人　工　知　能　86－8
（1993. 1. 21）

ルールベースを用いた シミュレーティッド・アニーリングの 高速化手法

野島 晋二　　加藤 等　　荒木 均
舘野 峰夫　　間藤 隆一
松下電器産業（株） 東京情報システム研究所

本報告では、組合せ最適化問題を高速に解く近似解法であるルールベースト・アニーリング法の収束特性について述べる。シミュレーティッド・アニーリング法では、ランダムに行なっていた探索を、この方法では、ルールベースを用いて行なうことにより、処理の高速化を実現している。また、この方法に対して、最適解への収束特性を明らかにする。

Simulated Annealing with Heuristic Rules

Shinji Nojima　Hitoshi Kato　Hitoshi Araki
Mineo Tateno　Ryuuichi Mato

Tokyo Information System Research Lab.
Matsushita Electric Industrial Co., Ltd.

We present Rule-Based Annealing algorithm and mathematical model of the algorithm to solve combinatorial optimization problems. The algorithm searches optimum solution using heuristic rules. Therefore the algorithm can realize high-speed searches. And we clarify a characteristic of asymptoic convergence.

1　まえがき

近年、VLSI の大規模化、集積度の飛躍的な向上に伴い大規模な組合せ最適化問題を高速に解決する手法が切望されている。その中で、シミュレーティッド・アニーリング法（以下、SA 法）[1] は大域的な最適解に近い良好な解を得ることができる組合せ最適化手法として注目されている。

しかし、SA 法で良好な解を得るためには膨大な処理時間を必要とし、実際の設計問題への適応に対して大きな障害となっている [2]。そのため、より高速に良好な解を得るために、温度スケジュールの最適化 [2] や並列処理による高速化 [3] など、SA 法をもとに処理速度を高速化する研究が数多くなされている。

本報告では、良好な解を SA 法よりも高速に得るための手法であるルールベースト・アニーリング法 [4]（以下、RA 法）の収束性について考察する。SA 法ではランダムな変換により探索を繰り返している。そのため、効率的な解の改善を行なうことができず、処理速度が遅くなってしまう。そこで、RA 法では変換をランダムに行なうのではなく、その最適化問題に適した変換規則を用いて変換を行なうことにより、効率的な解の改善を行ない処理を高速化している。

本報告は、まず、SA 法の動作とその収束性を示す。次に、RA 法のアルゴリズムを示し、その最適解への収束条件を明らかにする。最後に、例題により RA 法の高速性を確認する。

2　SA 法

SA 法の原理は統計熱力学の“焼き鈍し”とのアナロジーに基づいている。結晶の成長過程などで、温度を高温から徐々に低温に下げることにより均一な結晶構造を得ることができるように、SA 法においても十分にゆっくりと温度を下げることにより最適な状態を得ることができる。以下にその動作を述べる。

SA 法では、現在の状態から次の状態の候補をランダムに生成し、コストと呼ばれる状態の評価値と温度パラメータより、次の状態として受理するかどうかを決定する。温度が高いときには、生成された状態は確率 1 で受理され、温度が下がるにしたがい現在の状態のコストより低いコストの状態のみが受理され、低いコストの状態ほど分布確率が高くなる。

一般に組合せ最適化問題では、局所的な最適解が無数に存在している。そのため、SA 法において温度の変化が急激すぎると、局所的最小解から抜け出す確率が急激に低くなり、相当数の変換をおこなわないと定常確率分布に達することができなくなる。逆に、十分にゆっくりと温度を減少させていけば、どのような、局所的最適解からも抜けでることができ、確率 1 で最適な状態に到達することができる [1]。従って、厳密に最適な解を求めるためには、非常に膨大な数の変換をしなければならず、実際面では、ある程度早く温度を減少させて近似的な最適解を得ている。

