Vol.2017-MPS-116 No.16
2017/12/12

他個体を参照した進化的計算による巡回セールスマン問題の解法

佐藤豊浩[†1]　穴田一[†1]

概要：進化的計算は，生物学的進化から着想を得た操作により，生物個体を模した複数の解候補を解空間上で移動させることで高精度な解を探索するという近似解法の枠組みの一つである．しかし，進化的計算の考え方を基に設計された既存手法には，自然界の生物の仕組みに囚われ過ぎていると考えられる部分がある．加えて，探索集団が持ち合わせない新規要素の発見は乱数に強く依存している．そこで，問題特有の情報である個体の表現型を利用して，探索集団が持ち合わせない新規要素を含む要素集合を生成し，任意の数の個体や要素集合を参照して新たな個体に進化する新たなアルゴリズム，参照進化 (Referential Evolution) を構築した．そして，代表的な組み合わせ最適化問題である巡回セールスマン問題の近似解を高精度かつ高速に求めることで有効性を確認した．

キーワード：巡回セールスマン問題，TSP，進化的計算

Evolutionary Computation Referring to Other Individuals for Traveling Salesman Problem

TOYOHIRO SATO[†1]　HAJIME ANADA[†1]

1. はじめに

本研究では，進化的計算 (Evolutionary Computation, EC) の考え方を基に巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem, TSP) の近似解を高精度かつ高速に求める新たなアルゴリズム，参照進化 (Referential Evolution, RE) を構築した．

TSP は，配送計画や基盤穿孔などの現実問題に直結しているため，重要性の高い問題とされている．しかし，問題規模の増加に伴う解候補数の増加が指数的であるため，厳密解を現実的な時間内に総当たりで求めることは困難である．そのため，近似解を高精度かつ高速に求める方法が研究されている．EC は，生物学的進化から着想を得た操作により，生物個体を模した複数の解候補を解空間上で移動させることで高精度な解を探索するという近似解法の枠組みの一つである．EC の考え方を基に設計された既存手法には，遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm, GA) [1]，粒子群最適化 (Particle Swarm Optimization, PSO)，アントコロニー最適化 (Ant Colony Optimization, ACO) などが存在し，様々な最適化問題に対して優れた性能を発揮している．しかし，これらの手法を TSP に適応させる場合，それぞれ様々な工夫を必要とする．例えば，GA の操作を TSP に適応させるには，問題特有の情報である巡回経路を適切に遺伝させる必要があり，様々な交叉方法が研究されている [2] [3]．こうした既存手法には，自然界の生物の仕組みに囚われ過ぎていると考えられる部分がある．加えて，探索集団が持ち合わせない新規要素の発見は乱数に強く依存している．このように，最適化問題の解法として改善出来る箇所が存在している．

本研究では，EC の考え方を基に新たなアルゴリズム，RE を構築した．RE は，既存手法の突然変異に代わり，問題特有の情報である個体の表現型を利用して，探索集団が持ち合わせない新規要素を含む要素集合を生成する．そして，既存手法の交叉に代わり，任意の数の個体や要素集合を参照して新たな個体に進化する．そのため，突然変異は乱数への依存を抑えられ，交叉は自然界の生物の仕組みに囚われない拡張性を有する新たな操作となっている．また，進化する自個体の要素を優先して引き継ぐことで，各個体を中心とした近傍探索を行う．それにより，探索集団の分散した初期配置を活用し，解空間を多様に探索することで解の精度向上を図る．TSP において問題特有の情報は座標空間上の巡回経路であるため，経路の位置関係を利用することで，探索集団が持ち合わせない経路の発見を行う．そして，TSPLIB [4] に掲載されているベンチマーク問題を用いて既存手法と比較を行った．その結果，提案手法が TSP の近似解を高精度かつ高速に求められることを確認した．

2. 巡回セールスマン問題 (TSP)

TSP とは，複数の都市座標と都市間のコストが与えられたとき，全ての都市を一度ずつ訪問して最初の都市へ戻るコストの総和が最小となる巡回経路を求める組み合わせ最適化問題である．TSP は，配送計画や基盤穿孔などの現実問題に直結しているため，重要性の高い問題とされている．

