Simulated Annealing 法における解空間の視覚化

正 員 重 弘 裕 二 (大阪工業大学)

非会員 長 尾 明 (シャープ株式会社)

正 員 増 田 達 也 (大阪工業大学)

Visualization of Solution Space Explored in Simulated Annealing

Yuji Shigehiro, Member (Osaka Institute of Technology), Akira Nagao, Non-member (SHARP Corporation), Tatsuya Masuda, Member (Osaka Institute of Technology)

The simulated annealing is an optimization algorithm, by means of which near-optimal solutions can be searched in a solution space. The solution space is defined by a set of neighbor relations between solutions and a schedule of the temperature. Thus how to construct and determine them is a key to the success of application of the algorithm. However, it has not been studied in detail how to effectively analyze and evaluate them. In this paper, we propose a new method to visualize a solution space explored in the algorithm. First, a transition probability between two solutions, which cannot be expressed in the existing methods, is considered. Its visual expression is also considered. Next, based on transition probabilities, a “space plot” can be obtained. It can reflect the behavior of the algorithm at a given temperature, and indicate the quality of a given set of neighbor relations. Several examples of space plots are also shown to demonstrate the effectiveness of the proposed method.

キーワード：Simulated Annealing, 解空間, 視覚化, 近傍, 冷却スケジュール

1. はじめに

Simulated Annealing 法 (以下, SA と呼ぶ) は, VLSI の設計問題やスケジューリング問題など, 多項式時間での大域最適解の求解が不可能な組合せ最適化問題に広く適用されているメタ解法の一つである⁽¹⁾。十分に時間をかけて探索を行えば (漸近的に) 大域最適解を得ることができることが理論的に証明されているが⁽²⁾, 実用上の問題に対してそのような探索を行うことは通常不可能であり⁽³⁾, 限られた時間内で, いかにして効率良く探索を行うかが問題となる。

SA は, 冷却スケジュールにしたがって温度を変化させながら, 解の近傍関係と温度により定まる解空間の中で, 良い解を確率的に探索する手法である。したがって探索の効率, 近傍と冷却スケジュールの設定により決まる。冷却スケジュールに関しては, 比較的, 問題に依存しない理論的な解析が可能であるが⁽⁴⁾, 近傍に関しては, 問題に応じて適切なものを検討・設計する必要があるため, これまで, 多くの問題に対しさまざまな近傍が提案されてきた⁽¹⁾⁽²⁾。これからも, SA の研究者もしくは SA を利用しようとする者により, 既存のもしくは新たな問題に対し, それまでに適用されたことのないような近傍が適用される機会は多

いと思われる。

もし SA による処理がうまくいかなかった場合, その理由を調べてそれを解消するというのが研究・開発のあるべき姿である。したがって, 近傍と冷却スケジュールのどちらがどう悪いのかを調べる必要がある。そのとき, 具体的に解空間の様子を知りたいと思っている研究者等が多いはずである。しかし, そのための方法はこれまで余り知られていない。

多くの場合, 解空間の特性を理論的に解析することは難しい。したがって, 通常は, 多くの問題に対し実際に SA を実行し, その結果を基に解空間の評価を行う。しかし, このような計算機実験に基づく評価は, 単に SA による処理全体を評価しているに過ぎず, それ以上のことを調べたい場合には, ほとんど役に立たない。計算機実験において探索がどのように進んだのかを調べることはできるが, そこから具体的に解空間の様子などを推測することは困難である。

より直接的に解空間を評価するために, 解空間内をランダムウォークすることにより, 解空間の自己相関関数を求めるという手法も提案されている⁽⁵⁾。この手法により求まる「自己相関の強さ」は, 解空間の探索のしやすさを表す指標であり, 解空間の評価に有効である。しかし, 解空間の様子が具体的にわかるわけではないので, 近傍の改善な

どにおいてはあまり有効でない。

このような状況において、解空間の解析に有効と考えられるのが「解空間の視覚化」である。解空間を視覚化して得られた描画表現を見ることにより、解空間の性質が明らかになり、改善のための指針が得られる。

これまでに、解のエネルギーに基づく解空間の視覚化手法が提案されている⁽⁴⁾。しかしこの手法は、大きさの同じ近傍同士を比較するといったような限られた状況でしか有効でない。この手法により得られる描画は、解間を探索点が遷移する確率を反映しておらず、SAの挙動を解析するには不適當である。

