焼きなまし法の理論的背景

climax

2025 年 9 月 6 日

目次

1 焼きなまし法（Simulated Annealing）

1.1 焼きなまし法とは

焼きなまし法（Simulated Annealing, SA）は、組合せ最適化問題に対する強力な確率的探索アルゴリズム（メタヒューリスティクス）です。その主な特徴は以下の通りです。

- 常に良い解を選ぶのではなく、「温度」パラメータに応じて、確率的に悪い解への遷移も許容します。
- 一般に離散的な状態空間を持つ組合せ最適化問題に対してのアプローチです。
- 最初に温度を高く設定し、徐々に冷やしていきます。
- **探索初期（高温）**: 解が悪化する移動も許容し、広域的に探索します。
- **探索終盤（低温）**: 次第に改善する移動のみを選択し、一つの解に収束させます。
- この方法はマルコフ過程によって数学的にモデル化でき、大域的最適解への収束が理論的に保証されています。

1.2 理論的基礎としてのマルコフ連鎖

焼きなまし法の挙動を理解するためには、その数学的モデルであるマルコフ連鎖のいくつかの性質を知る必要があります。

定義 1.1 (マルコフ連鎖)**.** 未来の状態が現在の状態のみに依存し、過去の状態には依存しない確率過程（マルコフ過程）のうち、状態空間が離散的なものをマルコフ連鎖と呼びます。状態間の移動は、遷移確率によって定義されます。

1.2.1 マルコフ連鎖の分類

最適解への収束を保証するため、マルコフ連鎖が持つ以下の性質が重要となります。

斉時性　状態の推移確率が時間に依らず一定であること。

既約性　状態空間内のどの状態からでも、他の全ての状態へ有限ステップで到達可能であること。ある状態（吸収状態）に入ると脱出できなくなる場合は、既約性を満たしません。

非周期性　ある状態 i から再び状態 i に戻ってくるまでのステップ数が、特定の周期に縛られないことを意味します。厳密には、戻ってくることが可能なステップ

数の集合 $\{n \mid P_{ii}^{(n)} > 0\}$ の最大公約数が 1 であるときに非周期的であるといいます。

定理 1.2 (エルゴード的マルコフ連鎖の収束定理). マルコフ連鎖が**エルゴード的**である（すなわち、斉時的、既約、かつ非周期的である）とき、初期状態にかかわらず、ただ一つの**定常分布** π が一意に存在し、その分布に収束する。

この定理により、焼きなまし法をエルゴード的なマルコフ連鎖としてモデル化できれば、その振る舞いがただ一つの定常分布に収束することが保証されます。

1.3 焼きなまし法の定式化と収束保証

1.3.1 アルゴリズムの定式化

焼きなまし法の状態遷移は、以下のようにモデル化されます。

- ある固定温度 T において、状態 i から状態 j へ遷移する確率 P_{ij} は、次式で表されます。
$$P_{ij} = G_{ij} \cdot A_{ij}(T)$$
- G_{ij} は、状態 i の近傍から状態 j を次の候補として**生成する確率**です。
- $A_{ij}(T)$ は、生成された候補 j を**受理する確率**であり、以下で定義されます。
$$A_{ij}(T) = \min\left(1, \exp\left(\frac{E_i - E_j}{T}\right)\right)$$
ここで E_i, E_j はそれぞれ状態 i, j でのコスト（目的関数値）です。

1.3.2 ギブス分布と詳細つり合い条件

このマルコフ連鎖の定常分布は、統計力学に由来する**ギブス分布**（またはボルツマン分布）で与えられます。

$$\pi_T(s) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E(s)}{T}\right) \quad \text{ただし} \quad Z(T) = \sum_{x \in \Omega} \exp(-E(x)/T)$$

ここで Ω は状態空間全体、 $E(s)$ は状態 s のコストです。

この $\pi_T(s)$ が実際に定常分布であることは、**詳細つり合い条件**を満たすことから証明できます。詳細つり合い条件とは、任意の 2 状態 i, j 間で確率的な「流れ」が釣り合っていることを示す以下の式です。

$$\pi(i)P_{ij} = \pi(j)P_{ji}$$

1.3.3 詳細つり合い条件の証明

多くの焼きなまし法の実装では、候補を対称的に生成する（$G_{ij} = G_{ji}$）と仮定できるため、詳細つり合い条件は以下のように単純化できます。

$$\pi(i)A_{ij}(T) = \pi(j)A_{ji}(T) \iff \frac{A_{ij}(T)}{A_{ji}(T)} = \frac{\pi(j)}{\pi(i)}$$

この式の右辺にギブス分布を代入すると、証明すべき目標値は以下となります。

$$\frac{\pi(j)}{\pi(i)} = \frac{\exp(-E(j)/T)/Z(T)}{\exp(-E(i)/T)/Z(T)} = \exp\left(-\frac{E(j)-E(i)}{T}\right)$$

