

組合せ最適化問題に対する時系列解析を用いた アニーリング法への応用

加 地 太 一

1 はじめに

組合せ最適化問題はスケジューリング問題、配置問題など様々な意思決定の問題で利用されている。この組合せ最適化問題を解くための有力な手法として遺伝アルゴリズム、タブーサーチ、アニーリング法などを主とするメタヒューリスティクスがある。これらの解法は解の移動を反復することが基調となっており、解の移動操作のベースを作り上げているものが解の近傍である。近傍とは任意の解に対してなんらかの操作を加えることにより得られる解の集合である。メタヒューリスティクスはこの近傍にもとづいて解空間を探索し、より良い解へ到達することを目指すものであり、数多くのメタヒューリスティクス手法が提案されている。

そして、これらのメタヒューリスティクスの性能を評価するために、通常実験的解析がなされている。それにはよりリアルな情報を用いた解析を通してメタヒューリスティクスの性能を明らかにしていくことの現実的な方向性が読み取れる。しかし、実験的解析では実験環境などに多くの自由度を有するがため、その基準が整わず一般性を導きにくいところがあるのも事実である。そこで、理論的解析を用いてより普遍的なメタヒューリスティクスの特性を明らかにしていく研究が行われており、有効な推定値などを導出し様々な特徴をも明らかにしている[2][3]。そして、その研究における特徴的な点は時系列解析の考え方を応用したところにある。すなわち、組合せ最適化問題の解空間における近傍点のランダムな評価値系列が AR(1)プロセス (first order autoregres-

sive process) で支配されるという仮定を用いて解空間および評価値系列の統計量を導き出している点にある。この AR(1)プロセスから得られた統計量を用い、さらに、解コストの同時分布にガウス性が伴う仮定を利用した汎用的な近傍モデルの解析によりアルゴリズムの特性をも導き出してもいる。

本論文では、これらの解析結果から得られた特性を表す理論値からアルゴリズム設計における利用、応用をはかるものである。ここではメタヒューリスティクスの代表的な手法であるアニーリング法のパラメータに対して適切な値を理論的に考察し、パラメータ自動決定への応用を目指したい。そのパラメータによってメタヒューリスティクスは制御され、より良い解の導出、計算時間の管理がなされる。通常パラメータは実験的にその値を決めていくが、複数のパラメータの組合せ、問題依存性による結果の違いなどのためその決定を難しくしている。そこで本研究で得られる近傍の性質など探索を特徴づける値を利用してパラメータを自動的に決定する仕組みを作り上げる。その事例としてアニーリング法のパラメータの一つである初期温度推定への応用例を検討しその有効性を確かめたい。そして、組合せ最適化問題の解空間、そしてメタヒューリスティクスアルゴリズムの過程で生じる様々な特徴を解析することが、新たなアルゴリズムの設計へと展開できることを示したい。

2 時系列解析による解空間の解析

解空間における評価値系列の特性を表す各種の統計量を考察することが本論文での基本となる。そこで、本節では解空間における近傍点のランダムな評価値系列が AR(1)プロセスと呼ばれる特徴的な性質を有するという仮定のもと、必要な解空間および評価値系列の基本的統計量を AR(1)モデルを適用して導出していくアプローチに関して説明していく。確率的な解析では通常、モデルを構築しやすいように、特定の問題、および特定の近傍などを設定して、このような統計量を導出する。しかし、ここで提唱する AR(1)モデルを用いることにより、多くの組合せ最適化問題、あるいは各種の近傍などに対応する汎用的な

解析が可能となることが期待される。以下に、解空間の性質、AR(1)プロセスによるモデル化、そして、そこから導出される基本統計量について考えていく。

組合せ最適化問題のすべての実行可能解 x の集合を X としよう。そして、与えられた解からある基本操作で別の解を導出することを移動と呼ぶ。その移動によって得られる解集合 $N(x)$ を解 x の近傍として定義する。また、解 x に対しての評価値（コスト）を $f(x)$ で表すこととする。その写像 $f: X \rightarrow R$ を組合せ最適化問題の評価値ランドスケープ（fitness landscape）と呼ぶこととする。この評価値ランドスケープの特性を解析するために、まず、ランダムに選んだ点（解）を出発点としてランダムに選ばれた近傍点（近傍解）に移動し、この点（解）から再びランダムに選ばれた近傍点（近傍解）に移動することを繰り返し得られた評価値（fitness）の系列を考える。そして、この系列が時系列モデルの一つのタイプである AR(1)プロセス [4][6]、すなわち1次の自己回帰モデルとしてモデル化することが可能と考える。Weinberger は、“AR(1)プロセスが、複雑な評価値ランドスケープのクラスをモデル化した N-K 問題 [6] や組合せ最適化問題を含めて、ランドスケープの広いクラスの上でランダムウォークの統計をうまく捕らえるであろう”と述べており、組合せ最適化問題への適用が可能であることを示唆している [6]。そこで、その考え方を組合せ最適化問題の解空間の評価値ランドスケープに対して適用して、その統計的性質から組合せ問題の解析を試みるものである。

