

巡回セールスマン問題に対する新たなアルゴリズム Referential Evolution

佐藤豊浩^{†1} 穴田一^{†1}

概要 : 進化的アルゴリズムは、生物の個体群の進化をモデル化したアルゴリズムで、最適化問題の解探索に用いられる。そうしたアルゴリズムである Genetic Algorithm と Differential Evolution が有する解探索過程を収束性と多様性の観点から取り入れた、巡回セールスマン問題 (TSP) の解探索を行う新たなアルゴリズム Referential Evolution を構築した。そして、TSPLIB に掲載されているベンチマーク問題を用いて提案手法と既存手法を比較し、その有効性を確認した。

キーワード : 巡回セールスマン問題, TSP, 進化的アルゴリズム

A New Algorithm named Referential Evolution for Traveling Salesman Problem

TOYOHIRO SATO^{†1} HAJIME ANADA^{†1}

1. 研究背景

代表的な最適化問題である巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem 以降 TSP) は、配送計画やスケジューリングなどの現実問題に直結しているため重要性が高い問題とされている。この問題は、規模が増大すると解候補数が爆発的に増加するため、厳密解を現実的時間内で網羅的に求めることが困難とされる。そのため近似解を高精度かつ高速に探索するアルゴリズムの研究が行われている。そうした研究に、個体群の進化をモデル化した進化的アルゴリズムがある。Genetic Algorithm (以降 GA) と Differential Evolution (以降 DE) は、様々な最適化問題に対して優れた解探索過程を有する進化的アルゴリズムであるが、TSP の解を高精度で探索するには工夫を必要とする[1]。本研究では進化的アルゴリズムである GA と DE が有する解探索過程を収束性と多様性の観点から取り入れた、TSP の解探索を行う新たなアルゴリズム Referential Evolution (以降 RE) を構築した。そして、TSPLIB [2]に掲載されているベンチマーク問題を用いて提案手法と既存手法を比較し、その有効性を確認した。

2. Traveling Salesman Problem

TSP とは、複数の都市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、最初の都市へ戻るときの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。この問題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、

都市数が増えると解候補数は爆発的に増加し、網羅的に厳密解を求めることが困難になる。そのため、近似解を高精度かつ高速に探索するアルゴリズムの研究が行われている。

3. 進化的アルゴリズム

3.1 Genetic Algorithm

GA は、1975 年に提案された生物の進化をモデル化したアルゴリズムである。このアルゴリズムでは、問題の解候補に対応した遺伝子を持つ個体が交叉、突然変異することで次世代の個体を生成する。その際、問題の目的関数に対応した適合度の高い個体が持つ遺伝子を優先して次世代に引き継ぎ、個体群を優れた遺伝子に収束させる。

3.1.1 GA の解探索過程

以下に一般的な GA の解探索過程を示す。

- i. 初期個体群の生成
初期個体群として、問題の解候補に対応した遺伝子を持つ個体をランダムに複数生成する。
- ii. 評価
問題の目的関数に対応した適合度を用いて、全個体を評価する。
- iii. 終了判定
世代数が予め設定した終了世代数に達したとき、最も適合度の高い個体を解として解探索を終了する。

^{†1} 東京都市大学
Tokyo City University

iv. 選択

個体群から対となる二個体を複数選択し、親とする。例えば、適合度を用いて確率的に個体を選択するルーレット選択などの方法がある。

v. 交叉

選択された両親の遺伝子を掛け合わせて子を生成する。例えば、両親の遺伝子をある一点で区切り入れ替える一点交叉などの方法がある。

vi. 突然変異

突然変異確率に従い、子の遺伝子を一部変化させる。

vii. 世代交代

生成された子を次世代の個体群に加え、その個体群のみを残して、世代数を増やし、iiに戻る。

3.1.2 TSP に対する GA

GA を TSP に対して用いる際、交叉、突然変異により TSP の制約条件を満たさない個体が生成される場合がある。例えば、個体が持つ遺伝子を都市の巡回順に対応させ、図 1 のように両親の遺伝子を真ん中で区切り入れ替える一点交叉により子を生成した際、訪問しない都市が存在する個体が生成される。このような個体は、TSP の制約条件を満たさないため解として適切ではない。そのため GA を TSP に対して用いる際には、遺伝子の表現方法や解探索過程を工夫する必要があり、そうした研究は数多く行われている[1].

