

Consideration on multiple important temperature regions in Simulated Annealing

Mitsunori MIKI, Tomoyuki HIROYASU* and Junya WAKO**

(Received July 31, 2004)

Simulated Annealing (SA) is an effective general heuristic method for solving many combinatorial optimization problems. But SA has two problems which are the long computational time of the numerical annealings and the determination of the appropriate temperature schedule. For the temperature schedule, Harry found that a specific constant temperature in SA yields good solutions for TSPs. The number of such specific constant or important temperature region has been thought to be one. But, Miki found that there are two important temperature regions in some TSPs. This paper discusses the multiple important temperature regions, and provides a guideline for determining proper temperature schedules in SA.

Key words : Simulated Annealing, Traveling Salesman Problem, important temperature

キーワード : シミュレーテッドアニーリング, 巡回セールスマン問題, 重要温度領域

シミュレーテッドアニーリングにおける複数重要温度領域に関する考察

三木光範・廣安知之・輪湖純也

1. はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing : SA)¹⁾ は, 広範囲の組合せ最適化問題に有効な汎用近似解法である. SA の最大の特徴は, 温度と呼ばれるパラメータを用いた改悪方向への状態遷移であり, 温度を緩慢に冷却することで良好な解を得ることが可能である²⁾. しかしながら, 解探索の振る舞いを制御する温度スケジュールの設定が容易でないという欠点を有している³⁾.

この温度スケジュールについての研究は数多く行われ, 効果的な探索は温度スケジュールの途中で行われることが明らかになっている^{?, ?)}. その中でも特に,

クーリングを行わない特定温度のみの解探索により良好な解が得られることが報告されている^{4, 5)}. 本研究ではこの特定の温度領域を重要温度領域と呼ぶ. この重要温度領域はこれまで1つの領域であることを前提に研究が行われてきたが, 意図的に作成した巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem : TSP) において複数の重要温度領域が存在することが指摘された⁶⁾.

そこで本研究では, TSP を対象として複数の重要温度領域について詳細な解析を行い, それにより組合せ最適化問題の特性を検証する.

* Department of Knowledge Engineering and Computer Sciences, Doshisha University, Kyoto

Telephone:+81-774-65-6930, Fax:+81-774-65-6796, E-mail:mmiki@mail.doshisha.ac.jp, tomo@is.doshisha.ac.jp

** Graduate Student, Department of Knowledge Engineering and Computer Sciences, Doshisha University, Kyoto

Telephone:+81-774-65-6716, Fax:+81-774-65-6716, E-mail:wako@mikilab.doshisha.ac.jp

2. SA における重要な温度領域

近年の研究において，特定範囲の温度での解探索によって良好な解を得ることが報告されている^{4, 5)}．TSP における重要温度領域の存在を確認するために数値実験を行う．

10 の TSP⁷⁾ に対し，高温から低温まで様々な温度で一定温度の SA を実行し，各温度で 20 回試行した後，得られた解の平均値を比較する．その中で最も良好な解を得た温度を重要温度 T_{opt} ，その温度で得られた解から誤差 1% 以内の解を得た温度を重要温度領域 $T_{opt} \text{ Range}$ とする．

なお本論文では，SA の近傍構造に巡回路の 2 本の枝を交換する 2-change を用いた^{?)}．また，最高温度に 100000，最低温度に 0.01 という値を用い，一定温度での SA に用いる各温度は，この最高温度と最低温度の間を等比的に 32 分割した値を割り当てる．終了条件は都市数 \times 3200 回探索が行われた時点とした．

eil51 における数値実験の結果を Fig. 1 に示す．図の横軸に温度，縦軸に一定温度 SA で得られた TSP の経路長を示す．経路長が短いほど良い結果を意味している．