次に、SA 法が最適解へ収束するための条件を示す

2.1　SA 法の最適解への収束条件

まず、マルコフ連鎖における規約性と非周期性、再帰性を示す。

一般に、SA 法において、k 番目の状態が i のときに、$(k+1)$ 番目の状態が j である確率は

次式で示される。

$$Prob\{X_{k+1}=j|X_k=i\}=P_{ij}=G_{ij}A_{ij} \tag{1}$$

ただし、G_{ij} は i から j を生成する確率、A_{ij} は i から j の推移で j を受理する確率である。状態数を n とし、行列を用いて表すと、次の状態推移行列の形に表すことができる。

$$\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12}A_{12} & \cdots & G_{1n}A_{1n} \\ G_{21}A_{21} & G_{22} & \cdots & G_{2n}A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{n1}A_{n1} & G_{n2}A_{n2} & \cdots & G_{nn} \end{pmatrix} \tag{2}$$

n 回の推移で、状態 i から状態 j にいく確率を $P_{ij}^n=Prob\{X_{n+m}=j|X_m=i\}$ で表すと、次式が成り立つときにマルコフ連鎖は規約であるという。

$$\{\forall i,j\exists n|P_{i,j}^n>0\} \tag{3}$$

また、同様に、mg を最大公約数とすると、次式が成り立つときは非周期的であるという。

$$\begin{aligned}&\{mg(n)=1,\forall i,l,n\geq 1|\\&prob\{X_{l+n}=i|X_l=i\}>0\}\end{aligned} \tag{4}$$

また、次式が成り立てば再帰的という。

$$\sum_{n=1}^{\infty}P_{ii}^n=1:\forall i \tag{5}$$

SA 法では、マルコフ連鎖が規約で非周期的かつ再帰的であれば、定常確率分布

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{xP} \tag{6}$$

が存在し、受理関数を

$$A_{ij}=\begin{cases} e^{-\frac{c(j)-c(i)}{T}} & \text{if}\, c_j-c_i>0 \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{7}$$

とすると、定常分布 $\boldsymbol{x}$ は

$$x_i=\frac{\exp(-c(i)/T)}{\sum_{x_j}\exp(-c(j)/T)} \tag{8}$$

によって与えられる [2]。S_{opt} を最適な状態の集合とし、温度 T を零に十分ゆっくりと近づけていくと

$$\sum_{x\in S_{opt}}x_i=1 \tag{9}$$

が得られ、最適解への収束が保証されている [2]。

3 RA 法のアルゴリズム

SA 法は、そのときの温度に応じて高いコストの状態に推移する確率を決定し、最適解への収束を保証している。しかし、推移する確率を受理関数のみで決定しているため、温度が低くなるに従い受理されない無駄な変換が多くなってしまう。

RA 法の基本的な概念は、状態の生成をランダムに行なうのではなく、その組合せ最適化問題を解くための知識（ルール）を用いることにより、コストの低い状態を生成しやすくし、無駄な状態の生成を減少させることにある [4]。

RA 法のアルゴリズムを以下に示す。

```
Rule_Based_Annealing(){
温度 T の初期設定;
状態 i の初期設定;
ルール選択比率 R の初期設定;
  while(温度が十分に小さくなっていない) {
    while(十分な回数繰り返していない) {
      ルール k を選択比率 R に基き選択する;
      ルール k で次の状態候補 j を生成する;
      コスト差 Δc = c(j) − c(i) を計算する;
      乱数 r(0 ≤ r ≤ 1) を生成する;
      受理関数 y = A_ij を計算する;
      if(y > r)
        j を次の状態として受理する;
      else
        状態 i を変えない;
    }
  温度を少し下げる;
  ルールの選択比率 R を更新する;
  }
}
```

SA 法のアルゴリズムとの違いは変換をランダムに行なうのではなく、ルールを用いることにより次の状態の生成確率を変化させることとそのルールの適用比率を温度毎に変化させていることである。ルールは数種類用意しその適用を、ある確率分布に基づいておこなっている。その確率分布は温度毎に更新され、その温度に適したルールを適用する確率を高くすることができる。

4 RA 法の最適解への収束条件

RA 法においても、適切な生成行列をもちいて十分ゆっくりと温度を減少させれば最適解への収束を保証することができる。RA 法では、SA 法に比べかなり高速に最適解へ収束することができるが、その理論的な考察を現在準備中の論文に掲載予定である。