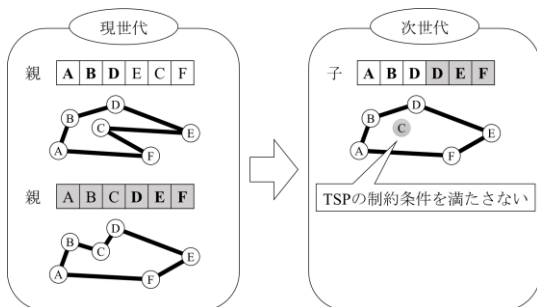


図 1 : TSP に対して GA を用いる例

都市 A, B, C, D, E, F を通る巡回経路を遺伝子に持つ両親から一点交叉により子を生成した。その際、都市 D を重複して訪問し、都市 C を訪問しない個体が生成された。この個体は、TSP の制約条件を満たさないため解として適切ではない。

3.2 Differential Evolution

DE は、問題の解候補に対応した変数を持つ個体間の位置関係によるベクトル差分を利用し、解探索を行うアルゴリズムである。このアルゴリズムは、関数最適化問題において目的関数値、探索効率、アルゴリズムのロバスト性の項目で優れた性能を発揮する[3]。しかし、組み合わせ最適化問題には対応していない。

3.2.1 DE の解探索過程

以下に一般的な DE の解探索過程を示す。

i. 初期個体群の生成

初期個体群として、問題の解候補に対応した変数を持つ個体をランダムに複数生成する。

ii. 評価

問題の目的関数に対応した評価関数を用いて、全個体を評価する。

iii. 終了判定

ステップが予め設定した終了ステップに達したとき、最も評価の高い個体を解として解探索を終了する。

iv. 突然変異個体の生成

全個体に対して、突然変異個体を生成する。まず、個体群からランダムに三個体を選択する。その内の二個体の位置関係からベクトル差分を計算する。そして、残りの一個体に定数倍したベクトル差分を加えることで突然変異個体を生成する。個体 1, 2, 3 から突然変異個体を生成する例を次の図 2 に示す。このとき、選択した個体 2, 3 の位置関係により解探索の方向性を決定する。位置関係は個体の選び方により複数存在するため、解探索の多様性を維持することができる。

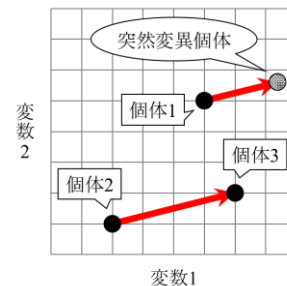


図 2 : 突然変異個体の生成例

個体 1, 2, 3 から突然変異個体を生成する際、個体 2, 3 の位置関係からベクトル差分を計算する。ベクトル差分は、図内の赤色の矢印である。そして、個体 1 に定数倍したベクトル差分を加え、突然変異個体を生成する。

v. 交叉

対となる個体と突然変異個体を親として、両親を掛け合わせて子を生成する。これを、全個体に対して行う。まず、変数毎に乱数を発生させる。乱数が予め設定した突然変異個体の遺伝確率以下の場合、突然変異個体が持つ変数値を子が引き継ぎ、そうでない場合はもう一方の親が持つ変数値を引き継ぐ。そして、全ての変数について親の変数値が子に引き継がれる。

vi. 世代交代

評価関数による子の評価が親より高い場合、親を子で置き換える。これを全ての個体について行い、ステップを増やして ii に戻る。

4. Referential Evolution

本研究では進化的アルゴリズムの考え方をを用いて、TSPの解を探索する新たなアルゴリズム Referential Evolution を構築した。その際、既存手法である GA と DE が有する解探索過程を収束性と多様性の観点から取り入れた。

既存手法である、GA が個体群を優れた遺伝子に収束させる要因には、選択と交叉における、適合度の高い個体が持つ遺伝子を優先して次世代に引き継ぐことが挙げられる。また、DE が解探索の多様性を維持する大きな要因として、突然変異個体の生成における、複数存在する個体の位置関係により解探索の方向性を決定することが挙げられる。