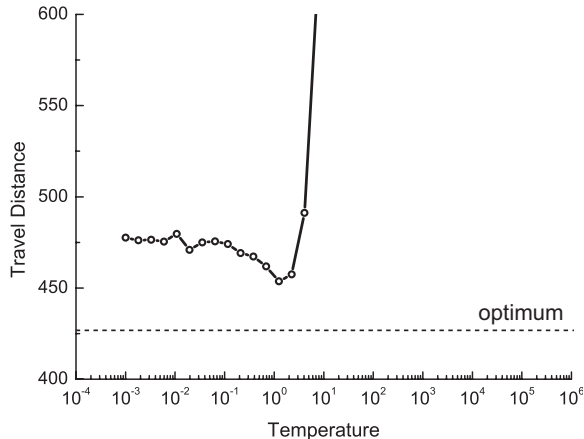


Fig. 1. eil51 における各温度と経路長の関係．

Fig. 1 から，温度 1 ~ 3 付近で良好な解が得られており，重要温度領域が存在することを確認できる．Table 1 に各 TSP の T_{opt} と $T_{opt} \text{ Range}$ を示す．

Table 1 から，重要温度 T_{opt} の値やその温度領域の広さは問題に依存していることが分かる．したがって，問題に依存する重要温度領域をこのような手法で特定するためには多くの計算コストが必要である．

このことを克服するために，問題依存である重要温度

Table 1. TSP の重要温度領域．

TSP	最適解	T_{opt}	$T_{opt} \text{ Range}$
eil51	426	1.5	1.0~2.4
st70	675	2.3	1.1~2.7
eil76	538	1.2	0.9~1.5
eil101	629	1.6	1.1~2.5
pr144	58537	80	16~93
kroA200	29368	38	27~53
lin318	42029	28	20~40
pr439	107217	64	44~72
rat575	6773	2.3	1.7~3.9
d657	48912	19	14~27

領域を適応的に特定する新たなアプローチ ASA/MaxT (Adaptive Temperature SA/Maximum Temperature)⁸⁾ が提案されている．以下で，ASA/MaxT のアルゴリズムについて概説する．

3. ASA/MaxT のアルゴリズム

三木らは，温度を極低温から徐々に上昇させながら探索する過程において，解は重要温度領域付近で一度局所解を下回るといふ点に注目し，重要温度領域より少し高い温度に最高温度を決定することのできる，適応的最高温度を持つ SA(ASA/MaxT) を提案した⁸⁾．ASA/MaxT のアルゴリズムは，次の通りである．

1. 探索の初期において極低温探索を行い，解を局所解に収束させる．：

極低温探索は，従来の SA で用いるクーリング周期が都市数の 20 倍であったことから，都市数の 20 倍の極低温探索を行い，そこで得られた局所解に対して，再び都市数の 20 倍の極低温探索を行なう．この 2 回目の探索中に解が更新されなければ極低温探索を打ち切り，解が更新されれば同様の処理を解が更新されなくなるまで繰り返す．

2. 解が更新されなくなれば局所解に収束したとみなし，温度を上昇させながら探索を行う．：

温度上昇率は $1/(\text{冷却率})$ を用いる．この冷却率は，従来の SA で用いられていた経験的な値である．一定温度での探索周期は，探索効率を考慮し，経験的にクーリング周期の $1/10$ ，すなわち都市数の 2 倍の探索数としている．

3. 解が局所解を上回った時点の温度を最高温度に設定し，その温度から通常の SA と同様，冷却しながら探索を行う．

Fig. 2 に、極低温探索から加熱したときの温度と解の推移についての関係を示す．図の横軸に温度，縦軸に経路長をとり，各温度で探索を行った最終時点での解の経路長をプロットしている．なお，対象問題は eil51 である．

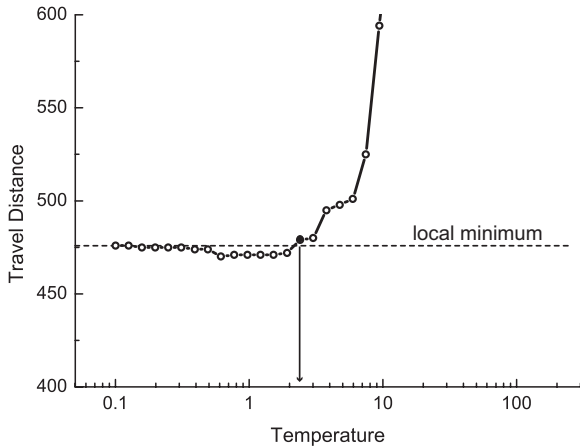


Fig. 2. eil51 における温度と解推移の関係.