†1 東京都市大学
Tokyo City University

ⓒ 2017 Information Processing Society of Japan

TSP の解候補である巡回経路は，都市数を n としたとき $(n-1)!/2$ 通り存在する．したがって，問題規模の増加に伴う解候補数の増加が指数的であるため，厳密解を現実的な時間内に総当たりで求めることは困難である．このような問題は NP 困難 (NP-hard) と呼ばれ，厳密解ではなく近似解を高精度かつ高速に求める方法が研究されている．

3. 進化的計算 (EC)

EC は，生物学的進化から着想を得た操作により，生物個体を模した複数の解候補を解空間上で移動させることで，高精度な解を探索するという近似解法の枠組みの一つである．EC は，良い解同士には何らかの類似構造が存在するという近接最適性の原理 (Proximate Optimality Principle) [5] を仮定して探索の効率化を図っている．EC の考え方を基に設計された既存手法には，生物の進化や遺伝をモデル化した GA，鳥や魚などの群れの動きをモデル化した PSO，蟻の採餌行動をモデル化した ACO などが存在し，様々な最適化問題に対して優れた性能を発揮している．

3.1 遺伝的アルゴリズム (GA)

GA [1] は，選択，交叉，突然変異，淘汰と呼ばれる生物の進化や遺伝をモデル化した操作により探索を行う手法である．GA は，探索集団から 2 個体 (親) を選択して，親の要素を組み合わせる交叉と要素の一部を変化させる突然変異により新しい個体 (子) を生成する．そして，淘汰により個体数が一定に保たれる．これらの操作を繰り返すことにより探索を行う手法である．また，選択や淘汰の際に高精度な解を優先するような選択圧を掛けることで，子は高精度な解が共通する要素を多く含むようになる．したがって，探索集団は有望な探索領域に重点的に分布し，集中的な探索を行うことが出来る．このような GA の操作を TSP に適応させるには，問題特有の情報である巡回経路を適切に遺伝させる必要があり，様々な交叉方法が研究されている．枝交換交叉 (Edge Exchange Crossover) [2] と呼ばれる交叉方法では，親が持つ巡回経路のみを用いて子を生成する．枝組み立て交叉 (Edge Assembly Crossover) [3] と呼ばれる交叉方法では，親が持つ巡回経路を組み合わせて複数の部分閉路を生成し，それらを結合することで子を生成する．こうした交叉により生成される子は親の要素を十分に引き継ぐことが出来る．しかし，GA には自然界の生物の仕組みに囚われ過ぎていると考えられる部分がある．それは，親として選択する個体数を 2 個体に固定している点である．他にも，探索集団の解空間上で分散した初期配置を交叉により即座に収束させてしまうため，多様な解空間の探索が行えていないという問題点が挙げられる．加えて，突然変異はランダムな経路の入れ替えを繰り返すため，無駄な操作が多く，乱数への依存も強いと考えられる．このように，最適化問題の解法として改善出来る箇所が存在している．

4. 提案手法 (RE)

本研究では，EC の考え方を基に TSP の近似解を高精度かつ高速に求める新たなアルゴリズム，RE を構築した．RE は，既存手法の突然変異に代わり，問題特有の情報である個体の表現型を利用して，探索集団が持ち合わせない新規要素を含む要素集合を生成する．そして，既存手法の交叉に代わり，任意の数の個体や要素集合を参照して新たな個体に進化する．そのため，突然変異は乱数への依存を抑えられ，交叉は自然界の生物の仕組みに囚われない拡張性を有する新たな操作となっている．また，進化する自個体の要素を優先して引き継ぐことで，各個体を中心とした近傍探索を行う．それにより，探索集団の分散した初期配置を活用し，解空間を多様に探索することで解の精度向上を図る．TSP において問題特有の情報は座標空間上の巡回経路であるため，経路の位置関係を利用することで，探索集団が持ち合わせない経路の発見を行う．