次に、左辺の受理確率の比が、コストの関係によらず常にこの目標値と一致することを確認します。

■Case 1: $E(j) \leq E(i)$（解が改善、または同等の場合） この場合、$i \to j$ の遷移は常に受理され、$j \to i$ は確率的に受理されます。

- $A_{ij}(T) = 1$
- $A_{ji}(T) = \exp\left(-\frac{E(i)-E(j)}{T}\right)$

したがって、比を計算すると、

$$\frac{A_{ij}(T)}{A_{ji}(T)} = \frac{1}{\exp\left(-\frac{E(i)-E(j)}{T}\right)} = \exp\left(\frac{E(i)-E(j)}{T}\right) = \exp\left(-\frac{E(j)-E(i)}{T}\right)$$

となり、目標値と一致します。

■Case 2: $E(j) > E(i)$（解が悪化する場合） この場合、$i \to j$ の遷移は確率的に受理され、$j \to i$ は常に受理されます。

- $A_{ij}(T) = \exp\left(-\frac{E(j)-E(i)}{T}\right)$
- $A_{ji}(T) = 1$

したがって、比を計算すると、

$$\frac{A_{ij}(T)}{A_{ji}(T)} = \frac{\exp\left(-\frac{E(j)-E(i)}{T}\right)}{1} = \exp\left(-\frac{E(j)-E(i)}{T}\right)$$

となり、こちらも目標値と一致します。以上より、ギブス分布は詳細つり合い条件を満たすことが証明されました。

1.3.4 エルゴード性の確認と定常分布の一意性

焼きなまし法をモデル化したマルコフ連鎖がエルゴード的であることを確認します。

- **斉時性**: 理論解析では温度 T を固定するため、遷移確率は時間に依存しません。
- **有限性**: 組合せ最適化問題の状態空間は有限です。
- **既約性**: 近傍探索が状態空間全体を繋ぐように設計され、受理確率が常に正であるため、任意の 2 状態間は到達可能です。
- **非周期性**: 遷移が受理されず同じ状態に留まる確率が常に正であるため、周期は 1 となり非周期的です。

エルゴード性の条件をすべて満たすため、このマルコフ連鎖は一意な定常分布を持ち、それはギブス分布に他なりません。

1.3.5 温度 $T \to 0$ での極限

最後に、温度 T を十分にゆっくりとゼロに近づけることで、探索が最適解に収束することを確認します。ギブス分布の式を変形し、$E_{\min}$ を最適解のコストとすると、

$$\pi_T(s) = \frac{\exp\left(\frac{E_{\min}-E(s)}{T}\right)}{\sum_{x\in\Omega}\exp\left(\frac{E_{\min}-E(x)}{T}\right)}$$

この式で、$T \to +0$ の極限を考えます。

- もし状態 s が最適解 $(E(s) = E_{\min})$ ならば、分子の指数は 0 となり、分子は $e^0 = 1$ に収束します。
- もし状態 s が最適解でなければ $(E(s) > E_{\min})$、分子の指数は負の無限大に発散し、分子は 0 に収束します。
- 分母は、最適解の個数を $|\{s^*\}|$ とすると、$|\{s^*\}|$ に収束します。

したがって、最終的な分布の極限は以下のようになります。

$$\lim_{T\to+0}\pi_T(s) = \begin{cases} \frac{1}{|\{s^*\}|} & (s \in \{s^*\}) \\ 0 & (s \notin \{s^*\}) \end{cases}$$

これは、温度がゼロに近づくにつれて、最適解以外の状態を取る確率がゼロになり、確率分布が最適解の集合上に均等に集中していくことを意味します。これが、焼きなまし法が理論的に大域的最適解へ収束する根拠です。

参考文献

[1] take, “焼きなまし法を python で実装する”, *Qiita*, 2021 年 4 月 11 日. https://qiita.com/take314/items/7eae18045e989d7eaf52

[2] Omed-Stu, “マルコフ連鎖 (Markov chain)”. https://qr.paps.jp/f5pif

[3] 輪湖 純也, “適応的温度調整メカニズムを組み込んだ Simulated Annealing の提案と TSP への適用”, 同志社大学, 2004. http://mikilab.doshisha.ac.jp/dia/monthly/monthly04/20040927/wako.pdf

[4] 堀田 敬介, 古川 徹, “シミュレーテッドアニーリング —基礎と最新技術—”, 人工知能学会誌, Vol.9, No.3, pp.365-372, 1994. https://www.jstage.jst.go.jp/article/jjsai/9/3/9_365/_pdf

[5] 中野 張 ” マルコフ過程入門” https://qr.paps.jp/1YDp