以下に、RA 法が収束するための生成確率の条件、温度の減少速度を示す。

4.1 収束の証明

RA 法と SA 法の推移行列の違いは SA 法では生成行列が一変換で生成できる範囲で一様なのに対し RA 法では、任意の生成行列を考えなければならない。そこで、ここでは SA 法を含む、より一般的な形で RA 法の収束条件を与える。

[定理 1] 状態遷移行列$\boldsymbol{P}$が規約で非周期的かつ再帰的ならば、$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{P}$ 式を満たす定常確率分布$\boldsymbol{x}$は次式で与えられる。

$$x_i = \frac{\mathrm{adj}\boldsymbol{P}'_{ni}}{\det \boldsymbol{P}'} \tag{10}$$

ただし、$\boldsymbol{P}'$ は

$$\boldsymbol{P}' = \begin{pmatrix} G_{11}-1 & \cdots & G_{n-1,1}A_{n-1,1} & G_{n1}A_{n1} \\ G_{12}A_{12} & \cdots & G_{n-2,1}A_{n-2,1} & G_{n2}A_{n2} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ G_{1n-1}A_{1n-1} & \cdots & G_{n-1n-1}-1 & G_{nn-1}A_{nn-1} \\ 1 & \cdots & 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

であり、$\mathrm{adj}\boldsymbol{P}'_{ij}$ は $\boldsymbol{P}$ の i,j 余因子である。

[証明] RA の各温度での定常確率分布 $\boldsymbol{x}$ は SA と同様に次式で与えられる。

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{P} \tag{12}$$

従って次式が成り立つ。

$$\mathbf{o} = \boldsymbol{P}^T\boldsymbol{x}^T - \boldsymbol{x}^T \tag{13}$$

$$\mathbf{o} = (\boldsymbol{P}^T - \boldsymbol{I})\boldsymbol{x}^T \tag{14}$$

ここで、$\{G_{in}A_{in}|\forall i\}$ は $\{G_{ij}A_{ij}|\forall i, j=1,\cdots,n-1\}$ で決定することができので、$(\boldsymbol{P}^T - \boldsymbol{I})$ の $rank$ は $n-1$ となってしまい、行列 $\boldsymbol{P}$ を張ることができない。そこで、

$$x_1 + x_2 + \cdots + x_n = 1 \tag{15}$$

を考慮することにより、次式が得られる。

$$\boldsymbol{P}'\boldsymbol{x} = \boldsymbol{i} \tag{16}$$

クラーメルの公式を用いて上式を $\{x_i|i=0,\cdots,n\}$ について解くと、

$$x_i = \frac{\det \boldsymbol{P}'_{i,[0,\cdots,0,1]}}{\det \boldsymbol{P}'} \tag{17}$$

が得られる。ただし、$\boldsymbol{P}'_{i,[0,\cdots,0,1]}$ は $\boldsymbol{P}'$ 行列の i 番目の列をベクトル $[0,\cdots,0,1]$ と入れ換えたものである。$\boldsymbol{P}'_{i,[0,\cdots,0,1]}$ を i 番目の列で小行列式に展開すると (10) 式が導ける。 ■

定理 1 では、状態遷移行列 P が規約で非周期的と仮定して、各温度における定常確率分布を明らかにした。しかし、厳密には、再帰的な類がただ一つだとすると、状態遷移行列が規約でな

くても、定常分布を求めるためには、規約な状態のみを考慮すればよいことが知られている [1]。このことは、ルールを加えた場合でも、最適な状態に任意の状態から可到達ならば、最適な状態と同値類の状態のみを考慮することにより定常な状態を求めることができることを示している。また、ルールの適用を確率的にすることにより、状態遷移行列 P の非周期性を保つことができることは明らかである。

次に、ルールによる変換を加えたときでも最適な状態を生成する確率が零にならず、温度を十分にゆっくり下げたならば、(10) 式の定常分布が最適な解に収束することを示す。