RE のアルゴリズムでは，進化する自個体が他個体の巡回経路や複数の経路の集合 (部分経路集合) を参照して新たな個体に進化する．その際，自個体の経路を優先して引き継ぐことで，各個体を中心とした近傍探索が行われる．参照する対象には，探索範囲を拡大させる要素と探索集団が持ち合わせない新規要素を含ませる．そのため，「自個体と解空間上で最も離れた相違個体 (重複する経路数が最も少ない個体) 」と「探索集団内の個体の表現型である巡回経路を利用して生成した部分経路集合」を参照の対象とする．部分経路集合は，進化する自個体と探索集団内の他個体の表現型である巡回経路を利用して，互いの経路と経路の間を座標空間上で探索し，発見した経路より生成される．このとき，互いの経路を方向ベクトルとして扱い，類似した経路を発見する．この操作により生成された部分経路集合は探索集団が持ち合わせない経路を含む可能性があり，GA の突然変異で行われるランダムな経路の入れ替えとは異なり，座標空間上での経路の位置関係や類似性を用いることで，乱数への依存を抑えて新規要素の発見を行うことが出来る．そして，自個体の巡回経路と相違個体と部分経路集合を重ね合わせた経路集合から新たな個体に進化する．以下の Fig.1 は提案手法により個体が進化して探索が行われるイメージを表す．

4.1 RE のアルゴリズム

RE は，以下の i，ii の後 iii ~ viii を繰り返すことにより探索を行う．

i. 初期探索集団の生成

初期探索集団として，m 個の巡回経路を表す個体 X^k $(k=1,\dots,m)$ をランダムに生成する．X_{ij}^k は X^k が都市 i と都市 j 間の経路 ij を通るか否かを 0, 1 で表し，通る場合 1 とする．ここで，i と j は都市番号 $(i,j=1,\dots,n)$，n は都市数である．

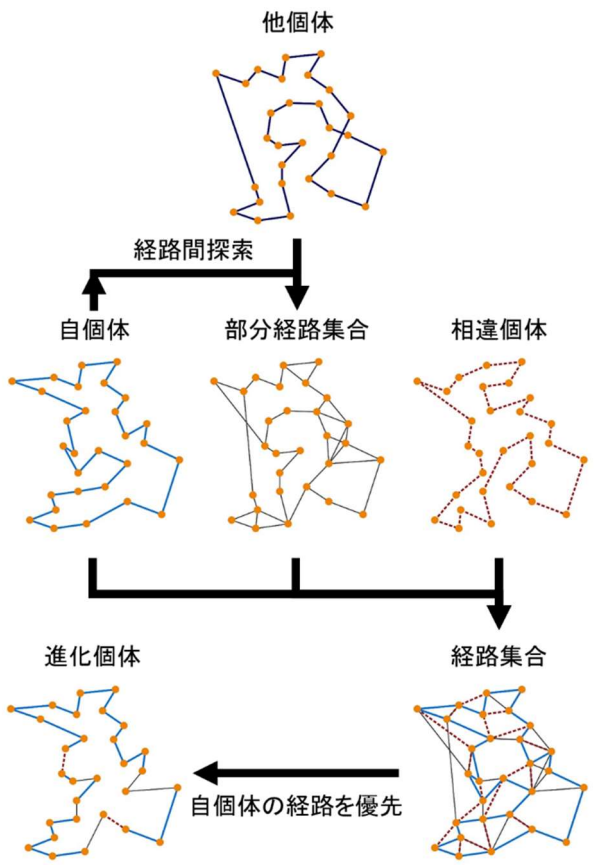

Fig.1 自個体を中心とした進化のイメージ

ii. 評価

各個体の巡回経路を経路長により評価する.

iii. 終了判定

ステップ t が上限ステップ t_{max} に達したとき，探索集団から評価が最も良い個体を選び，解として出力してアルゴリズムを終了する.

iv. 選択個体 X^s の選択

探索集団から無作為に選択個体 X^s を選ぶ.

v. 部分経路集合 V の生成

選択個体 X^s と無作為に選んだ他個体 X^r の巡回経路を利用して，互いの経路と経路の間を座標空間上で探索し，発見した経路より部分経路集合 V を生成する. このとき，互いの経路を方向ベクトルとして扱い，共通した都市を始点とする方向ベクトルから合成ベクトルの計算を行う. 合成ベクトルは，互いの個体の方向ベクトルの終点を結ぶ経路を一定の比率で内分する，互いの経路間の方向を表現する. そして，合成ベクトルと最も類似した経路に報酬を付与する. 報酬が与えられた経路より部分経路集合 V が生成される. この操作により，問題特有の情報 (座標空間上の巡回経路) を利用することで，乱数への依存を抑えて新規要素の発見を行うことが出来る. 以下の 1 ~ 3 に部分経路集合 V の生成の手順を示す.