それに対し、本論文では、遷移確率に基づく解空間の視覚化手法について考察する。まず、遷移確率の表現について考察する。続いて、遷移確率を適切に表現するような解空間全体の描画手法について考察する。更に実際に生成した解空間描画を示し、本手法の有効性を評価する。

得られた解空間の描画は、従来手法より正確にSAの挙動を反映したものであり、近傍や温度などの良否を判断する指針となる。また、SAに関する新たな知見を得る手がかりとなろう。

2. 定義

空でない有限集合 S と、 S から実数への写像 $f: S \rightarrow R$ が与えられたとき

$$f_{\min} = \min\{f(s) \mid s \in S\} \quad (1)$$

$$f(s_{\text{opt}}) = f_{\min} \quad (2)$$

を満たす $s_{\text{opt}} \in S$ を求めるという組合せ最適化問題を考える。 S の要素 $s \in S$ を解、 $f(s)$ を s のエネルギーと呼ぶ。また、最小のエネルギー $f_{\min}$ を持つ解 s_{opt} を（大域）最適解、 $f_{\min}$ に近いエネルギーを持つ解を近似最適解と呼ぶ。

S からそのべき集合（部分集合の集合）への写像 $N: S \rightarrow 2^S$ を近傍と呼び、解 $s_i \in S$ に対して

$$s_j \in N(s_i) \Rightarrow f(s_i) \leq f(s_j) \quad (3)$$

が成り立つとき、 s_i を局所最適解と呼ぶ。また、任意の解 $s_i \in S$, $s_j \in S$ に対して

$$s_i \in N(s_j) \Rightarrow s_j \in N(s_i) \quad (4)$$

が成り立つとき、近傍は対称であるという。更に、任意の解 $s_i \in S$, $s_j \in S$ に対して

$$|N(s_i)| = |N(s_j)| \quad (5)$$

が成り立つとき、すなわち、すべての解の近傍の大きさが等しいとき、近傍は均質であるという。均質な近傍 N において、個々の解の近傍の大きさが

$$|N(s)| = n \quad (s \in S) \quad (6)$$

であるということを、以下本論文では、単に「近傍 N の大きさが n である」と表現する。SAでは近傍が必要となるので、実行前に、問題に適した近傍を定義しておかなければならない。多くのSAの応用においてそうであるように、本論文では、定義された近傍が対称かつ均質であると仮定する。

SAでは、まず何らかの方法で一つの解を選び、最適解の候補 x とする。続いて、繰り返し、後述の方法で新しい解を選び、 x をその解へと更新する。後述するような更新を十分に繰り返すと、 x が（近似）最適解となる。

x を更新するときは、まず、 x の近傍 $N(x)$ から任意の解 $x' \in N(x)$ をランダムに選ぶ。 x' が選ばれる確率を選択確率と呼ぶ。近傍 N の大きさが n であるとき、選択確率は

$$p_s(n) = 1/n \quad (7)$$

である。

続いて、 $[0, 1)$ の一様乱数 r 、制御用のパラメータ t 、及び x と x' のエネルギー差

$$\delta_s(x, x') = f(x') - f(x) \quad (8)$$

を用いて

$$p_a(x, x', t) = \exp(-\delta_s(x, x')/t) \quad (9)$$

$$x \leftarrow \begin{cases} x' & (\text{if } \delta_s(x, x') \leq 0 \\ & \text{or } r < p_a(x, x', t)) \\ x & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (10)$$

とする。すなわち、エネルギー差 $\delta_s(x, x')$ が非正のときは無条件で、そうでないときも確率 $p_a(x, x', t)$ で、 x' を新しい x とする。この確率 $p_a(x, x', t)$ を受容確率と呼ぶ。また、 t は温度と呼ぶ正の数で、更新の繰り返しのあわせて大きな値から小さな値に変化させる。近傍と温度により定まるSAの探索空間を解空間と呼ぶ。

任意の解 s_i, s_j に対し、 x を s_i から s_j へと更新することを、（探索点が） s_i から s_j へと遷移するという。また、遷移が起こる確率を遷移確率と呼ぶ。大きさ n の近傍と温度 t により定まる解空間において、 s_i から s_j への遷移確率は、エネルギー差 $\delta_s(s_i, s_j) = f(s_j) - f(s_i)$ が正のとき

$$\begin{aligned} p_t(s_i, s_j, n, t) &= p_s(n)p_a(s_i, s_j, t) \\ &= (1/n) \exp(-\delta_s(s_i, s_j)/t) \quad (11) \end{aligned}$$

となり、非正のとき

$$p_t(s_i, s_j, n, t) = p_s(n) = 1/n \quad (12)$$

となる。

節点集合 S と有向枝の集合

$$E_d = \{(s_i, s_j) \mid s_i \in S, s_j \in N(s_i)\} \quad (13)$$

図 1 解空間の描画

Fig. 1. Example of a solution space plot.

