組合せ最適化問題に対する Simulated Annealing 法

中野川秀男・中西 義郎

1. はじめに

最近，ＩＢＭの Kirkpatrick らは，組合せ最適化問題に対する近似解法として **Simulated Annealing 法**を提案した[1]．この手法は統計力学における

“物質を溶融状態にしてから注意深い冷却によって結晶状態に到達させるプロセス”

を，組合せ最適化問題での

“初期解を徐々に改善して最適化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である．彼らはこの方法を巡回セールスマン問題やＬＳＩのいくつかの設計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．

この解法のもととなった統計力学と組合せ最適化問題との類似性自身きわめて興味ある考えであるが，組合せ最適化問題に対する解法としてみたとき，山登り法である逐次改善法で，解の改善だけでなく**改悪も許したこと**など，注目される点が多い．

本稿では，Simulated Annealing 法を逐次改善法の一般化ないしは拡張であるとの観点から，この手法を平易に解説してみよう．さらにくわしくは，文献[2]および，その中の文献表を参考にされたい．

なかの　ひでお，なかにし　よしろう
大阪大学工学部通信工学科　〒565 吹田市山田丘２－１

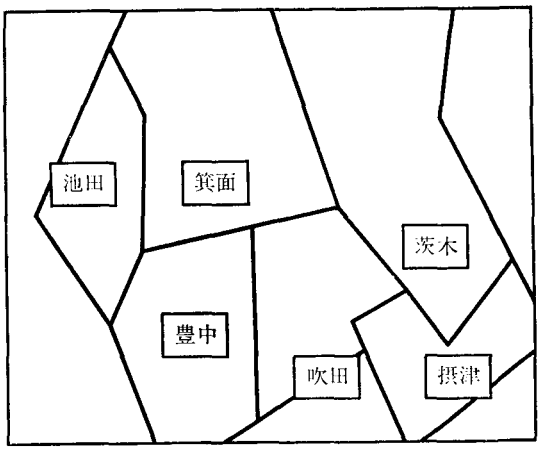

図１　大阪北部地図

2. 逐次改善法

組合せ最適化問題でも，0/1 整数計画問題や巡回セールスマン問題のように取りあつかいにくい (intractable) 問題に対しては，近似解法を使って最良解を求め，満足せざるをえないのが現状である．

このような組合せ最適化問題に対する近似解法の有力な方策として**逐次改善法**または**近傍探索法**と言われる方法がある．逐次改善法を巡回セールスマン問題を例にとって説明しよう．

図１のような６つの都市からなる地方があり，セールスマンがすべての都市をできるだけ速く巡りたいとする．各都市間の車での所要時間は表１

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

表 1　大阪北部6都市間所要時間(分)

箕面	12				
豊中	10	14			
吹田	39	42	28		
茨木	54	59	44	24	
摂津	46	50	36	16	28
	池田	箕面	豊中	吹田	茨木

のように与えられているものとする．巡回路であるから1都市を固定して考えると逆巡回路を同一として，5!/2=60通りの巡回路がある．すべての巡回路の所要時間を計算してその中から最適解を見いだすという**総当り法**(別名，しらみつぶし法)では，6都市なら解けるが，10都市になると18万通りの巡回路が存在し，実際には解けないといってもよい．

この問題に対して逐次改善法では，まず可能解として図2の巡回路 T_1 を考える．この解を初期解と呼ぶことにする．ここでは初期解をどのように作るかは考えず，とりあえず適当に生成するものとする．逐次改善法では名前のとおり，この初期解の解の構成を部分的に変更して値が改善されるようであればその解を改善の対象とする解にする．

T_1の巡回路の2つの隣合わない枝を，他の巡回路を構成しない枝と図3のように入れ替えれば新たな巡回路 T_2 が生じる．T_1 と T_2 の所要時間の差は交換する枝の2本の組の所要時間の差であるから簡単に計算できる．T_1 より T_2 は所要時間が1分短いから T_2 の巡回路をより良い解として選ぶ．この枝の入れ替えにより解の改善をはかり，どのように2本の枝を選んで入れ替えても解の値が改善されないとき，この解を最良解（最適解ではない！）と考えて近似解とする．この近似解は局所最適解とも言われる．