1. 他個体 X^r の選択

探索集団から無作為に他個体 X^r を選ぶ.

2. 合成ベクトルの計算

X^s と X^r の巡回経路の内，ある都市 l を選択し，その都市を通る経路 X^s_{al} と X^s_{lb} と X^r_{cl} と X^r_{ld} を利用する. ここで，a と b は X^s が都市 l の前後に訪問する都市，c と d は X^r が都市 l の前後に訪問する都市である. 各経路を都市 l が始点，もう一方の都市を終点とする方向ベクトルとして扱い，次式により合成ベクトル $\overrightarrow{v_{l1}}$ ~ $\overrightarrow{v_{l4}}$ を生成する.

$$\overrightarrow{v_{l1}} = F * \overrightarrow{X^s_{la}} + (1-F) * \overrightarrow{X^r_{lc}} \quad (1)$$
$$\overrightarrow{v_{l2}} = F * \overrightarrow{X^s_{la}} + (1-F) * \overrightarrow{X^r_{ld}}$$
$$\overrightarrow{v_{l3}} = F * \overrightarrow{X^s_{lb}} + (1-F) * \overrightarrow{X^r_{lc}}$$
$$\overrightarrow{v_{l4}} = F * \overrightarrow{X^s_{lb}} + (1-F) * \overrightarrow{X^r_{ld}}$$

ここで，F は X^s の比率を示すパラメータである. 例えば，$\overrightarrow{v_{l1}}$ は経路 ac を$(1-F):F$に内分する，互いの経路間の方向を表現している. 以下の Fig.2 は $\overrightarrow{X^s_{la}}$ と $\overrightarrow{X^r_{lc}}$ を$(1-F):F$ に内分する $\overrightarrow{v_{l1}}$ を生成するイメージを表す.

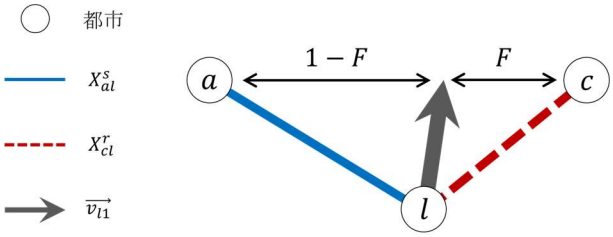

Fig.2 ベクトル生成のイメージ

3. 経路の決定と報酬の付与

合成ベクトルと最も類似した経路を決定して，経路に報酬を付与する. $\overrightarrow{v_{l1}}$ の終点に最も近い都市を都市 u とした場合，都市 l と都市 u 間の経路 lu の報酬 V_{lu} を 1 増加させる. 同様に $\overrightarrow{v_{l2}}$ ~ $\overrightarrow{v_{l4}}$ より報酬の付与を行う. そして，都市 l を他の都市に変更して，全ての都市についても同様に合成ベクトルの計算を行い，経路の決定と報酬の付与を行う. 報酬が与えられた経路より部分経路集合 V が生成される. 以下の Fig.3 は $\overrightarrow{v_{l1}}$ の終点に最も近い都市 u と都市 l 間の経路に報酬を付与するイメージを表す.

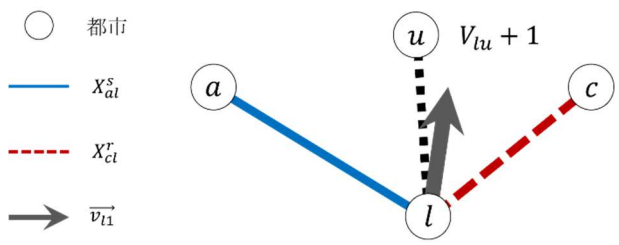

Fig.3 経路の選択と報酬付与のイメージ

vi. 相違個体 X^d の選択

探索集団から X^s と経路の重複が最も少ない相違個体 X^d を選ぶ. X^d は X^s と解空間上で最も離れた個体であり, 参照することで探索範囲を拡大させる要素を効率良く取り入れる.

vii. 進化個体 E の構築

X^s と V と X^d の経路を次式により重ね合わせ，経路集合 G を生成する.

$$G_{ij} = X^s_{ij} + \alpha V_{ij} + \beta X^d_{ij} \quad (2)$$

ここで, α と β は進化個体 E を構築する際に V と X^d の経路を選択する優先度合いを示すパラメータである．このとき，α と β を 1 未満に設定することで E は X^s の近傍探索を行うように構築される．以下の Fig.4 は X^s と V と X^d の経路を重ね合わせ，経路集合 G を生成するイメージを表す．各経路のGの大きさを経路の太さにより表している.