図から，温度を極低温から徐々に上昇させながら探索を行うと，解は重要温度領域付近で一度局所解を下回ることが分かる．そして，ASA/MaxT のアルゴリズムにしたがって最高温度を決定すると，約 2.5 になる．これは，Fig. 1 から分かるように eil51 の重要温度よりやや高い温度である．

4. 重要温度領域が複数存在する問題

一方，これまで重要温度領域に関する研究は 1 つの領域であることを前提に行われてきた．しかしながら重要温度領域のみの探索では良好な解が得られない問題も存在し，重要温度領域が複数存在する可能性も指摘されている⁶⁾．

そこで三木らは，意図的に重要温度領域が複数存在する問題の作成を試みた．三木らは，TSP における重要温度領域が，問題の厳密解における平均経路長（最適解/都市数）に比例する⁹⁾ ことに注目し，平均経路長が大きく異なる問題を組み合わせることにより，それぞれの平均経路長に比例した温度に重要温度領域が存在する問題を作成した．すなわち Fig. 3 のように 800 倍に拡大した eil51 の原点 (0,0) からユークリッド距離で最も近い都市が，eil51 を 4 つ格子型に隣接させた問題で構成される問題である．作成した問題は，eil51*4-800 と表記される．

eil51*4-800 に第 2 節と同様の，一定温度の SA を適

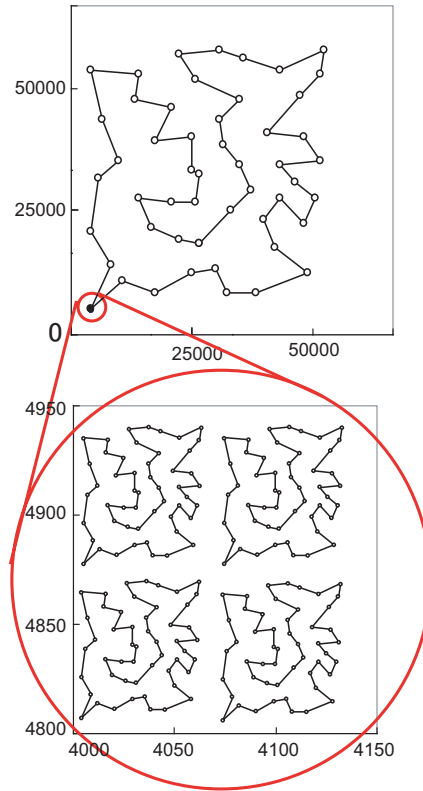


Fig. 3. スケールの異なる問題を組合せた問題 (eil51*4-800).

用する実験を行い，重要温度領域について検証を行った．実験結果を Fig. 4 に示す．図の横軸は各一定温度，縦軸は経路長を示す．

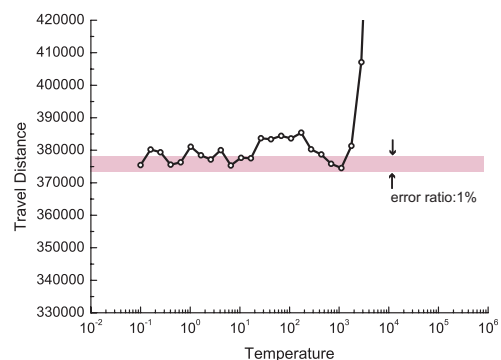


Fig. 4. eil51*4-800 の重要温度領域.