提案手法は、個体が他個体を参照して進化するアルゴリズムである。参照する個体は、解空間上での距離が最も離れた個体と新たに生成する個体であり、解探索の多様性と個体群の収束性を与える。そして、参照した個体を持つ遺伝子を掛け合わせることで新たな個体を生成して解探索を行う。個体1が個体2, 3を参照して進化し、解探索を行うイメージを次の図3に示す。

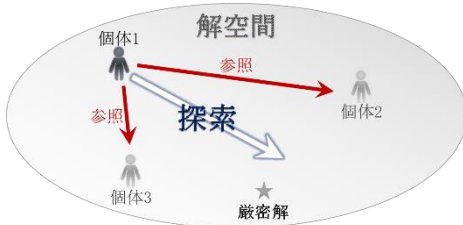


図3：REの解探索イメージ

個体1が解空間上で最も離れた個体2と新たに生成された個体3を参照する。そして、個体1が参照した二個体の間の方向に進化し解探索を行う。

4.1 REの解探索過程

以下にREの解探索過程を示し、流れを付録に示す。

i. 初期個体群の生成

初期個体群として、TSPの条件を満たすランダムな巡回経路を遺伝子を持つ個体 X^k を m 個生成する。個体 X^k が持つ遺伝子 X_{ij}^k は、個体が都市 i と都市 j 間の経路 ij を巡回する場合に1、それ以外は0の値をとる。ここで、 k は個体番号($k = 1, \dots, m$)、 m は個体数、 i と j は都市番号($i, j = 1, \dots, n$)、 n は問題の都市数である。

ii. 評価

次式の評価関数 $f(X^k)$ より、全個体を評価する。

$$f(X^k) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \{d_{ij} * X_{ij}^k\} \quad (1)$$

ここで、 d_{ij} は都市 i と都市 j 間の経路 ij の距離である。評価関数の値は個体を持つ遺伝子が表現する巡回経路の総距離であり、低い値ほど優秀な個体となる。

iii. 終了判定

ステップ t が予め設定した最大進化回数 t_{max} に達し

たとき、評価関数の値が最も低い個体を解として解探索を終了する。

iv. 選択個体 X^c の選択

個体群からランダムに個体を選択して選択個体 X^c とする。

v. 相違個体 X^d の選択

個体群から X^c と遺伝子の重複が最も少ない個体を選択して相違個体 X^d とする。 X^k と X^c の重複数 dup^{kc} は次式により表される。

$$dup^{kc} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \{X_{ij}^k * X_{ij}^c\} \quad (2)$$

vi. 突然変異個体 M の生成

初めに、個体群からランダムに個体を選択しランダム個体 X^r とする。

次に、 X^c と X^r が持つある都市 l を含む遺伝子 X_{al}^c, X_{lb}^c と X_{cl}^r, X_{ld}^r を利用して一部の経路に報酬を与える。ここで、 a, b は X^c が都市 l の前後に訪問する都市、 c, d は X^r が都市 l の前後に訪問する都市である。そして、各遺伝子を都市 l が始点、もう一方の都市が終点の位置座標とする方向ベクトルとして扱い、次式で合成ベクトル \overline{Ve}_l を四本生成する。

$$\begin{aligned} \overline{Ve}_{l1} &= F * \overline{X}_{la}^c + (1-F) * \overline{X}_{lc}^r \\ \overline{Ve}_{l2} &= F * \overline{X}_{la}^c + (1-F) * \overline{X}_{ld}^r \\ \overline{Ve}_{l3} &= F * \overline{X}_{lb}^c + (1-F) * \overline{X}_{lc}^r \\ \overline{Ve}_{l4} &= F * \overline{X}_{lb}^c + (1-F) * \overline{X}_{ld}^r \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、 F は X^c の比率を表し、 $[0,1]$ の範囲で予め設定する。この合成ベクトルは、二個体を持つ経路の間の方向を表す。また、予め設定した確率 r で \overline{Ve}_l の生成方法を次式に変更する。

$$\begin{aligned} \overline{Ve}_{l1} &= -F * \overline{X}_{la}^c - (1-F) * \overline{X}_{lc}^r \\ \overline{Ve}_{l2} &= -F * \overline{X}_{la}^c - (1-F) * \overline{X}_{ld}^r \\ \overline{Ve}_{l3} &= -F * \overline{X}_{lb}^c - (1-F) * \overline{X}_{lc}^r \\ \overline{Ve}_{l4} &= -F * \overline{X}_{lb}^c - (1-F) * \overline{X}_{ld}^r \end{aligned} \quad (4)$$