により構成されるグラフ $G = (S, E_d)$ を近傍グラフ⁽²⁾と呼ぶ。近傍が対称であれば、 G の任意の有向枝 $(s_i, s_j) \in E_d$ に対し、逆向きの有向枝 $(s_j, s_i) \in E_d$ が存在する。本論文では、図を簡略化するため、有向枝の対 $(s_i, s_j), (s_j, s_i)$ を無向枝 $\{s_i, s_j\}$ に置換したような無向グラフを用いて近傍グラフを表す。

解 s_0, s_l に対し、解の系列 $s_0, s_1, s_2, \dots, s_l$ が存在し

$$s_{i+1} \in N(s_i) \quad (0 \leq i \leq l-1) \dots\dots\dots (14)$$

$$f(s_i) \leq \bar{f} \quad (0 \leq i \leq l) \dots\dots\dots (15)$$

が成り立つとき、 s_l は s_0 からエネルギー $\bar{f}$ 以下で到達可能であるという。近傍は対称であるから、 s_0 と s_l は互いにエネルギー $\bar{f}$ 以下で到達可能である。また、式 (14)、(15) を満たす最小の $\bar{f}$ を、 s_0, s_l 間のエネルギー障壁の大きさと呼ぶ。

3. 解空間の表現

〈3・1〉 従来手法 著者らが知る限り、解空間の視覚化法に関して具体的に述べた文献は、わずかに文献 (4) のみである。以下、従来手法 (文献 (4)) について概説し、その問題点を示す。

従来手法で解空間の描画として示されているのは、図 1 のように、 x 軸に解を並べ、そのエネルギーを y 軸方向に表したグラフである。解を並べる順序は、「任意のエネルギー $\bar{f}$ に対し、互いにエネルギー $\bar{f}$ 以下で到達可能な解が連続して並ぶ」ように定める。

例えば、図 2 (a) の近傍グラフにより表されるような解空間を考える。解 s_4 と s_5 はエネルギー f_L 以下で互いに到達可能であり、また、 s_2, s_3, s_4, s_5 は f_M 以下で到達可能であるから、それらが連続して配置されるよう解の順序を定めると、例えば図 2 (b) のような解空間描画が得られる。解の配置順序は一意に定まらないため、得られる描画も一意ではない。なお、従来手法では棒グラフにより解空間を表しているが、本論文では図 2 (b) のように折れ線 (棒グラフの包絡線) で表す。図 2 (b) を見ると、例えば s_2 と s_4 の間にはエネルギー f_M の山 (壁) があり、したがって s_2, s_4 間のエネルギー障壁の大きさは (少なくとも) f_M であるなどといったことがわかる。

式 (8)、(9)、(10) より、 s_2, s_4 間のエネルギー障壁の大きさが大きいほど、 s_2 から遷移を繰り返して s_4 へ到達

図 2 従来手法による解空間描画の例

Fig. 2. Example of a solution space plot generated by the existing method.

図 3 従来手法では表現できない解空間の例

Fig. 3. Example of a solution space which cannot be expressed by means of the existing method.

する確率が小さくなることがわかる。局所最適解と大域最適解についても同様に考えると、エネルギー障壁の大きさが大きいほど、局所最適解から脱出するのが難しくなることがわかる。すなわち「良い解空間」ではエネルギー障壁の大きさが小さく、それは凸凹の少ないなだらかなグラフに対応する。

従来手法の第 1 の問題点は、エネルギー障壁の大きさを表現できない場合があることである。例えば、図 3 (a) のような解空間では、任意の s_i, s_j ($1 \leq i \leq 5, 1 \leq j \leq 5, i \neq j$) に対して s_i, s_j 間のエネルギー障壁の大きさは f_H であるが、これを従来手法で表現するのは不可能である。図 3 (b) は描画の一例であるが、 s_1, s_2 間、 s_1, s_3 間のエネルギー障壁の大きさは、どちらも等しく f_H であるということを表現できていない。