まず、組合せ最適化問題の評価値ランドスケープ上のランダムウォーク x_1, x_2, \dots, x_N は、AR(1)プロセスとして、次の再帰方程式で支配されたモデル化が可能と考えられる。

$$F_t = \mu + \rho(1)(F_{t-1} - \mu) + \Delta \quad (1)$$

ここで、 F_t は解 x_t のコストを確率変数と考えたものである。また、 t は評価値系列のステップを表す。この再帰的な性質が多く、組合せ最適化問題の解空間における近傍点のランダムな評価値系列に見られ、統計的な性質を導き出すことが可能であろう [3][6]。ただし、 Δ は平均 0、分散 σ_Δ^2 をもつ白色雑

音で、 μ は解コストの期待値であり、 $\rho(1)$ は1ステップの自己相関関数である。今後便宜上、 $\rho(1)$ を ρ で表すこともある。

AR(1)プロセスの特徴として、 $\rho(r)$ を r ステップの自己相関関数とすれば、

$$\rho(r) = \rho(1)^{|r|}, \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2)$$

の式のようにステップ数 r の増加によって自己相関関数の値は0への指数関数的な減衰性を示す。この性質が確認されたならば、解空間の評価値ランドスケープがAR(1)プロセスに従っていると判断できうる。また、評価値系列がAR(1)プロセスであり、かつ $|\rho(1)| < 1$ ならば、そのプロセスは定常過程となることが知られている [4]。定常過程の定義から、

$$E[F_t] = \mu \quad \text{for all } t \quad (3)$$

$$E[(F_t - \mu)^2] = \sigma^2 \quad \text{for all } t \quad (4)$$

が成立する。ただし、 μ は解コストの平均（アンサンブル平均）であり、 σ^2 は解コストの分散である。また、評価値系列のサンプル平均は

$$\bar{F} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N F_t \quad (5)$$

で計算でき、定常過程において評価値系列のサンプル平均 \bar{F} が、アンサンブル平均 μ としてのバイアスのない見積もり（推定量）として扱えることが知られている [4]。したがって、そのサンプル平均をもってアンサンブル平均とする。

さらに、定常過程における自己共分散、自己相関関数の見積もり（推定量）は

$$\hat{R}(r) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-r} (F_t - \bar{F}) \cdot (F_{t+r} - \bar{F}) \quad (6)$$

$$\hat{\rho}(r) = \hat{R}(r) / \hat{R}(0) \quad (7)$$

を用いることがすすめられ、 N が大きければ真値に近い値を導くこととなる [4]。これらの見積もりによって、以後用いられる自己共分散値 $R(r)$ 、自己

相関関数値 $\rho(r)$ が決定されるものとする。

また、導出された1ステップの自己相関関数 ρ の値は解 x_0 のコストとその近傍解コストの相関係数と同値である。解 x_0 の任意の2つの近傍解コストの間の相関係数 ρ は、近傍解同士の共通する属性の比率が高いことから、近似的に ρ に近い定数と仮定する。このように、AR(1)プロセスの考えに基づき解空間および評価値系列の特徴的な統計量が推定可能となり、以後で述べる推定値の基本統計量として活用できうるものとする。

3 近傍構造のモーメント

アニーリング法のパラメータを推定するためには、近傍のモーメントの値が必要になってくる。そこで、AR(1)モデルから得られる統計量に基づき、複雑な近傍を表すモデルを構築しモーメントを推定する。そのモデルを構築するにあたり、解コストの同時分布にガウス性が伴う仮定を利用する。多くの組合せ最適化問題においてその解空間にガウス性が見られることが知られてもおり [6]。この仮定に基づき作られた近傍のモデルが確率的に表現される。

モデル構築のために、まず任意の解を x_0 として、解 x_0 に対する近傍解の集合を $\{x_1, x_2, \dots, x_b\}$ と考える。 b は近傍解の個数である。本節では F_0 を解 x_0 のコストの確率変数とすると、その近傍解コストの確率変数は F_1, \dots, F_b であり、それぞれがとる値は c_0, c_1, \dots, c_b で表す。ここで、任意の解 x_0 がコスト c_0 を持つときの解 x_0 の近傍の構造を確率的に考察する。すなわち、 $F_0 = c_0$ が与えられた条件のもとで、 (F_1, \dots, F_b) の条件付多変量分布の確率密度関数 $h(c_1, \dots, c_b | c_0)$ を導出することによりその近傍の構造を明らかにしたい。このとき、 $\mathbf{X} = (F_1, \dots, F_b, F_0)$ の同時確率分布が多変量正規分布を示す ($\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$) と仮定したならば、 $h(c_1, \dots, c_b | c_0)$ は多変量正規分布 $N_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ となることが言われている [5]。この平均ベクトル \mathbf{m}' と共分散行列 Σ' を導き、分布の構造を特定する。そのために、同時確率分布 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ のモデルを詳細にしておく必要がある。まず、

