

シミュレーテッド・アニーリング (Simulated Annealing)

目次

1	概要 (abstract)	1
2	組合せ最適化問題 (combinatorial optimization problem)	2
3	シミュレーテッド・アニーリング (Simulated Annealing)	2
4	漸近的収束性 (asymptotic convergence)	3
5	冷却スケジュール (cooling schedule)	6
6	冷却スケジュールに対する理論的検討 (theoretical study on cooling schedule)	6
7	具体的適用の例 (example)	6
8	おわりに (conclusion)	6

1 概要 (abstract)

シミュレーテッド・アニーリング (Simulated Annealing) はメタヒューリスティクスの一つである。このアルゴリズムは Kirkpatrick ら、および Cerny によってそれぞれ独立に紹介されたものである。組合せ最適化問題に対して用いることで確率的に近似解を得ることができる。

シミュレーテッド・アニーリングの原理は物理現象の焼きなまし (Annealing) を組合わせ最適化問題の解の探索へと導入したものである。焼きなましとは温度の高い状態から低い状態へと徐々に遷移させることで、物体の粒子の並びが整った状態へと変化しやすくなること

を利用する方法であり、粒子の並びが整った状態であればエネルギーは小さくなる。このエネルギーを最適化問題のコストとして見立てることでシミュレーテッド・アニーリングは構成される。

2 組合せ最適化問題 (combinatorial optimization problem)

組合せ最適化問題とは最適化問題の分類の一つであり、実行可能領域が組合せ的である問題をいう。組合せ的であるとは、離散量や有限 (もしくは加算無限) 集合のもつ数学的性質を反映していることであり、離散的最適化 (discrete optimization) や離散的計画法 (discrete programming) とも言われる。具体的には整数計画問題、グラフやネットワークに関する最適化問題、有限個の要素を対象とするスケジューリング問題等がある。また、組合せ最適化問題には応用事例も多数存在し、整数計画法、ネットワーク計画法、マトロイド理論、分枝限定法、動的計画法、線形計画法等多数の成果が応用に用いられている。組合せ最適化問題は一般に

$$\begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s.t. } x \in X \end{aligned}$$

と書かれる。ここで関数 f は目的関数と呼ぶ。また前述したように集合 X は離散的な性質を持ち、この集合を実行可能領域と呼ぶ。組合せ最適化問題といわれる多くの問題は NP 困難なクラスに属しているため、通常は近似的に良い解を得ることで最適解の代替とする。この代替とされる近似的な解を近似解 (approximate solution) といい、近似解に対して最適解を大域的最適解 (globally optimal solution) という。また、近傍において最適である解を局所最適解 (locally optimal solution) という。近似解を得る近似解法においては、得られる解の質 (近似解と最適解との距離) や計算速度が主要な課題であり、より解の質が良くより計算時間が短い手法が求められる。

3 シミュレーテッド・アニーリング (Simulated Annealing)

前述した通りシミュレーテッド・アニーリングは、温度を序々に下げることで物体のエネルギー状態を最小化することができるという原理をモデルとしたものである。物体の状態を解、エネルギーを目的関数と対応づけることで、この物理過程を組合せ最適化問題へと適応させることで開発されたのがシミュレーテッドアニーリングである。おおまかには以下の手順で実行される。

Step1 探索の開始点となる初期値 x を定める。また温度 T を適当に定める。

Step2 現状の解 x から近傍の解 x' を生成する。それぞれの解のコスト $f(x), f(x')$ に対して確率

$$Pr\{\text{accept } x'\} = \begin{cases} 1, & f(x') \leq f(x) \\ \exp\left(-\frac{f(x')-f(x)}{T}\right), & \text{otherwise} \end{cases}$$

で x を x' によって置きかえる。

Step3 終了条件を満たすならば終了とし、そうでないならば T を事前に定めた手順で変更し **Step2** へ戻る。

このシミュレーテッド・アニーリングにおいて重要なのは受理確率 $Pr\{\text{accept } x'\}$ でありこの確率は温度が高ければ高いほど一定の値へと近づく。よって温度が低ければ改悪されるような解へと変化はしないが、温度が高い状態であれば改悪されるような解へと変化する確率も高くなる。この仕組みによって局所解へと陥いることを防ぎ、最適解へと到達する確率を高くしている。