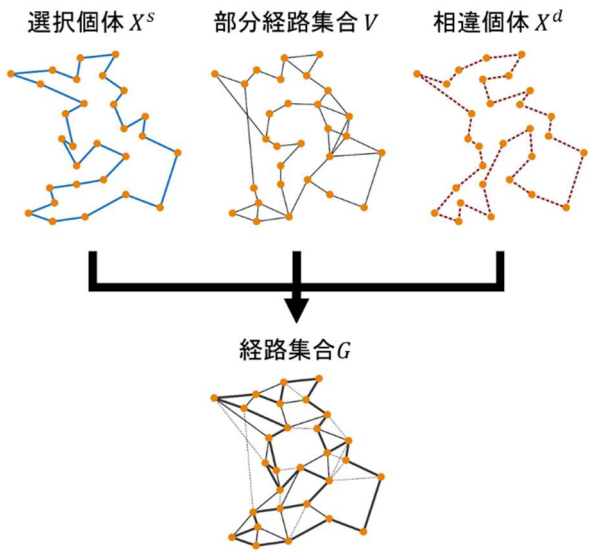

Fig.4 経路集合の生成のイメージ

そして，G に含まれる経路から進化個体 E を構築する．初めに無作為に都市 i を選ぶ．次に，G に含まれる経路を次式の選択確率により選択する.

$$P_{ij} = \frac{w_{ij}}{\sum_{h=1}^{n} w_{ih}} \quad (3)$$

$$w_{ij} = \frac{G_{ij}}{{d_{ij}}^{\gamma}}$$

ここで，d_{ij} は経路 ij の経路長，γ は経路長の影響度合いを示すパラメータである．再び無作為に都市 i を選び直し, 経路の選択を繰り返すことでの巡回経路を構築する．このとき，新規要素を取り入れる V と探索範囲を拡大させる X^d が探索を多様化させる．また，G に含まれる経路から選択不能な場合，例外処理として一時的に TSP の制約条件を満たす全ての経路の重み w_{ij} を次式により定義することで，G に含まれない経路を選択する.

$$w_{ij} = \frac{1}{{d_{ij}}^{\gamma}} \quad (4)$$

viii. 更新

X^s より E の評価が良い場合, X^s を E で更新する．そして，$t \leftarrow t+1$ として iii へ戻る.

5. 評価実験

5.1 既存手法との性能比較

TSPLIB [4] に掲載されているベンチマーク問題 (都市数 51, 70, 100 の問題) を用いて既存手法と性能比較を行い，提案手法の有用性を確認した．比較に用いた手法は，GA の交叉方法に枝交換交叉を用いた手法 [2] と ACO の一種である MAX-MIN Ant System に記憶領域を導入した手法 [6] である．条件を平等にするため，すべての手法の個体数は問題の都市数と同数とし，ACO の記憶領域は近似アルゴリズムによる初期化を行わない．提案手法のパラメータは予備実験より様々な問題に対して解を高精度に求めることが出来た値，$F = 0.3$, $\alpha = 0.005$, $\beta = 0.1$, $\gamma = 2$ とし，t_{max}は問題毎に探索集団が十分に収束可能な値に決定した．その結果を以下の Table1 に示す．Table1 の opt は厳密解到達回数 / 試行回数, error rate は最良解の平均値が厳密解から離れている割合である．Table1 の opt と error rate より，全ての問題において提案手法は既存手法よりも高精度な解が求まることが確認された．これは，提案手法が各個体を中心とした近傍探索を行うことで，探索集団の多様性を維持しつつ探索が進行し，局所解に囚われなかったからであると考えられる.