この場合、これらの合成ベクトルは、式(3)とは反対の方向を表す。合成ベクトル生成のイメージを次の図4に示す。

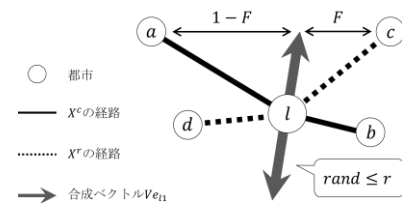


図4：合成ベクトル生成のイメージ

X^c と X^r が持つ遺伝子 X_{al}^c と X_{cl}^r を都市 l が始点、もう一方の都市が終点の位置座標とした方向ベクトル \overline{X}_{la}^c と \overline{X}_{lc}^r として扱い、二つの方向ベクトルを F 対 $1-F$ に内分する合成ベクトル \overline{Ve}_{l1} を生成する。

続いて、各合成ベクトルの終点に最も近い都市と始点の都市間の経路に報酬を与える。ある $\overline{V_{e_i}}$ に最も近い都市を都市 u としたとき、経路報酬 V_{lu} の値を γ 増加させる。ここで、 γ は経路に与える報酬量であり、予め設定する。四本の $\overline{V_{e_i}}$ から報酬を与えた後、都市 l を変えて、同様に他の全ての都市についても合成ベクトルを生成して経路に報酬を与える。

そして、先ほど与えた経路報酬と経路の距離を重みとするルーレット選択により突然変異個体 M を生成する。現在いる都市を i 、次に訪問する都市を j として、ルーレット選択による経路 ij の選択確率 p_{ij} を次式で表す。

$$p_{ij} = \frac{w_{ij}}{\sum_{h=1}^n w_{ih}} \quad (5)$$

$$w_{ij} = \frac{1 + \gamma V_{ij}}{d_{ij}^2}$$

ここで、 w_{ij} は経路 ij の重みである。このとき、経路の選択確率は経路の距離が短いほど高く、 X^c と X^r が持つ遺伝子を利用して与えた報酬の値が大きいほど高くなる。このように生成された突然変異個体は、二個体の間を解空間上で探索する。そのため、個体群に存在しない遺伝子を持つ可能性がある。

vii. 進化個体 E の生成

初めに、 X^c と X^d と M の遺伝子を掛け合わせ、経路集合 G を次式により生成する。

$$G_{ij} = X_{ij}^c + \alpha X_{ij}^d + \beta M_{ij} \quad (6)$$

ここで、 α 、 β は X^d 、 M の遺伝子の遺伝しやすさである。

次に、先ほど求めた経路集合と経路の距離を重みとするルーレット選択により選択個体 X^c の進化個体 E を生成する。現在の都市を i 、次に訪問する都市を j として、ルーレット選択による経路 ij の選択確率 P_{ij} を次式で表す。

$$P_{ij} = \frac{W_{ij}}{\sum_{h=1}^n W_{ih}} \quad (7)$$

$$W_{ij} = \frac{G_{ij}}{d_{ij}^2}$$

ここで、 W_{ij} は経路 ij の重みである。 E を生成するとき、 X^d の遺伝子が広範囲の探索、 M の遺伝子が探索群の多様化の役割を果たす。

viii. 更新

式(1)を用いて、 $f(E) < f(X^c)$ の場合 X^c を E で更新する。そして $t \leftarrow t + 1$ として ii)に戻る。

5. 評価実験

5.1 提案手法と既存手法の比較

GA の交叉と突然変異に枝交換交叉[4]と 2-opt 法を用いた、既存手法である GA-EXX と提案手法を比較し性能を確

認した。問題は TSPLIB に掲載されている 51 都市問題 (eil51), 76 都市問題 (eil76), 100 都市問題 (kroA100), 150 都市問題 (kroA150), 280 都市問題 (a280) を解いた。提案手法のパラメータは、予備実験により m は問題毎の都市数と同数、 t_{max} は問題毎の収束に十分なステップ、 F は 0.3、 r は 0.5、 γ は 1.0、 α は 0.25、 β は 0.5 と設定した。GA-EXX と RE により各問題を 50 試行した結果を表 1 に示す。ただし、a280 は提案手法のみ 20 試行した結果である。この表より、厳密解到達率、平均値、標準偏差を調べた結果、全ての問題において RE は GA-EXX より高精度の解が求めることが確認できた。また、GA-EXX が厳密解に到達できない規模の問題に対しても高い厳密解到達率を示した。