シミュレーテッド・アニーリングを実際に適用するうえで、いくつか決めなければいけないものがある。まず、通常の局所探索の方法と解の表現である。さらに温度パラメータの初期値と減少させるスケジュール、各温度における反復数も決める必要がある。この温度パラメータや反復数の設定を決めることを冷却スケジュールといい、冷却スケジュールによって解の質や計算時間が変化する。

また実際の計算において、温度 T での全反復数と受理された移動の回数の比率によって受理率 (acceptance ratio) $\eta(T)$ が

$$\eta(T) = \frac{\text{提案された解へ移動した回数}}{\text{温度 } T \text{ において移動を提案する回数}}$$

として計算される。温度 T から計算される受理確率 $Pr\{\text{accept } x'\}$ から、温度が高ければ受理率も高く温度が低ければ受理率も低くなることが期待される。シミュレーテッド・アニーリングにおいて温度 T を常に 0 とすることで、通常の局所探索と同等のアルゴリズムとなる。

4 漸近的収束性 (asymptotic convergence)

シミュレーテッド・アニーリングの解の系列を確率過程としてのマルコフ連鎖としてとらえ、最適解への確率的収束性を示すことが実際に行われた。温度を一定、状態 i から j が選択される確率を一定とし、状態 i から j へ遷移する確率を

$$p_{ij} = \begin{cases} 1 - \sum_{j \neq i} p_{ij}, & i = j \\ \frac{1}{n-1}, & i \neq j, f(j) \leq f(i) \\ \frac{1}{n-1} \exp\left(-\frac{f(j)-f(i)}{T}\right), & i \neq j, f(j) > f(i) \end{cases}$$

とすれば、 p_{ij} を各成分として遷移行列 P を成す。遷移行列は左固有ベクトルとして全ての成分が 1 のベクトルを持つことは自明であり、対応する固有値は 1 となる。行列の左固有値と右固有値が一致することから右固有値 1 を持つため定常分布が存在し、その定常分布は

$$\pi_i = \frac{\exp\left(-\frac{f(i)}{T}\right)}{\sum_j \exp\left(-\frac{f(j)}{T}\right)}$$

となり、

$$\pi_j = \sum_i \pi_i p_{ij}$$

が成立する。この分布はボルツマン分布という。

またゲルシュゴリンの定理より P のスペクトル半径は 1 以下であることが示され、同時に固有値 1 の固有空間は 1 次元となることも示されるため、 $\lim_{k \rightarrow \infty} P^k$ は各行がボルツマン分布の行列へと収束する。したがって、温度を一定として反復を繰り返す過程は、推移確率が変わらない斉次 (homogeneous) なマルコフ連鎖とみることができる。このモデル化のもとで、反復を繰り返すと平衡状態へと達することが示される。

また、上述のボルツマン分布において T を序々に 0 へと近づけることで各状態の確率はある一定の値に収束する。最適解の集合を X_{opt} としたとき、最適解 $i_{opt} \in X_{opt}$ に対しては

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} \omega_{i_{opt}}(T) &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\exp\left(-\frac{f(i_{opt})}{T}\right)}{\sum_{j \in X} \exp\left(-\frac{f(j)}{T}\right)} \\ &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\exp\left(\frac{f_{opt} - f(i_{opt})}{T}\right)}{\sum_{j \in X} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(j)}{T}\right)} \\ &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\exp\left(\frac{0}{T}\right)}{\sum_{j \in X - X_{opt}} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(j)}{T}\right) + \sum_{j \in X_{opt}} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(j)}{T}\right)} \\ &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\exp(0)}{\sum_{j \in X - X_{opt}} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(j)}{T}\right) + \sum_{j \in X_{opt}} \exp(0)} \\ &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{\sum_{j \in X - X_{opt}} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(j)}{T}\right) + \sum_{j \in X_{opt}} 1} \\ &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{\sum_{j \in X - X_{opt}} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(j)}{T}\right) + |X_{opt}|} \end{aligned}$$