$$\mathbf{X}_1 = (F_1, \dots, F_b)^t, \quad \mathbf{X}_2 = (F_0) \quad (8)$$

とおく。そして、それに対応する平均ベクトルの各要素を

$$\mathbf{m}_1 = (m_1, \dots, m_b)^t, \quad \mathbf{m}_2 = (m_0) \quad (9)$$

とする。また、 Σ_{11} を $F_i, i = 1, \dots, b$ と $F_j, j = 1, \dots, b$ に対する共分散行列とし、その各要素を $r_{ij}, i, j = 1, \dots, b$ と記す。 $\Sigma_{22} = (r_{00})$ は F_0 の分散とする。そして、 Σ_{12} と $\Sigma_{21} = (r_{i0})$ は F_0 と $F_i, i = 1, \dots, b$ との共分散を表すものとする。このように定義すると、同時確率分布 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ のモデルの各要素である \mathbf{X} , \mathbf{m} , Σ は

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{X}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{m}_2 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \quad (10)$$

とした分割形式で表される。

また、ここで必要とされる各要素の値は、AR(1)モデルの特性から導き出した基礎的な統計量を用いて決定することが可能である。これらの値を用いて有効な推定が可能であるかを検証したい。前述したように組合せ最適化問題の評価値ランドスケープがAR(1)プロセスであるところから、(3)式から(7)式によって導き出された統計量、すなわち近傍解コストの相関係数値 ρ 、および、近似的に ρ に近い定数と仮定した近傍解コスト同士の間の相関係数値 ν などにより、

$$m_i = \mu, \quad i = 0, 1, \dots, b \quad (11)$$

$$r_{ii} = \sigma^2, \quad i = 0, 1, \dots, b \quad (12)$$

$$r_{i0}, r_{0i} = \rho\sigma^2, \quad i = 1, \dots, b \quad (13)$$

$$r_{ij} = \nu\sigma^2, \quad i \neq j, i, j = 1, \dots, b \quad (14)$$

として、 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ のモデルを完成することができる。

そこで、 $h(c_1, \dots, c_b | c_0)$ の分布を導出し近傍の確率分布を特定したい。前述

した $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ の仮定のもと、 \mathbf{X}_2 の要素が $F_0 = c_0$ として与えられた \mathbf{X}_1 の条件付分布 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ の \mathbf{m}' と Σ' は

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m}_1 + \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} (c_0 - \mathbf{m}_2) = (\mathbf{m}'), \tag{15}$$

$$\Sigma' = \Sigma_{11} - \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21} = (r'_{ij}) \tag{16}$$

となることが知られている [5]。すでに AR(1)モデルから得られた基本統計量により、上式の各要素の値は導くことが可能である。近傍の多変量正規分布の各々の確率変数の期待値は $m'_i = m' = \mu + \rho(c_0 - \mu); i = 1, \dots, b$ となり、各々の分散は $r'_{ii} = \sigma^2(1 - \rho^2); i = 1, \dots, b$ として必要な統計量が導出可能となる。

4 アニーリング法への応用

本節では AR(1)モデルによる解空間と近傍構造の解析によって得られた統計量を用い、メタヒューリスティクスの設計における応用例を示したい。その応用例の一つとして、アニーリング法における初期温度の決定に関する検討を試みる。アニーリング法 (SA, Simulated Annealing 法) [1] は組合せ最適化問題など NP 困難な問題に対して威力を発揮する確率的近似解法の一つである。その原理は物理現象の焼きなまし (annealing) のコンセプトを組合せ最適化問題の探索過程へ導入したものである。焼きなましのコンセプトとは物理システムにおいて高い温度のとき、物質の粒子の状態はランダムに散らばりエネルギーの高い状態となる。その温度の十分に高い状態から徐々にゆっくりと温度を下げることにより粒子の並びが整ったかたちで整列された基底状態、すなわちエネルギーの最も低い状態へと到達する。このエネルギーを最適化問題のコストとして見立てアニーリング法は構成されている。そのアルゴリズムの概要は図1に示す。