Table1：既存手法との性能比較

	GA		ACO		RE	
問題	opt	error rate (%)	opt	error rate (%)	opt	error rate (%)
eil51	21 / 200	0.9120	74 / 200	0.2324	200 / 200	0.0000
st70	18 / 200	1.0193	124 / 200	0.2637	200 / 200	0.0000
kroA100	0 / 200	4.8823	132 / 200	0.0767	200 / 200	0.0000

そこで，error rate に対する探索集団の経路の種類数 (kind of edge) を GA と比較した．提案手法と GA で eil51 を解いた一試行の error rate に対する edge を一定 step 刻みでプロットした結果を Fig.5 に示す．Fig.5 より提案手法は GA よりも探索集団の経路の種類数が多く，多様な個体が保たれていることが確認された．

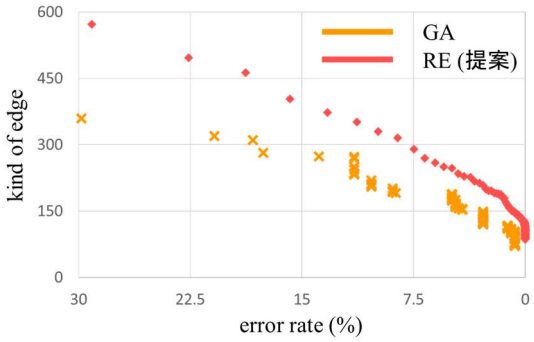

Fig.5 探索集団の経路の種類数の比較

また，探索の進行具合に対して選択個体，部分経路集合，相違個体の経路を重ね合わせた経路集合の有効性を確認する．そのため，提案手法で eil51 を解いた一試行の error rate に対する厳密解に含まれる経路を含んでいる割合 (cover rate) を Fig.6 に示す．Fig.6 より，探索の序盤において青線で示されたの cover rate は約 40%であり，黒線で示された X^s と V と X^d を重ね合わせた経路集合の cover rate は約 90%である．このことより，探索を多様化させることに有効であることが確認された．

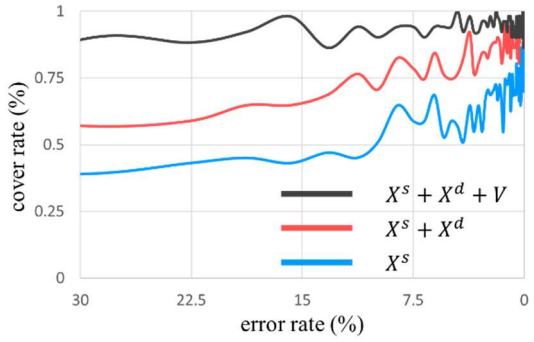

Fig.6 経路集合の cover rate の変化

加えて，提案手法と GA で eil51 を解いた一試行に掛かる時間 (time) に対する error rate を Fig.7 に示す．Fig.7 より全ての時間帯において赤線で示された提案手法は黄線で示された GA よりも高精度な解を求められている．このことより，GA よりも高速に解を求めることが出来ることが確認された．

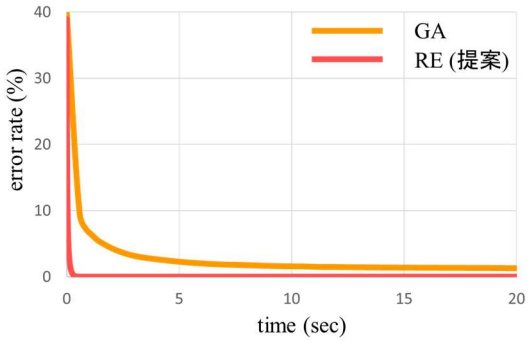

Fig.7 最良解の時間推移の比較

5.2 ベンチマーク問題 (33 種類) に対する性能

5.1 節の比較実験に加えて，TSPLIB に掲載されているベンチマーク問題 (都市数 48~1084 の問題から 33 種類) を用いて，様々な問題に対する提案手法の性能を確認した．提案手法の個体数は 100 に固定し，それ以外のパラメータは 5.1 節の比較実験と同様である．d493, rat575, u724, rat783, vm1084 は 10 試行，それ以外の問題を 50 試行した結果を以下の Table2 に示す．Table2 の opt は厳密解到達回数 / 試行回数，error rate は最良解の平均値が厳密解から離れている割合，step は最良解に到達したステップ数の平均である．Table2 の error rate より，提案手法が求めた解は fl417 以外の問題において厳密解から 0.1% 以内収まっており，精度の高い解が求まることが確認された．しかし，問題規模の増加に対して探索に掛かる step の増加が大きいことが確認され，解を高速に求める工夫が必要であると考えられる．