Fig. 4 より，eil51*4-800 には重要温度領域が 1000 付近および 5 付近以下の 2 つ存在することが分かる．これはそれぞれ，eil51 を 800 倍にした問題の重要温度領域 (1200 付近)，eil51 の重要温度領域 (1.5 付近)

とほぼ一致する。

このように、重要温度領域を2つ持つ問題が確認されたが、その出現メカニズムやその特定方法については考察されていない。そこで、本研究ではこの複数重要温度領域を持つ問題を詳細に解析し、重要温度領域が出現するメカニズムやその特定方法について検討を行い、良好な解を得るための指針を得ることを目的とする。

5. 重要温度領域が複数出現するメカニズム

Fig. 3 から分かるように $eil51*4-800$ は、204 の小構造の都市配置と 50 の大構造の都市配置を組み合わせた 254 都市問題である。この $eil51*4-800$ の巡回路を構成する最小単位である 2 都市間の距離は、次の 3 つのタイプに分類できる。

- Small scale : 小構造と小構造を結ぶ経路
- Big scale : 大構造と大構造を結ぶ経路
- Bridging : 小構造と大構造を結ぶ経路

この 3 つタイプの経路長を別々に計算し、各タイプが全体の経路長に与える影響を調べることで、重要温度領域が複数出現するメカニズムについて解明する。

Fig. 5 に、Fig. 4 に対して各タイプの経路長を計算した結果を加えた図を示す。ただし、*Smallscale* と *Bridging* の影響は、*Bigscale* に比べて非常に小さいので、これらのグラフは、*Bigscale* の最低温度の値を基準として、上方にシフトさせることにする。

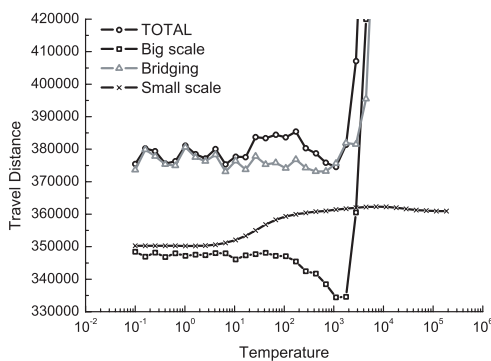


Fig. 5. $eil51*4-800$ の重要温度領域.

この図から、次のことが分かる。まず、 $eil51*4-800$ の総経路長は、*Bigscale* が大部分を占める。次に、*Smallscale* の経路長は温度 1 付近で、*Bigscale* の経路長は温度 1000 付近で最も良好な解を得ていること

が分かる。これは、各構造の重要温度領域と一致している。ただし、*Bigscale* の改善方向への変化の割合は、*Smallscale* のそれに比べて非常に大きい。それにもかかわらず、Fig. 4 において *Bigscale*、*Smallscale* の重要温度領域がうまくバランスして現れている。これは、温度 1000 付近での *Bigscale* の改善方向への変化の影響を *Smallscale* の経路長が改善方向に変化することによって打ち消すためであると考えられる。

すなわち 2 つの重要温度領域が出現するのは、小構造の改善方向への変化量と大構造の改善方向への変化量がほぼ等しい場合である。この考え方に基づけば、 $eil51*4-800$ に限らず複数重要温度領域が存在する問題を作成することができる。

6. $eil51*4-800$ への ASA/MaxT の適用

第 3 節で示した ASA/MaxT の最高温度探索メカニズムを $eil51*4-800$ に適用することを考える。ASA/MaxT のパラメータを Table 2 に示す。ここで、SA の初期設定パラメータである最高温度と最低温度を次のように決定した^{?)}。

- 最高温度：最大の改善となる推移を 50% の確率で受理する温度
- 最低温度：最小の改善となる推移がクーリング周期内で最低 1 回は受理される温度

Table 2. ASA/MaxT のパラメータ.