一般に，逐次改善法は図4のような処理の手順を踏む方策である．この方法には，すでに述べた初期解の生成方法を含めて以下の大きな選択基準をもっている．

1. 初期解の生成方法（ランダムに生成か他の近似解法の近似解等を使う）
2. 解の変換方法
3. 解の改善方法（最初の改善解に改善するか

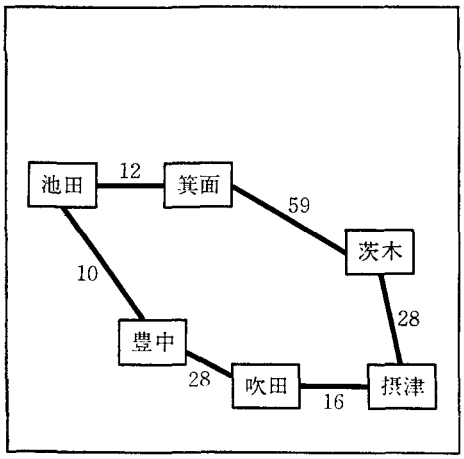

図 2　巡回路 T_1：153分

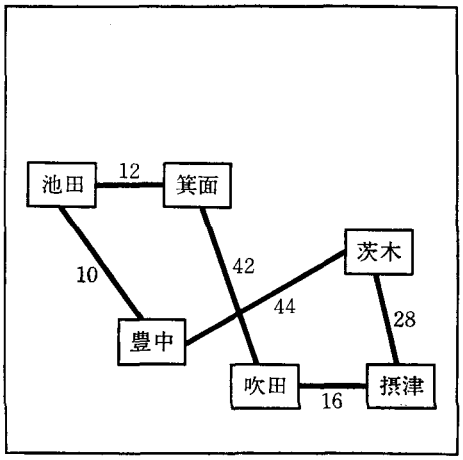

図 3　巡回路 T_2：152分

《逐次改善法》
初期解をXとする
repeat
　if　Xより良い解 X' がまわりにあれば
　　then　$X \leftarrow X'$
until　良い解がまわりにない
Xを局所最適解とする

図 4　逐次改善法

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

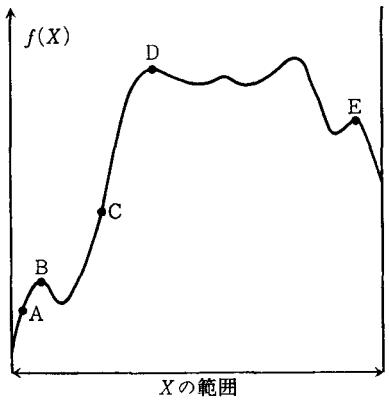

図 5 関数 $f(X)$

最良の改善解か等)

4. 停止条件(局所最適性の判定)

逐次改善法は，非線形最適化問題における**山登り法** (Hill Climbing Method) と同じ考え方の最適化方策であるが，たいていの場合，目的関数が多峰性を示すため，局所最適解を与えるにとどまる．たとえば，上記の巡回セールスマン問題で解の変換の方法を2本の枝の入れ替えとすれば，10都市問題の一例に対する計算機実験では，18万の可能解の中で1000程度の局所最適解が存在した．

この種の組合せ最適化問題では，可能解の数が指数関数的に増加し，それにともなって局所最適解の数も増加するので，この逐次改善法で真の最適解を見いだすことはまず期待できない．そのため変換の方法を複雑でかつ効率よくすることにより，局所最適解の近似度を高めてきた．

3. Simulated Annealing 法

局所最適解が多数存在しても，逐次改善法が比較的良い近似解または最適解を見つけることはよく知られている．このことは，以下のように考えれば説明がつく．いま，1変数からなる最大化問題

$$\text{maximize } f(X) \quad X: \text{整数} \qquad (1)$$

を考えよう．$f(X)$ が図5のような関数であるとし，Xの値を1つ増すか減ずることを解の変換としよう．A地点がXの初期解とすると逐次改善法ではB地点が局所最適解になり，C地点が初期解ならD地点が局所最適解になる．初期解が一様に生成されるとすれば，この関数では多くの初期解が最適解ないしは比較的良い局所最適解に到達することがわかる．

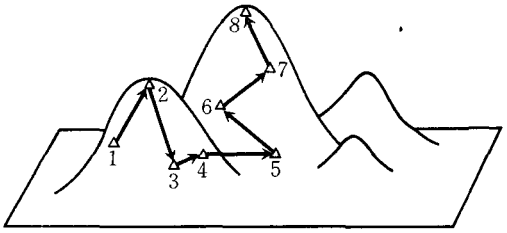

図 6 改悪を許すことによる低い山からの脱出

n変数からなる最適化問題では $(n+1)$ 次元空間上での山登り問題と考えてよいから，図5の地形が多次元になったと見ればよい．組合せ最適化問題では，逐次改善法で比較的良い値の局所最適解が得られることから“比較的良い値をもつ解を頂としてもつ山の裾野は広く，逆に悪い局所最適解の裾野は狭いであろう”と考えられている．Simulated Annealing 法ではこの後者の解に到達したとき，その山の裾野を歩きまわることにより他のより高い山の裾野に入れようとする．(図6)