ⓒ 2017 Information Processing Society of Japan

Table2：ベンチマーク問題に対する性能確認

問題	opt	error rate (%)	step
att48	50 / 50	0.0000	7034.9
eil51	50 / 50	0.0000	5354.1
berlin52	50 / 50	0.0000	3548.5
st70	50 / 50	0.0000	12242.2
eil76	50 / 50	0.0000	10647.4
pr76	50 / 50	0.0000	13158.9
rd100	50 / 50	0.0000	13934.4
kroA100	50 / 50	0.0000	9985.3
eil101	50 / 50	0.0000	26519.1
lin105	50 / 50	0.0000	7613.9
ch130	50 / 50	0.0000	60817.8
ch150	50 / 50	0.0000	20862.2
kroA150	50 / 50	0.0000	32039.1
pr152	50 / 50	0.0000	18094.5
u159	50 / 50	0.0000	16617.9
rat195	48 / 50	0.0086	51202.7
d198	50 / 50	0.0000	84208.2
kroA200	49 / 50	0.0010	91307.1
tsp225	50 / 50	0.0000	125159.5
pr226	50 / 50	0.0000	28293.2
pr264	50 / 50	0.0000	10584.9
a280	50 / 50	0.0000	41978.7
pr299	50 / 50	0.0000	214707.2
lin318	40 / 50	0.0147	579555.2
rd400	38 / 50	0.0016	1573674.4
fl417	13 / 50	0.2875	445076.2
pr439	7 / 50	0.0207	546381.9
pcb442	48 / 50	0.0005	1210663.8
d493	0 / 10	0.0203	3550369.8
rat575	0 / 10	0.0207	3399357.1
u724	1 / 10	0.0153	6557827.0
rat783	7 / 10	0.0068	5838690.1
vm1084	0 / 10	0.0484	6213339.9

6. おわりに

本研究では, EC の考え方を基に TSP の近似解を高精度かつ高速に求める新たなアルゴリズム，RE を構築した．そして，既存手法との性能比較を行うことによりベンチマーク問題の高精度な解が高速に求まることを確認した．しかし，指数的に解空間が複雑になる大規模な問題を解くためには，探索に掛かる step を抑える必要がある．

今後の課題として，個体数や他個体の優先度合いなどのパラメータの調整，新しい経路を発見するための報酬の付与方法の検討が挙げられる．また，本研究では選択個体と他個体の経路と経路の間を座標空間上で探索し，発見した経路より生成された部分経路集合と解空間上で選択個体から最も離れた相違個体を参照したが，提案手法は任意の数の個体や要素集合を参照して扱うことが出来る拡張性を有するため，参照する対象について検討余地がある．

また，TSP 以外の最適化問題においても，個体の表現型から新規要素を含む要素集合を生成し，任意の数の個体や要素集合を参照することで新たな個体に進化出来るように一部の操作を置き換えたとき，本研究のアルゴリズムが有効であるか確認したいと考えている．

参考文献

[1] J. H. Holland，“Adaptation in Natural and Artificial Systems”, The MIT Press (1975)
[2] 前川景示，玉置久，喜多一，西川禕一，“遺伝アルゴリズムによる巡回セールスマン問題の一解法”，計測自動制御学会論文集，Vol.31，No.5 (1995)
[3] 永田裕一，小林重信，“巡回セールスマン問題に対する交叉：枝組み立て交叉の提案と評価”，人工知能学会誌，Vol.14，No.5，pp.848-859 (1998)
[4] TSPLIB http://comopt.ifi.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/
[5] 柳浦睦憲，茨木俊秀，“組合せ最適化：メタ戦略を中心として”，朝倉書店 (2001)
[6] 磯崎敬志，穴田一，“記憶した最適解を参照する MAX-MIN Ant System による巡回セールスマン問題の解法”，電子情報通信学会論文誌，Vol.J100-D，No.7，pp.1-9 (2017)

ⓒ 2017 Information Processing Society of Japan