Simulated Annealing

計算機アルゴリズム特論：2015年度

只木進一

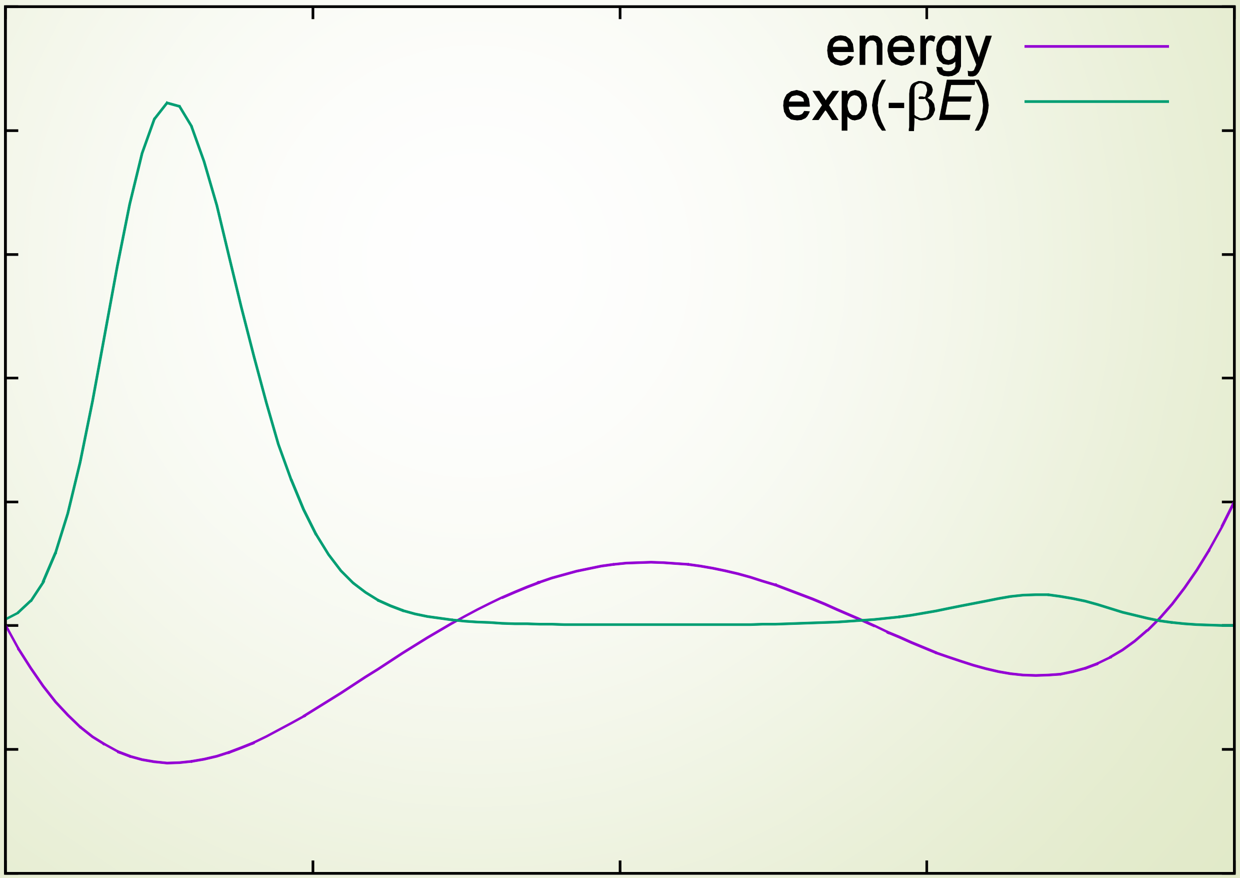
焼きなまし法
Simulated Annealing

- 複数の局所最小値がある場合に、いかにして真の最小値を得るか
  - 特に、組み合わせの数が非常に多い場合
- 真の最小値でなくても、妥当な最小値を近似的に得るには

- 自然は上手にやっているように見える
- 例：金属の徐冷
  - 溶けた金属をゆっくり冷やすと結晶が成長する
  - 最適（エネルギー最小）な状態のはず

統計力学の観点から見た徐冷

- 高温：広い範囲の配置を探索
  - エネルギーの低い位置ほど、長時間滞在
  - 最低値の場所を大雑把に探す
- 温度が下がる：探索範囲が狭く
  - エネルギーの低いところに、さらに集まる
  - 最低値へと幅を狭める


energy
exp(-βE)

Traveling Salesman Problem

- N個の都市があり、都市間の距離が与えられている。
- 全ての都市を一度ずつめぐる閉路（Hamilton閉路）の中から、距離最短となるものを見つける。
- 総当たりでは$N! \sim e^{N\ln N - N}$個の場合の検索が必要となる

- 問題設定
  - 二つの頂点iとjの距離$d(i,j)$
  - 直結する弧が無い場合には、大きな値を設定しておく

- 経路μ
  - 経路を頂点の列で記述：$\{C_o^\mu, C_1^\mu, \cdots, C_{N-1}^\mu\}$
  - 距離：$D^\mu = \sum_{i=0}^{N-1} d(C_i^\mu, C_{i+1}^\mu)$
  - 経路の出現確率：$P(\mu) = Z^{-1} e^{-\beta D^\mu}$