このことをアルゴリズムとして実現するには，解の値のそれほど良くないところでは，解の変換により値が少々悪くなってもその変換を受け入れ(**受理する**と言う)，解を改悪すればよい．ただし，そのあたりをうまく制御しないとうまくゆかない．

Simulated Annealing 法では，**温度**という概念を導入し，その温度をうまく制御することにより，生成した初期解を改悪も許しながら徐々に改善し，最適解または最適解に近い最良解を導びこうとする解法である．

図4の逐次改善法では，解の改善だけを考えたが，Simulated Annealing 法では解の変換による値が改善されなくとも，解の値の変化量をΔと

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

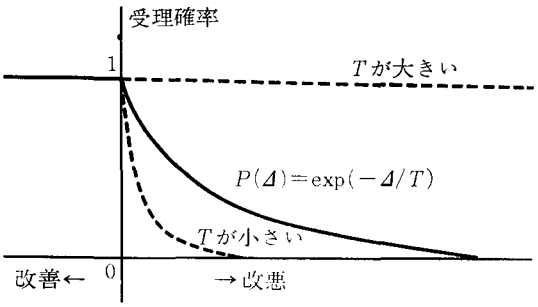

図 7 受理確率 $P(\Delta)$

したとき

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

の確率で解の変換を受理する．ただし，解が改善される時は，受理確率は1すなわち，

$$P(\Delta)=1 \qquad (3)$$

である．$P(\Delta)$ は図7のような受理関数で，変換が改善でないとき，Δ については，

Δ が大きいほど，変換の受理確率が低い．

Δ が小さいほど，変換の受理確率が高い．

Δ が0なら，すべての変換が受理される．

一方，T に対しては，

T が大きいほど，変換の受理確率が高い．

T が小さいほど，変換の受理確率が低い．

T が無限大なら，すべての変換が受理される．

T が0なら，改善だけが受理される．

このことから逐次改善法とは，T を0とした Simulated Annealing 法と考えてもよい．T を無限大としたとき，解はあらゆる値をとって変動するのではなく，とりうる値の中央値のあたりですべての解の値の分布にしたがって動きまわる．T をある値で固定し，解を変動させても T に依存したある値を中心に解は変動し，改善回数と改悪回数はほぼ等しくなって**平衡状態**になる．ただし T が0に近づくほど，解の変換が受理されない回数が増してくるから改善回数も改悪回数も徐々に減少してくる．この平衡状態を**熱平衡状態**に，解の変動を**分子の変動**に見立てれば，T が低くなるほど解の変動が小なくなるので T を**温度**と呼ぶことにする．

Simulated Annealing 法とは，この温度 T を十分大きい値からはじめ，徐々に0に近づけることにより，裾野の狭い悪い局所最適解から抜け出し，裾野の広い最適解か，それに近い近似解にたどりつこうとする解法である．図8に Simulated Annealing 法の手順を示し，図9に Simulated Annealing 法で温度 T を徐々に下げていった時の解の値の変動をわかりやすく描いた図を示す．

《Simulated Annealing 法》
初期解 X を生成する
repeat {各温度 T に対して}
　repeat {各ランダムな動きに対して}
　　if 良い解になれば　**then** 受理する
　　else {悪い解になる}
　　ある確率 $P(\cdot)$ で受理する
　　until 解の値の分布が定常状態になる
　次の温度 T を選ぶ
until 冷却状態（局所最適解）になる

図 8 Simulated Annealing 法

Simulated Annealing 法を組合せ最適化問題に適用するに当っては，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都

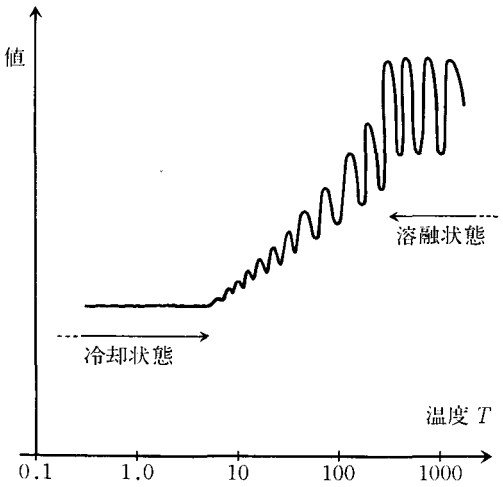

図 9 良い Annealing による値の変動

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

市の順序とする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における解の動きの数をどう設定するのか.