最高温度	184798
最低温度	0.1
探索周期	都市数 \cdot 2
温度上昇数	32
近傍構造	2-change

Fig. 6 に加熱していく温度と解の推移についての関係を示す。図の横軸に温度、縦軸に経路長をとり、各温度で探索を行った最終時点での解の経路長をプロットしている。Fig. 6 では微小な変化が良く分からないため、Fig. 6 の縦軸のスケールを変えた図を Fig. 7 に示す。

Fig. 7 から、従来の ASA/MaxT のアルゴリズムでは、 $eil51*4-800$ の 2 つの重要温度領域のうち、温度 1.5 付近の低温部分を特定することは可能であるが、温度 1000 付近の高温部分を特定することはできないことが分かる。

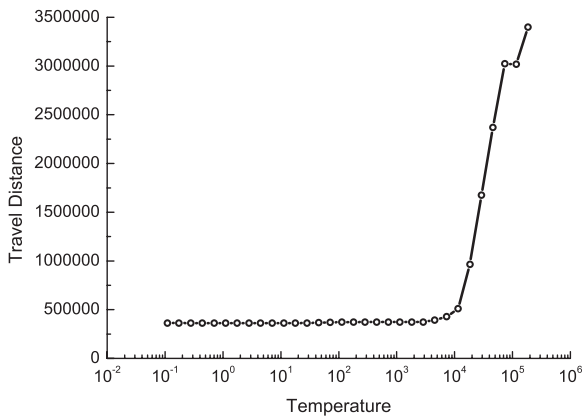


Fig. 6. $eil51*4-800$ における温度と解の推移の関係.

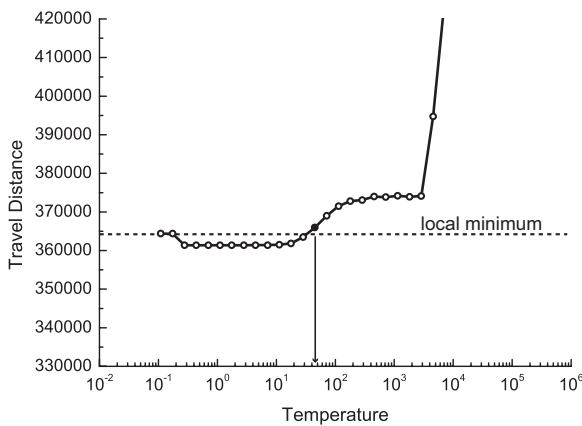


Fig. 7. $eil51*4-800$ における温度と解の推移の関係 (拡大図).

しかしながら、高温部分の重要温度領域を含む 100 ~ 1200 付近で、温度 20 ~ 100 にかけて見られる傾きと明らかに異なる平坦な部分が存在することが分かる。Fig. 2 に示した重要温度領域を 1 つしか持たない問題と比較しても、この特徴は見られない。また、高温部の重要温度領域を越えた時点で経路長は急激に悪化することも分かる。つまり、重要温度領域で長く探索すれば解は徐々に良くなるのに対し、重要温度領域より高い温度で長く探索すれば解は急激に悪化するのである。

次節でこの曲線の形状が現れるメカニズムについて考察し、複数重要温度領域を特定するための指針を得る。

7. 複数重要温度領域の特定

7.1 曲線の形状のメカニズム

Fig. 7 の曲線の形状のメカニズムについて考察する。そこで、Fig. 8 に Fig. 7 の結果に対して、第 5 節で用いた各タイプ別に経路長を計算した結果を示す。横軸に温度、縦軸に経路長をとる。

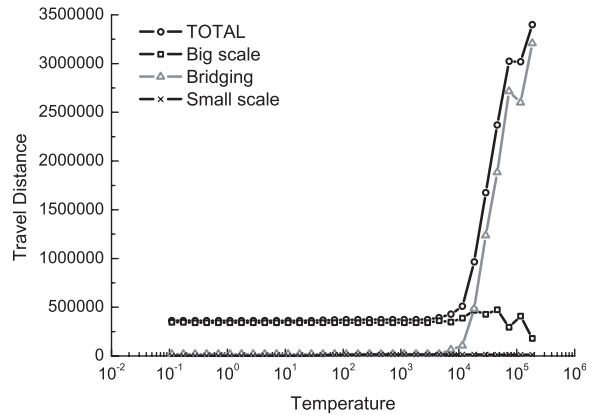


Fig. 8. 総経路長と各タイプ別の経路長の関係.