ここで、アニーリング法は初期温度、温度の減少関数、終了判定温度、各温度での反復回数の4つのパラメータによって制御されている。すなわち、実行時間内で実行が終了し、より最適解に近い解が求まるように、パラメータによっ

```

1 :  $x :=$  初期解 ;  $T :=$  初期温度 ;  $R := R_{init}$  ;
2 : while 終了基準 do begin
3 :   for  $i := 1$  to  $R$  do begin
4 :      $y :=$  ランダムに選ばれた解 in  $N(x)$ 
5 :      $\Delta := f(y) - f(x)$ 
6 :     if  $\Delta \leq 0$  then  $x := y$  ; else
7 :       if  $\exp\left(\frac{-\Delta}{T}\right) \geq \text{random}[0, 1)$  then  $x := y$  ;
8 :   end ;
9 :    $T := \text{CalcTmp}(T)$  ;
10 :   $R := \text{CalcLength}(R)$  ;
11 : end ;
12 : return 暫定解 ;

```

図1 : Simulated Annealing アルゴリズム

て調整されることになる。ここで重要となるのが温度というパラメータである。この温度パラメータを十分に高い温度からゆっくりと冷却することが良い解を求めることにつながるものである。しかし、温度が高すぎ、かつ、あまりにもゆっくりと冷却することは実用時間内での計算では終了しない。すなわち、解の善し悪しと実行時間はトレードオフの関係にあり、適切なパラメータ値を求めなければならない。通常は実験的にこれらの適切な値を判断するが、パラメータの数、値のレンジによってそれらの値の組合せは膨大となり実験の負担を重くし、このツールの適用を阻むものの一つとなっている。

そこで、時系列解析より得られた特徴から各種のパラメータの適切な値を推定する検討を試みたい。本論文ではその一例としてパラメータの一つである温度において適切な初期値を導出できることを示す。アニーリング法の初期温度は通常、事前の数値実験によって受理率 $\chi(c)$ が0.8から1に近い値になるような温度に設定する。受理率 $\chi(c)$ とは、温度 c で疑似平衡に達するまでの反復での近傍移動に関して

$$\chi(c) = \frac{\text{温度}c\text{で受理された移動数}}{\text{温度}c\text{で提案された移動数}} \quad (17)$$

と定義される。

それに対して、初期温度などを含めたパラメータに関する理論的な検討がいくつか知られている。初期温度に関しては、受理率を

$$\chi \approx \frac{m_1 + m_2 \cdot \exp\left(\frac{-\overline{\Delta f}^{(+)}}{c}\right)}{m_1 + m_2} \quad (18)$$

と近似すると、温度は

$$c = \frac{\overline{\Delta f}^{(+)}}{\ln\left(\frac{m_2}{m_2 \cdot \chi - m_1(1-\chi)}\right)} \quad (19)$$

と求めることが可能となる [1]。ここで、 χ は希望する受理率の値である。また、現在の解を i としその近傍解を j とすると、 m_1 は $f(j) \leq f(i)$ となるような近傍の提案数であり、 m_2 は $f(j) > f(i)$ となる近傍の提案数を示している。あるいは m_1, m_2 はその提案数の比とみても一般性は失わない。さらに、 $\overline{\Delta f}^{(+)}$ は $f(j) > f(i)$ である m_2 個の近傍に対する $f(j) - f(i)$ の値の平均値を表している。ここで、この指定する受理率 χ となる初期温度を導出するためには、 $m_1, m_2, \overline{\Delta f}^{(+)}$ が必要な値となる。これらの値を本論文で提案する AR(1)モデルによる近傍構造の解析から導出し、有効な初期温度が推定可能であることを検討したい。アニーリング法における出発解を x_0 とすると、 x_0 の近傍解は先の議論より確率密度関数が

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\hat{\sigma}} e^{-\frac{(x-\hat{\mu})^2}{2\hat{\sigma}^2}} \quad (20)$$

となる正規分布に従ったコストをもつ解への移動となる。ただし、 $\hat{\mu}, \hat{\sigma}$ は

$$\hat{\mu} = \mu + \rho(f(x_0) - \mu) \quad (21)$$

$$\hat{\sigma} = \sigma^2(1 - \rho^2) \quad (22)$$

として前述の議論より導出可能である。したがって、この分布を解の候補と見立てることにより、この移動 m_1 , m_2 の比は

$$m_1 = \int_{-\infty}^{f(x_0)} \phi(x) dx \quad (23)$$

$$m_2 = \int_{f(x_0)}^{\infty} \phi(x) dx \quad (24)$$

と導かれる。また、 $\overline{\Delta f}^{(+)}$ はこの確率密度関数を用いて、

$$\overline{\Delta f}^{(+)} = \int_{f(x_0)}^{\infty} (x - f(x_0)) \phi(x) / m_2 dx \quad (25)$$

と計算可能である。以上、AR(1)モデルからの解析によって得られた値により、(19)式を導くことが可能となる。

5 数値実験

本節では、解の評価値系列がAR(1)プロセスとしてモデル化可能であるか検証する実験、近傍のモーメントの推定値の精度を示す実験、そして、アニーリングのパラメータの一つである初期温度において適切な推定の可能性を検討する実験結果を示し本提案の有効性を明らかにしたい。