以下では，上記のaからcまでを設定したとして，最後のスケジュールを構成するパラメータについて述べるが，常に山々の地形すなわち解空間の構造を頭に入れて読まれると理解しやすいと思う.

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，その値はほぼ解の値の集合の中央値になる．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 法により解は中央値のほうへ動く．これは**熔融**(melting)と言われ，図5で言えばこの近似解がEの地点にあっても，最初は熔融を行なうことにより，小さい頂きより出してやろうとするものである.

3.2 温度Tの系列

統計力学での温度Tは，組合せ最適化問題では解の動きやすさの指標と考えることができる．温度と違って，一般に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，最大化か最小化問題のいずれかを考えるので，値の改善される動きはすべて受理し，値の悪くなるほうだけ制約しているため，Tをいくら大きくしても高々中央値程度までしか解の値は悪くならない.

Simulated Annealing 法の解法としての構成の容易さから($P(\Delta)$の計算が煩雑)，温度Tを徐徐に下げるのではなく段階的に下げ，そのかわり各温度で十分多くのランダムな解の動きを試みる．Tの系列として，Kirkpatrick らは

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

とし，

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

が良いとしている．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が，大体0.9から0.95のあいだの値が良いようである.

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，少な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(ただし，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，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されたとき，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の最後の解をとるほう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 停止条件

連続した3つの温度で受理される回数が規定値より少なければ解は**凍結**したものと考え，その解を局所最適解と見なしている．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 スケジュールでは，

◎ 初期温度

◎ 温度の系列

◎ 各温度における定常状態の判定条件

◎ 停止の判定条件

を決めなければならない．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最良解の値が変らないようなパラメータを見いだせばよい.

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

4. いくつかの組合せ最適化問題に対するSimulated Annealing法とその評価

ここではいくつかの組合せ最適化問題に対するSimulated Annealing法とその評価を簡単に紹介する.

ＬＳＩ回路の分割・配置・配線問題はＩＣ技術の実装化で生じる重要な問題である. 特に, ＬＳＩから超ＬＳＩへと集積度が上がるにつれて, 問題の変数も数千から数万の規模となる. これらの問題に対してSimulated Annealing法を用いることにより, 従来の近似解法に比してチップ面積を最高40%縮小できたという報告がある. しかし計算にスーパー・ミニコンでまる1日実行させており, 大規模問題に対してSimulated Annealing法を用いるときはこの程度の計算時間は必要であるといえよう.

都市数が千程度の地図上の巡回セールスマン問題に対してほぼ最適に近い解が導けたという報告もある. 著者らは, Simulated Annealing法と既存の最良と言われている方法と比較してみたが百都市程度ではまだSimulated Annealing法の良さは出ないようである.

他のＯＲの問題として2次割当て問題への適用についても論文があり, やはり良い解法であると報告されている.

5. むすび

Kirkpatrickらによって提案されたSimulated Annealing法を紹介し, いくつかの組合せ最適化問題への適用と解法の評価等については簡単に述べた.

著者らが計算機実験をした結果では, よく研究されている巡回セールス問題に対しては, 規模が百変数程度の問題では, Simulated Annealing法が既存の近似解法より優れた解法になるという結論は得られなかった. ただし, Simulated Annealing法はスケジュールを決めるパラメータの決定という大きな自由度をもつため, 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.

ＣＡＤの分野のように変数の数が千以上ある問題では, 既存の方法があまり良くないこともあって, Simulated Annealing法が効率の良い優れた解法であることが示されている. このことから, 巡回セールスマン問題のような組合せ最適化問題でも, 大規模な問題になればなるほどSimulated Annealing法が他の近似解法以上に良い解法になるものと思われる.

Simulated Annealing法の欠点の1つは, 非常に時間がかかるという点であるが, これに対しては, 並列処理マシンで1変数に1プロセッサを割当てリング構造を構成して配置・配線問題をSimulated Annealing法で解こうという試みもある.

Simulated Annealing法についてできるだけ平易に解説することを目的としたため, 統計力学との関連性, 近似解法の確率統計面からのマクロなアプローチ, Simulated Annealing法の理論的解明等の最新の話題については触れられなかった. ＣＡＤの分野での活発なSimulated Annealing法に対する研究に対して, ＯＲでの問題に対する適用例が少ないように思えるので, 小文が何らかの刺激剤になればと思っている.

参考文献

[1] Kirkpatrick, S., et. al. "Optimization by Simulated Annealing", Science, 13 May 1983, Vol. 220, No. 4598 (1983), 671-

[2] 中野秀男, 中西義郎, "組合せ最適化問題に対するSimulated Annealing法", 第6回数理計画シンポジウム, 4-2, 1985

× × ×

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会. 無断複写・複製・転載を禁ず.