[定理 2] 定常確率分布が (10) 式で与えられ、次式が成り立つとする。

$$\det \boldsymbol{P}^* \neq 0 \tag{18}$$

ただし、

$$\boldsymbol{P}^* = \begin{pmatrix} G_{m+1m+1} - 1 & \cdots & G_{n-1m+1} & G_{nm+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ G_{m+1n-1} & \cdots & G_{n-1n-1} - 1 & G_{nn-1} \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{19}$$

とし、m 番目以降の状態を最適な状態とみなす。このとき、

$$\lim_{T\to 0} \sum_{i=m+1}^{n} x_i = 1 \tag{20}$$

が成り立つ。

[証明]

いま、状態 x_i のコストを c_i とし、状態 x_i を

$$c_1 > c_2 > \cdots > c_n \tag{21}$$

が成り立つようにならべると、

$$\lim_{T\to 0} A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } i > j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{22}$$

となり、(11) 式の $\boldsymbol{P}'$ の温度零での値は次式で与えられる。

$$\lim_{T\to 0} \boldsymbol{P}' = \left(\begin{array}{ccc|c} G_{11} - 1 & & 0 & \\ \vdots & \ddots & & 0 \\ G_{1m} & \cdots & G_{mm} - 1 & \\ \hline G_{1m+1} & \cdots & G_{mm+1} & \\ \vdots & \ddots & \vdots & \mathrm{P}^* \\ G_{1n-1} & \cdots & G_{mn-1} & \\ 1 & \cdots & 1 & \end{array}\right) \tag{23}$$

従って、$\{\mathrm{adj}\boldsymbol{P}^*_{n,i} | i = 1, \cdots, m\}$ は $\boldsymbol{P}'$ を張ることができない。ここで、上記の条件より、$\det \boldsymbol{P}^* \neq 0$ が成り立つので

$$x_i = \begin{cases} \dfrac{\mathrm{adj}\boldsymbol{P}^*_{n,i}}{\det \boldsymbol{P}^*} & \text{if } i > m \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{24}$$

が得られる。ただし、$\mathrm{adj}\boldsymbol{P}^*_{n,i}$ は $\boldsymbol{P}^*$ の余因子である。
小行列式展開の定理より、$\sum_{i=m+1}^{n} \mathrm{adj}\boldsymbol{P}^*_{n,i} = \det \boldsymbol{P}^*$ が成り立つ。 ■

5 ルールの適用比率

RA 法では温度ごとにルールの適用比率を変化させている。これは、一つに、温度毎に分布確率が高くなる状態が変化するために、分布確率の高い状態のコストを下げやすいルールを用い、コストを効率的に下げるためである。もう一つは、必ずしも、ルールにより生成しやすくなる状態と大域的に最適な状態が一致しないためである。そのため、ルールの影響により、ある状態から最適な状態に推移しにくくなることになる。そのようなときに、より最適な状態に推移しやすいルールを優先して使用するようにしていくことにより、局所的な最小解に落ち込むことを防ぐことができる。

6 例題

ここでは、巡回セールスマン問題を例にとり、RA 法の高速性を検証する。
ルール適用比率の更新方法としては、次の二つを用いている。

- 生成された状態が受理される率の高いルールを優先する。
- 生成された状態のコストが低くなるルールを優先する。

対象は 100 都市として、SA 法 に関してはランダム変換のみ、RA 法 に関してはランダム変換とルールによる変換の合計 6 つのルールを用いて探索を行なった。以下に 6 つのルールの概略を示す。

(1) 都市 P と Q をランダムに選びその経路を入れ換える。
(2) 上記のルールを M 回繰り返す。
(3) 都市 P をランダムに選び、都市 P に一番近い都市 Q との経路を入れ換える。
(4) 都市 P をランダムに選び、都市 P に近い N 個の都市から、経路を入れ換えたときにもっともコストの低くなる入れ換えを行なう。
(5) 都市 P と Q をランダムに選び、都市 P の次に、その経路の中でもっとも P に近い都市に訪れるように経路を変換する。
(6) 都市 P と Q をランダムに選び、その間の経路をもっとも短くなるように変形する。