この図から、各構造が $eil51*4-800$ の総経路長に与える影響の度合いは、温度によって異なることが分かる。すなわち温度 3000 付近までは *Bigscale* の影響が強く、それ以上では *Bridging* の影響が強いことが分かる。これは、10000 以上の高温領域では、大構造同士の間よりも小構造と大構造を結ぶ経路の方が多くなるということを意味している。

次に、Fig. 8 の縦軸を拡大した図を Fig. 9 に示す。ただし、温度 1000 以下では *Smallscale* と *Bridging* の影響は、*Bigscale* に比べて非常に小さいので、これらのグラフは、*Bigscale* の最低温度の値を基準として、上方にシフトさせることにする。

この図から、総経路長のグラフと *Smallscale* のグラフ (Shifted *Small scale*) が平行になっていることが分かる。一方、*Bigscale* や *Bridging* のグラフはほとんど直線である。これらのことから、総経路長の大部分は *Bigscale* が占めるものの、グラフの形状、つまり総経路長の変化度合いは、*Smallscale* が大きく影響を与えているといえる。

すなわち、温度 10 以上で総経路長が悪化していくのは小構造が悪化していくためであり、温度 100 ~ 1200 付近で総経路長が悪化しないのは小構造がこれ以上悪化しないためである。そして温度 1200 以上で、総経路長が再び急激に悪化するのは *Bigscale* が悪化する

シミュレーテッドアニーリングにおける複数重要温度領域に関する考察

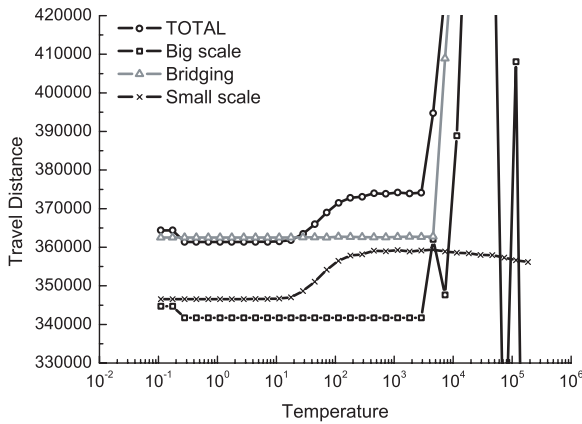


Fig. 9. 総経路長と各タイプ別の経路長の関係 (拡大図).

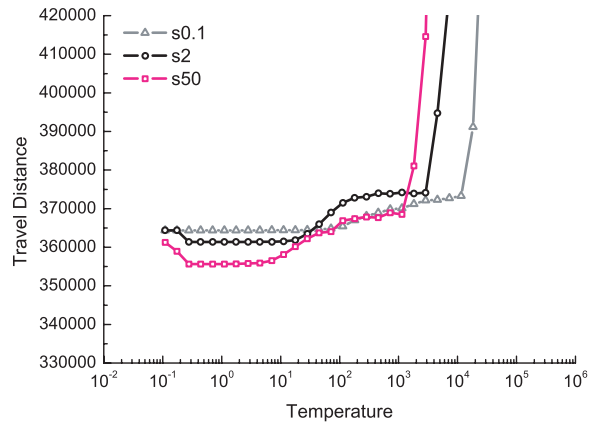


Fig. 10. ASA/MaxT の探索スピードと経路長の関係.