まず、基本となる解空間の解析における重要な仮定について検討したい。第2節で述べられたように評価値系列がAR(1)プロセスであれば、いくつかの特性が得られるわけであるが、問題は実際にAR(1)プロセスであるかということに帰着される。AR(1)プロセスの特徴的な性質として指数的な減衰性を示す(2)式となる顕著な特性がある。この指数的減衰性を確認して、評価値ランドスケー

上の評価値系列が AR(1)プロセスに従う必要条件を確かめてモデルとして採用できるかを確認したい。ただし、近傍の解析でガウス性を仮定するため、解空間は平均 \bar{m} 、分散 σ^2 の正規分布 $\mathcal{N}(\bar{m}, \sigma^2)$ に従う確率空間と考える。ここで示す一例のインスタンスのグラフの構造は各辺に平均0.0、分散0.1の独立したランダムなコストを付与した完全グラフであり、頂点数500を対象とする。その解は中心極限定理によりコストの平均が0.0、分散は頂点数500の場合は50となる正規分布構造をもつ。ただし、この場合、ユークリッド平面的な性質は有さない。

近傍として2-opt [7] を定義し、その近傍に基づきランダム移動を行い評価値系列データを生成する。頂点数500のグラフに対する評価値系列データの自己相関関数を示したのが図2である。横軸はステップの変化に対応し、縦軸が自己相関関数の値となる。実線がその評価値系列データのサンプルから(7)式により計算した自己相関関数の変化である。すなわち、この問題の評価値系列における自己相関関数の値の変化が示される。このときの評価値系列のサンプル

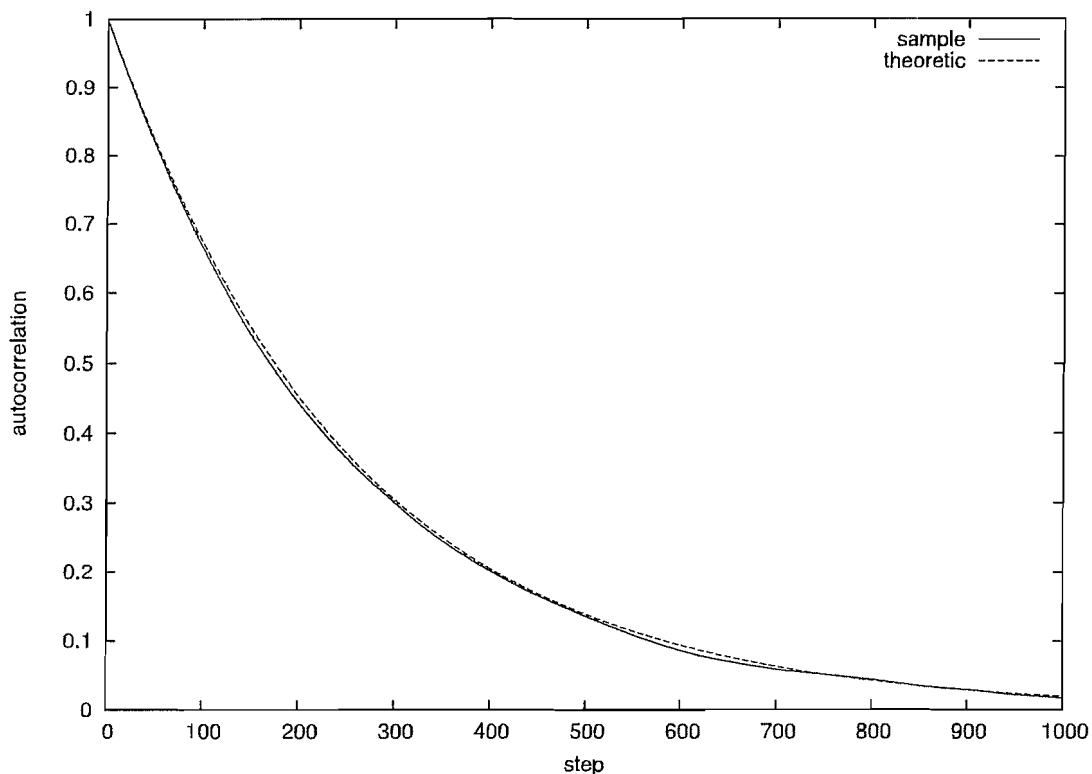


図2：2-opt 近傍による頂点数500の自己相関関数の振る舞い

ルパスの長さ、すなわち(6)式の N の値は1000000とする。また、破線は指数的減衰性を表わす(2)式の変化をプロットしたものであり、指数的減衰の振る舞いを表わす理論曲線である。ただし、最初の値である $\rho(1)$ は観測値から推定した値を用いており、その値に対する指数関数的な減衰性を示す理論曲線である。結果として、実線の観測値から得られた自己相関関数の値の変化は、指数的減衰性の変化を表わす理論曲線にほぼ一致した結果となった。