表 1: 各問題の結果

問題		GA-EXX	RE	
eil51	厳密解到達率	0.30	0.98	
	optimum			
	平均値	428.96	426.02	
426	標準偏差	3.00	0.14	
	eil76			
	厳密解到達率	0.16	1.00	
optimum	平均値	544.10	538.00	
	538	標準偏差	4.99	0.00
		kroA100		
厳密解到達率		0.00	1.00	
optimum	平均値	21351.30	21282.00	
	21282	標準偏差	37.01	0.00
		kroA150		
厳密解到達率		0.00	0.92	
optimum	平均値	29098.00	26533.10	
	26524	標準偏差	426.34	39.31
		a280		
厳密解到達率		---	1.00	
optimum	平均値	---	2580.00	
	2580	標準偏差	---	0.00

5.2 厳密解カバー率の推移

提案手法を用いた kroA100 の解探索における、選択個体 X^c 、相違個体 X^d 、突然変異個体 M の厳密解カバー率を確認した。厳密解カバー率とは、問題の厳密解を構成する経路を個体が含む割合である。ステップ経過に伴う X^c 、 X^c と M 、 X^c と M と X^d による厳密解カバー率の推移を次の図 5 に示す。この図より、探索序盤の 2000step 付近において X^c のみの厳密解カバー率は 60%程度であるが、 M を参照することで 80%程度、さらに加えて X^d を参照することで 90%程度まで厳密解をカバーできていることが確認できた。そのため、探索序盤から広範囲の解探索を行えると考えられる。さらに、探索終盤の 3000step 付近まで三本の折れ線グラフに差が見られ、 M と X^d を参照した効果が持続的に確認された。

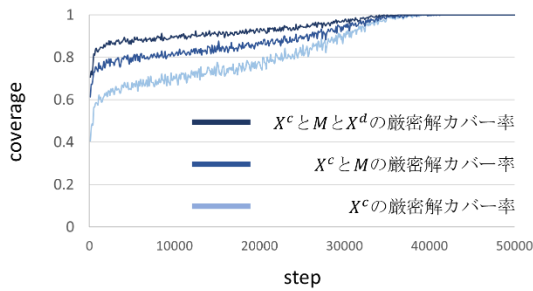


図 5：厳密解カバー率の推移

kroA100 の厳密解を構成する経路のカバー率はステップの経過に伴い上昇する。また、 X^c が M を参照すると上昇し、さらに加えて、 X^d を参照すると上昇する。

6. 今後の課題

本研究では提案手法の有効性を解の精度より確認することができた。今後の課題として、さらに大規模な問題に対する精度の確認、計算時間についての検証などが挙げられる。また、他個体を参照することで探索序盤から高い厳密解カバー率を保持することが確認できたので、迅速に個体群がその厳密解カバー率に近づくよう、進化個体の生成方法やパラメータの調整方法を検討し、探索性能の向上を目指す。

参考文献

- [1] 山村雅幸, 小野貴久, 小林重信: “形質遺伝を重視した遺伝的アルゴリズムに基づく巡回セールスマン問題の解法”, 人工知能学会誌, Vol.7, No.6, pp.1049-1059(1992)
- [2] TSPLIB, <http://comopt.ifl.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/>
- [3] 北山哲士, 酒井忍, 荒川雅生, 山崎光悦: “大域最適化法としての Differential Evolution と数値計算”, 日本機械学会論文集(C編), 76 巻 771 号(2010-11)
- [4] 前川 景示, 玉置 久, 喜多 一, 西川 禎一, “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).

付録

付録 A.1 RE の全体的な流れ