経路の変更

- 経路μから、二点(p, q)をランダムに選ぶ

$$\mu = \left\{ C_0{}^{\mu}, C_1{}^{\mu}, \cdots, C_p{}^{\mu}, C_{p+1}{}^{\mu}, \cdots, C_q{}^{\mu}, C_{q+1}{}^{\mu}, \cdots, C_{N-1}{}^{\mu} \right\}$$

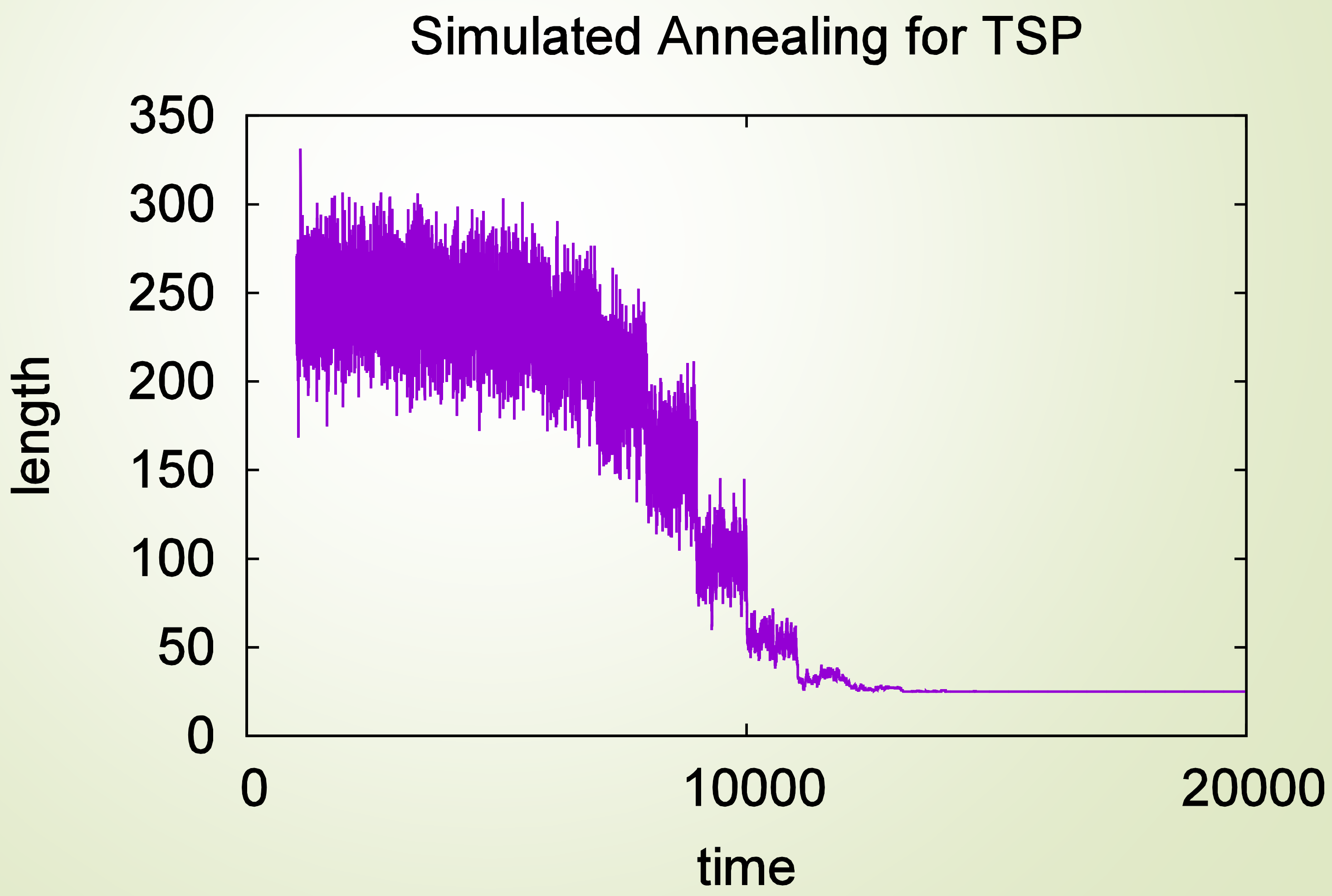
- pからqへの経路を反転

$$\nu = \left\{ C_0{}^{\mu}, C_1{}^{\mu}, \cdots, C_{p-1}{}^{\mu}, C_q{}^{\mu}, C_{q-1}{}^{\mu}, \cdots, C_{p+1}{}^{\mu}, C_p{}^{\mu}, C_{q+1}{}^{\mu}, \cdots, C_{N-1}{}^{\mu} \right\}$$

- $D^{\mu} \leq D^{\nu}$：確率１でνへ変更
- $D^{\mu} > D^{\nu}$：確率$e^{-\beta(D^{\nu}-D^{\mu})}$で$\nu$へ変更

例

- 都市数：$N=50$
- 距離は0から10の範囲ででたらめに設定
- N回の更新で1モンテカルロステップとする
- 1000モンテカルロステップ毎にβを2倍に


Simulated Annealing for TSP
350
300
250
200
150
100
50
0
length
0
10000
20000
time