からである。

このように、eil51*4-800 は *Smallscale* , *Bigscale* , *Bridging* の組合せ構造であり、加熱していく探索温度フェーズによって各構造の影響度に違いがあるため、複雑な曲線を描く。

以上の重要温度領域に関する特徴を考慮した上で、以降は複数重要温度領域を特定する方法について検討を行う。検討方法は、次の2つである。

- 加熱スピードの違いによる特定
- 曲線の勾配による特定

7.2 加熱スピードの違いによる複数重要温度領域の特定

ASA/MaxT で用いられた 都市数・2 という加熱スピードを変えて実験を行う。実験に用いる ASA/MaxT のパラメータを以下に示す。

Table 3. ASA/MaxT のパラメータ.

最高温度	184789
最低温度	0.117
総探索数	都市数 (254) · 加熱スピード · 温度数
加熱スピード	50, 2.0, 0.1
温度数	32
近傍構造	2-change

Fig. 10 に実験結果を示す。横軸に温度、縦軸に経路長をとる。なお、探索スピード 50 を便宜上 *s50* と表す。

前節で、重要温度領域より高い温度で長く探索すれば解は急激に悪化するという特徴があることが分かったが、図より、s0.1 の時は 11000 , s2 の時は 1300 , s50 の時は 1200 と加熱スピードを遅くするにしたがって、急激に悪化する温度は徐々に下がっていき重要温度領域に近づいていくことが分かる。これは、悪い温度で長く探索することにより、より悪化しやすくなるためであると考えられる。

このように、いくつかの探索スピードを用いて簡単な予備実験を行うことにより、重要温度領域をより正確に特定することが可能である。

7.3 曲線の勾配による複数重要温度領域の特定

さらに、ある探索スピードの曲線の形状に注目する。eil51*4-800 の重要温度領域である温度 1 付近と温度 1200 付近は、エネルギー履歴の傾きが緩やかな地点であると捉えることができる。そこで、2 温度間の傾きをとることで、このことを数値的に捉えることを考える。

Fig. 11 に、Fig. 7 の結果に対して微分 (差分) を計算した図を示す。図の横軸に温度、縦軸に微分値を示す。

この図から、温度 1 付近と温度 1000 付近では、傾きの値が 0 に近く、それ以外の温度領域では大きな値をとっていることが分かる。ある閾値を定めて自動的に重要温度領域を特定することも考えられるが、この閾値は問題に依存しているため 2 つの重要温度領域を自動的に特定することは困難であると考えられる。

しかし人間ならば、Fig. 7 や Fig. 11 などいくつかのデータを提示されれば、ある程度 2 つの重要温度領域を特定することが可能であると考えられる。

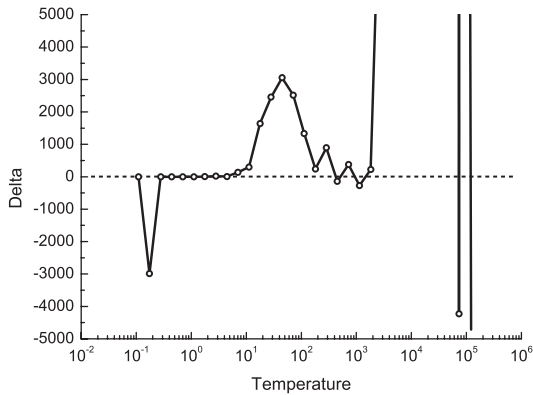


Fig. 11. Fig. 7の微分値.

8. 温度スケジュールに関する考察

ここで重要温度領域が複数存在する問題に適した温度スケジュールを考察する．eil51*4-800 を対象として，次の4種類のSAを適用し，得られる解探索能力の比較実験を行った．

1. 逐次 SA
2. 大構造の重要温度 (1200) のみの単一温度 SA
3. 小構造の重要温度 (1.0) のみの単一温度 SA
4. 両方の重要温度領域を高いものから順に探索する2段階クーリング SA