すなわち、対象問題の解空間のサンプルから求めた自己相関関数値は AR(1) の特徴を示す指数関数的な減衰性が認められた。また、その他のグラフにおいても同様な実験を行なった結果指数的減衰性が確認された。したがって、組合せ最適化問題の解空間における近傍点のランダムな評価値系列は AR(1) プロセスに従っているといつてよいであろう。

次に第3節で論じた近傍のモーメントに関する推定値の実験的検証を試みみる。実験対象はガウス性を伴う前述の頂点数500の問題を利用する。まず、近傍が2-opt であるケースに対して、解 x_0 の近傍解コストの期待値を理論的に導出する(15)式を検証してみたい。(15)式から導出される理論値の値と実際にサンプルして期待値を求めた実験値を図3にプロットしている(理論値が“×”，実験値が“+”の記号でプロットされる)。横軸が対象となる近傍の始点である解 x_0 のコスト c_0 を表し、縦軸がその解 x_0 の近傍 $N(x_0)$ におけるコストの期待値を表わす。理論値はこの c_0 と解コストの期待値 μ 、および(7)式から導かれた ρ の値に基づき(15)式から推定される。また、解 x_0 から実際の近傍解を生成してその平均をとったものが実験値としての値である。出発点である解 x_0 のコスト c_0 は解空間(解)の平均(約0の値)から Local Search で求めた局所解のコスト値までの範囲にまたがっている。図3において理論値と実験値が重なりプロットされており、本研究で示された理論値の有効性が認められる。

さらに、図4では近傍解コストの標準偏差を表わす。上記の期待値と同様に表わされており、縦軸が着目する標準偏差の値を示すものである。解の標準偏差である σ と ρ の値に基づき(16)式によって理論値となる標準偏差の推定値がもとまる。また、実際の解 x_0 から近傍解を生成して求めた標準偏差の値を実

