬＫ法	１３５５	１０	９０１	１８０	２７	３０
ＳＡ１	１５	１１	１	１５	４１	１
ＳＡ２	２	１０	１	２	３５	２

但し，ＳＡ法１：simulated annealing 法　Ｔｏ＝１０，ｒ＝０．９，ｓ＝１００００

ＳＡ法１：simulated annealing 法　Ｔｏ＝１０，ｒ＝０．９，ｓ＝８００００

使用計算機はＡＣＯＳ－１０００，ＦＯＲＴＲＡＮ

表２．　回路の２分割問題における各解法の比較

	ＬＳＩ４０９			ＬＳＩ６１０		
	計算時間	試行回数	最良値	計算時間	試行回数	最良値
１－ｏｐｔ	６８	８００	８４．０１	１８０	６００	１４８．０
ＫＬ法	５３	１０	２１．０１	１５９	１０	９２．３１６
Ａｎｎｅａｌ	２１２	２	２１．０１	１０２０	１０	９３．８９６

Ａｎｎｅａｌ：simulated annealing法、ｓ＝１００００

使用計算機はＩＦ８００／５０，ＭＳ－ＦＯＲＴＲＡＮ