解探索能力に関しては，最適解からの誤差率 (Error ratio)(%) を用いて評価する．誤差率は，次の式 (1) を用いて計算される．ここで， f_{ave} は 30 回試行の解の平均値， f_{opt} は最適解である．

$$ErrorRatio = (f_{ave}/f_{opt} - 1) \cdot 100 \quad (1)$$

これは，TSP に対するアルゴリズムの評価では一般的に用いられるものであり，この数字が小さいほど最適解に近いといえる．ただし，作成した問題では最適解が未知のため近似解である 350000 を f_{opt} に用いた．実験に用いるパラメータを次の Table 4 に示す．

Fig. 12 に実験結果を示す．横軸に4種類のSA法，縦軸に誤差率 (%) を示す．

Fig. 12 より，4) の両方の重要温度を高いものから順に探索する温度スケジュールが，最も良好な解を得ていることが分かる．つまり，重要温度領域が2つ存

Table 4. 逐次 SA のパラメータ.

最高温度	184798
最低温度	0.1
総探索数	都市数 (254) · 3200
クーリング回数	32
近傍構造	2-change

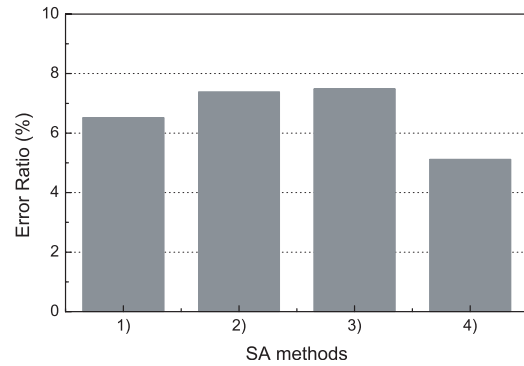


Fig. 12. 解精度の比較.

在する問題で良好な解を得るためには，どちらか一方の重要温度領域を探索するのではなく，2つの重要温度領域を高いものから順に重点的に探索することが必要となる．

9. 結論

本研究では，複数重要温度領域を持つ問題を詳細に解析した．その結果，得られた結論は次の通りである．

- 2つの重要温度領域は，小構造の改悪方向への変化量と大構造の改善方向への変化量がほぼ等しい場合に出現する．
- ASA/MaxT において，探索スピードを変えたり曲線の勾配をとることで，複数重要温度領域をある程度特定することが可能である．
- 組合せ最適化問題には，重要温度領域を集中的に探索する温度スケジュールが最も効果的である．これは，重要温度領域が複数存在する場合にも当てはまる．

参考文献

- 1) Gelett Jr. C.D. Vecchi M.P Kirkpatrick, S. Optimization by simulated annealing. *Science*, Vol. 220, No. 4598, pp. 671-680, 1983.

- 2) E. Aarts and J. Korst. *Simulated Annealing and Boltzmann Machines*. John Wiley & Sons, 1989.
- 3) Ingber, L. Simulated annealing: Practice versus theory. *Journal of Mathl. Comput. and Modelling*, Vol. 18, No. 11, pp. 29–57, 1993.
- 4) David T.CONNOLLY. An improved annealing scheme for the qap. *European Journal of Operational Research*, Vol. 46, pp. 93–100, 1990.
- 5) Mark Fielding. Simulated annealing with an optimal fixed temperature. *SIAM J.*, Vol. 11, No. 2, pp. 289–307, 2000.
- 6) 三木光範, 廣安知之, 米澤基. シミュレーテッドアニーリングにおける重要温度領域に関する考察. FIT2003 情報科学技術フォーラム 情報技術レターズ, Vol. 2, pp. 1–3, 2003.
- 7) Tsplib. Technical report. <http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/comopt/software/TSPLIB95/>.
- 8) 三木光範, 廣安知之, 實田健. 適応的最高温度を持つシミュレーテッドアニーリング. 情報処理学会論文誌, Vol. 44, pp. 2787–2795, 2003.
- 9) 三木光範, 廣安知之, 窪田耕明, 吉田武史. 温度並列シミュレーテッドアニーリングにおける重要温度. 情報処理学会 第 62 回 (平成 13 年後期) 全国大会 講演論文集, Vol. 2, pp. 229–230, 2001.