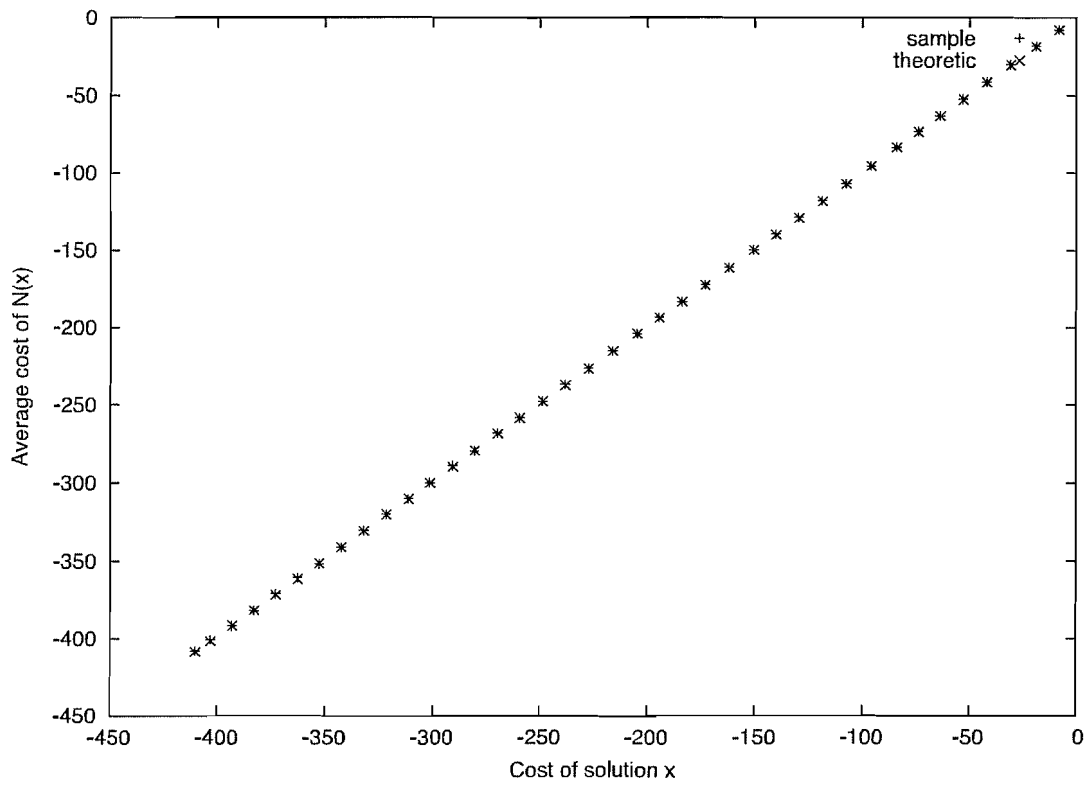


図 3 : 頂点数500での近傍解コストの理論的および実験的平均値

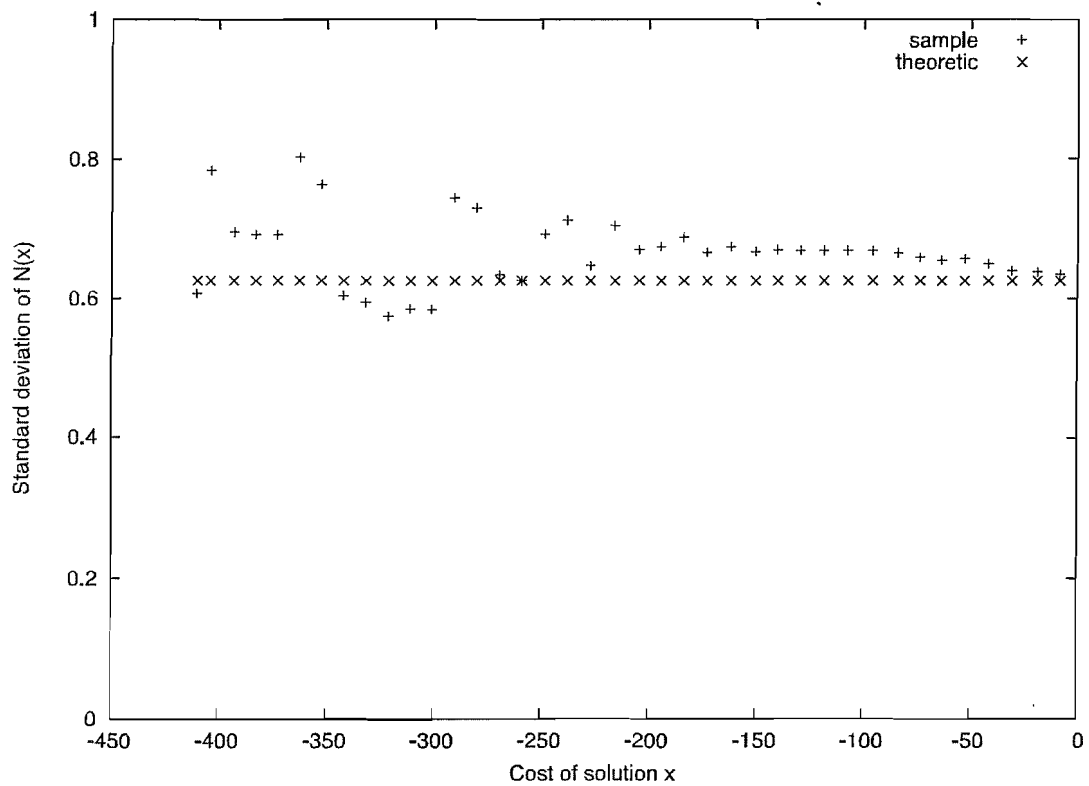


図 4 : 頂点数500での近傍解コストの理論的および実験的標準偏差値

験値として比較する。それによると、(16)式によって推定される理論的な標準偏差の値はもちろんプロットされたように一定値となる。しかし、実際の問題からサンプルした標準偏差の値は多少のバラツキを示している。頂点数500では x_0 のコストが全体的に上側の値となるが、 x_0 のコストが-200までは落ち着いた値を示している。必ずしも精度の良い値とはならないが、理論値にそって実際の値は分布しているといつてよいであろう。

以上の結果より、本問題のケースにおいて、その解空間における評価値ランドスケープの構造は AR(1)プロセスとしてモデル化することが有効であり、そこから見積もられた値を用いて推定した近傍の統計的データのモデルの有効性が示された結果の一つである。

最後に、この AR(1)モデルによる近傍構造の解析を用いた初期温度のスケジューリングの有効性に関して論じておきたい。この実験では汎用性を示すために複数のグラフを実験対象とし、異なるタイプを用いて実験を繰り返した。

表1は頂点数100のランダムグラフに対する TSP の事例に対して、提案するスケジューリングの有効性を示したものである。指定する受理率に対しスケジューリングされた温度、そしてその温度に対して反復を行った場合の実際の受理率が示されている。高い温度のときはほぼ要求する受理率が示されおり、温度が低くなると実際の受理率は多少低い傾向にあることが見受けられる。しかし、十分実用に堪える結果であると判断できる。同様に、表2は前述の頂点

表1：頂点数100の初期温度推定

指定した受理率	推定初期温度	実験受理率
0.95	325.5	0.949
0.90	163.0	0.898
0.85	101.7	0.834
0.80	70.1	0.774
0.75	57.8	0.721
0.70	47.5	0.671