ルールの適用比率の詳細、ルールの具体的な方法は文献 [4] を参照されたい。温度スケジュールについては、初期温度 $T_0 = 136.0°$ 、温度の更新は $T_{k+1} = 0.9 \cdot T_k$ 、終了条件は各温度での最終コストが 5 回連続で同じ値のときとした。その結果を図 1 に示す。それぞれのプロットは、一定温度での変換数 L を 500, 100, 200, 500, 1000 と変化させたときのアニーリング終了時の計算時間とそのときのコスト値 (15 回の平均) を示している。ただし、コスト減少率による RA 法では、システムに計算時間として 100, 200, 350, 700, 2000 (sec) を与えた。

図 1 で、'RA' は適用比率の調整をしない RA 法であり、もっとも単純な RA 法である。'RA(AC)' は受理率による選択比率の更新を行なったもの、'RA(GR)' はコスト減少率による更新を行なったものである。 図 1 より明らかなように、コスト８４０の解を得るのに RA 法では SA 法の１０倍以上の高速化を達成している。

7 まとめ

本報告では、SA 法よりも高速に良好な解を得る方法として RA 法を提案し、その収束特性を明らかにした。また、RA 法に対しては、SA 法の高速化手法として研究されていた温度スケジュールの最適化、並列処理などもそのまま適用することができる。

今後の課題としては、RA 法による高速化を理論的に明らかにすることがあげられる。

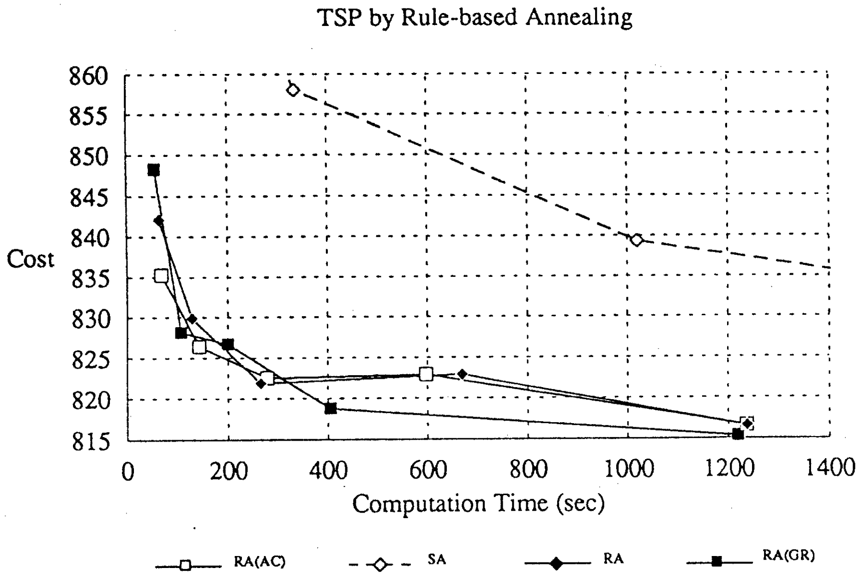

図 1: 実験結果（巡回セールスマン問題）

謝辞

本研究は、(財) 新世代コンピュータ技術開発機構（ICOT）との再委託契約（発仕 S6202）に基づき行なわれたものである。新田克巳室長を始めとする ICOT 第 7 研究室の諸氏にご助言して頂いたことは本研究の推進に大変有用でありました。ここに記して感謝します。

参考文献

[1] S.Kirkpatrick, C.D.Gelatt and M.P. Vecci, *"Optimization by simulated annealing"*, *Science*, vol.220, no.4598, pp.671-683 (1983).

[2] P.J.M. van Laarhoven and E.H.L.Aarts, *"Simulated Annealing : theory and applications"*, Kluwer Academic Publishers (1987).

[3] 荒木、舘野、加藤、間藤: 疎結合並列計算機上でのシミュレーティッド・アニーリング, 情報処理学会研究報告, 91-AI-77-2, pp.7-14, 1991.

[4] 舘野、荒木、加藤、間藤: Rule-based Annealing, 情報処理学会研究報告, 91-AI-78-2, 1991.