任意の $j \in X - X_{opt}$ に対して $f_{opt} - f(j)$ は負なので

$$\begin{aligned}\lim_{T \rightarrow 0} \omega_{i_{opt}}(T) &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{\sum_{j \in X - X_{opt}} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(j)}{T}\right) + |X_{opt}|} \\ &= \frac{1}{\sum_{j \in X - X_{opt}} 0 + |X_{opt}|} \\ &= \frac{1}{|X_{opt}|}\end{aligned}$$

となり、また最適解でない解 $i \in X - X_{opt}$ に対しては

$$\begin{aligned}\lim_{T \rightarrow 0} \omega_{i_{opt}}(T) &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\exp\left(-\frac{f(i_{opt})}{T}\right)}{\sum_{j \in X} \exp\left(-\frac{f(j)}{T}\right)} \\ &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\exp\left(\frac{f_{opt} - f(i_{opt})}{T}\right)}{\sum_{j \in X} \exp\left(\frac{f_{opt} - f(j)}{T}\right)} \\ &= 0\end{aligned}$$

となる。したがって、各温度において平衡状態になるまで反復し、そのうえで温度 T を 0 へと近づけることで、対象としている問題の最適解の一つへと確率的に収束する。このモデル化における仮定が満たされれば最適解への漸近的収束性が保証される。

この仮定において斉次なモデルに対して温度 T を序々に下げている。しかし、平衡状態の確率分布を導出した仮定は最適解への収束するための十分条件ではない。そこで、ある温度での反復回数に制限を与えたうえで序々に温度を下げていくモデル、つまり非斉次なマルコフ連鎖のモデルが示されている。特に Hajek に必要十分性が保証されており、厳密な証明も示されている。その証明では、ある仮定のもとで、ある定数 Γ に対して温度パラメータの系列 T_k ($k = 0, 1, \dots$) が

$$T_k = \frac{\Gamma}{\log(k+2)}$$

である、もしくは上式よりもゆっくり冷却されるならば、シミュレーテッド・アニーリングが収束することが示されている。この冷却スケジュールに従って冷却した場合、TSP において求まる解の最終分布が 2 乗平均の意味において最適解に到達するには

$$k = O(n^{2n-1})$$

の計算時間が必要とされる。TSP の解空間の大きさは $(N-1)!$ であるため、総当たりによる探索の方がシミュレーテッド・アニーリングよりも早く最適解が得られることとなる。その

ためシミュレーテッド・アニーリングは厳密な最適解を得る手法としては妥当でなく、近似的な解を早く得るという点において利用価値が発生することとなる。したがって、いかに実用的な時間で、各温度において平衡に近い状態 (疑似平衡状態) を得る冷却スケジュールを構成できるかが課題となる。

5 冷却スケジュール (cooling schedule)

前節で示したように、シミュレーテッド・アニーリングを無限に近い回数適用することで、最適解を得ることができる。しかし実際には無限回の適用は不可能であり、実用時間内で実行が終了し、かつ最適解に近い解が得られるようにパラメータを調整し利用することとなる。つまり、冷却スケジュールをいかに設定するかという問題となる。冷却スケジュールは以下の4つのパラメータからなる。

- 温度の初期値
- 温度の減少関数
- 各温度での反復回数
- 終了条件

冷却スケジュールの設計において、シミュレーテッド・アニーリングの最適解への収束性に関する理論は基本的に参考にならない。しかし、収束性を最大限生かすために、冷却スケジュールを疑似平衡の概念に沿って構成することが望ましい。温度 T_k のときに疑似平衡であるとは、温度 T_k において R 回の繰り返しを行った結果の確率分布 $Q(R, T_k)$ と理論的に温度 T_k によって得られる平衡状態 $\Omega(T_k)$ に対して、ある $0 < \epsilon$ によって

$$\|Q(R, T_k) - \Omega(T_k)\| < \epsilon$$

となることをいう。

6 冷却スケジュールに対する理論的検討 (theoretical study on cooling schedule)

7 具体的適用の例 (example)

8 おわりに (conclusion)