表 2 : 頂点数500の初期温度推定

指定した受理率	推定初期温度	実験受理率
0.95	4.56	0.950
0.90	2.06	0.90
0.85	1.40	0.853
0.80	0.94	0.80
0.75	0.70	0.760
0.70	0.54	0.710

表 3 : pr76.tsp の初期温度推定

指定した受理率	推定初期温度	実験受理率
0.95	43799.3	0.946
0.90	19301.0	0.90
0.85	13132.8	0.840
0.80	10100.7	0.820
0.75	6450.1	0.763
0.70	4610.7	0.716

数500のグラフに対しての結果であり,かなり精度の高い結果をえている。次に,表3,表4,表5はより高い汎用性を確認するために,巡回セールスマン問題でのベンチマーク問題として有名な TSPLIB¹⁾を用いた。ここで扱うデータは都市データでの巡回路を求める問題,および電子基板などに穴をあける順序を決定する問題(ドリル穴あけ問題)など実際に応用されている問題が対象となる。表3と表4は都市データの巡回路を求める問題であり,表5はドリル穴あけ問題である。結果として,表3は精度の高い値を示している。しかし,表4

1) <http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/comopt/software/TSPLIB95/>

では指定する受理率の精度は悪い結果となっている。ただし、初期温度としては厳密な値は必要とせず、目安としての利用がはかれるので十分に実用に耐えるものである。最後に、表5は頂点数が多いにもかかわらず精度の高い近似を示している有効な結果の一つである。以上のように時系列解析を通したアニーリングの初期温度推定は十分実用的に利用可能な結果が得られたことを示した。

表4：att532.tspの初期温度推定

指定した受理率	推定初期温度	実験受理率
0.95	20441.9	0.960
0.90	9909.5	0.906
0.85	6426.0	0.853
0.80	4557.5	0.823
0.75	3029.3	0.826
0.70	2371.2	0.780

表5：pcb1173.tspの初期温度推定

指定した受理率	推定初期温度	実験受理率
0.95	7899.2	0.966
0.90	3671.3	0.923
0.85	2294.6	0.850
0.80	1638.9	0.820
0.75	1201.2	0.763
0.70	934.1	0.723

6 おわりに

本論文では、組合せ最適化問題に対する時系列解析による理論的な分析を用いてアニーリング法への応用に関する検討を行った。時系列解析では評価値ランドスケープの構造を統計的に明らかにし、解空間、近傍点の特性を示す各種の統計量を導出する。そして、評価値ランドスケープ上の評価値系列が AR(1) プロセスと呼ばれる特徴的な性質を有するという仮定を検証し、そこから必要な統計量を導き出した。次に、AR(1)プロセスから導き出した統計量と、解空間にガウス性を伴う仮定を用いて近傍の構造を確率的にモデル化し、近傍のモーメントの解析を試みた。そして、そこから得られる知見を利用しアルゴリズムの設計に生かすことは、通常行われている経験的なアルゴリズム構築法から脱却を可能とするものである。特にメタヒューリスティクスは各種のパラメータによって制御され、より良い解の導出、計算時間の管理がなされる。ここでパラメータは通常実験的にその値を決めていくが、複数のパラメータの組合せ、個々の問題の依存性による探索能力の差異などのためその決定を難しくしている。そこで本研究で得られる近傍の性質など探索を決める特徴を表す理論値を利用してパラメータを自動決定する仕組みを作り上げることを目指した。特にアニーリング法における初期温度決定では一定の成果を示し、今後の活用に期待を持たせる結果を得た。さらに、他のパラメータの推定へと検討を行い、ユーザーに対するパラメータ決定の負担を排除し、容易にアニーリング法の適用をはかれるよう研究を進めていきたい。

参 考 文 献

- [1] E. Aarts and J. Korst : *Simulated Annealing and Boltzmann Machines* (John Wiley & Sons, 1989).
- [2] T. Kaji : Probabilistic Analysis of Local Search using AR(1) Model in the Graph Partitioning Problem. Proc. of the Fifth Metaheuristics International Conference, Paper ID 38 (2003).
- [3] 加地太一 : AR(1)モデルによる組合せ最適化問題の近傍に対する解析。日本OR学会論文誌, **51**, 112-135 (2008).
- [4] M. B. Priestley : *Spectral Analysis and Time Series* (Academic Press, 1981).
- [5] Y. L. Tong : *The Multivariate Normal Distribution* (Springer-Verlag, 1990).
- [6] E. Weinberger : Correlated and Uncorrelated Fitness Landscapes and How to Tell the Difference. *Biological Cybernetics*, **63** (1990), 325-336.
- [7] 柳浦睦憲, 茨木俊秀 : 組合せ最適化 (朝倉書店, 2001).