第 2 の問題点は、なだらかなグラフが必ずしも良い解空間を表さない場合があることである。例えば

$$N(s) = S \quad (s \in S) \dots\dots\dots (16)$$

すなわち各解 s の近傍 N が解集合 S 全体であるような場合を考える。この近傍を用いた SA はランダム探索と等価であり、この解空間が良いとはいえない。しかし、解空間を描画すると、図 2 (b) の s_3 のようなエネルギーの山は生じず、なだらかなグラフが得られる。なぜならば、任意の解 $s_i \in S, s_j \in S$ に対し、 s_i と s_j は互いにエネルギー $\max\{f(s_i), f(s_j)\}$ 以下で到達可能であり、それらの解が、より大きなエネルギーを持つ解を挟んで配置されることはないからである。

第 3 の問題点は、温度が描画に反映されないことである。

図 4 2つの解からなる解空間と従来の描画

Fig. 4. Solution space constructed with two solutions, and its plots.

従来手法では解の近傍関係とエネルギーのみに基づいて描画を生成するため、得られた描画は温度とは無関係であり、その描画から、SA に対する温度の影響を判断することはできない。

〈3・2〉 エネルギー差と遷移確率の関係 これまで述べた従来手法の問題点はいずれも、解のエネルギーに基づいて解空間を表現しようとするのが原因である。それに対し以下では、遷移確率に基づいて描画を生成する方法について考察する。そのためにまず、従来手法において遷移確率がどのように表現されているのか調べる。

最初は、2つの解 s_i, s_j からなる図 4 (a) のような解空間を考え、 s_i から s_j への遷移について考える。ただし温度は t とする。 s_i の近傍に含まれる解は s_j のみであり、 s_i の近傍の大きさは $n = 1$ である。

エネルギー差 $\delta_s(s_i, s_j) = f(s_j) - f(s_i)$ が非正のときには、式 (12) より遷移確率は

$$p_t(s_i, s_j, 1, t) = 1 \quad (17)$$

である。すなわち、この遷移は、エネルギー差の大小に関わらず、極めて容易に起こる遷移である。従来手法による描画では、この遷移は図 4 (b) のように、高い位置から低い位置へ落ちるような移動（エネルギー差が 0 のときは、同じ高さへの水平移動）として表現される。これは、極めて容易に起こる遷移の表現として適当であろう。

一方、エネルギー差が正のときには、式 (11) より遷移確率は

$$p_t(s_i, s_j, 1, t) = \exp(-\delta_s(s_i, s_j)/t) < 1 \quad (18)$$

である。すなわち、この遷移は、エネルギー差が大きいほど起こりづらい遷移である。従来手法による描画では、この遷移は図 4 (c) のように、低い位置から高い位置へ飛び上がるような、それも、エネルギー差が大きいほど高く飛び上がるような移動として表現される。これも、遷移の表現として適当であろう。

以上のように、図 4 (a) のような解空間においては、従来手法は遷移確率を良く表現している。そこで、本論文では、一般的な解空間においても遷移確率を同様に表現する手法について考察する。すなわち本手法では

(1) 遷移確率が 1 であるような極めて容易に起こる遷

図 5 提案する解空間表現

Fig. 5. Proposed expression of a solution space.

移は、より低い位置へ落ちるような移動、もしくは同じ高さへの水平移動として表現する。

(2) 遷移確率が 1 未満であるような遷移は、より高い位置へ飛び上がるような移動として表現する。遷移確率が小さく遷移が起こりづらいほど、より高く飛び上がるような移動として表現する。

後者において、温度が t 、遷移確率が p のときに飛び上がる高さを $\delta_h(p, t)$ とすると、式 (18) を $p_t(s_i, s_j, 1, t) \rightarrow p, \delta_s(s_i, s_j) \rightarrow \delta_h(p, t)$ と置換して解くことにより

$$\delta_h(p, t) = -t \log p > 0 \quad (19)$$

を得る。

〈3・3〉 遷移の表現 今度は、一般的な解空間として、対称かつ均質で大きさが n の近傍により定まる図 5 (a) のような解空間を考え、エネルギーの異なる 2つの解 s_i, s_j ($s_i \in N(s_j), s_j \in N(s_i)$) 間の遷移について考える。ただし、温度を t とし、解のエネルギー差を

$$\delta_s(s_i, s_j) = \delta > 0 \quad (20)$$

とする。

s_i から s_j への遷移はエネルギー差が正であり、式 (11) より遷移確率は

$$p_t(s_i, s_j, n, t) = (1/n) \exp(-\delta/t) \quad (21)$$

である。これは従来手法では、図 4 (c) 同様、高さ δ ほど飛び上がるような移動として表現されるが、式 (19) に式 (21) を代入すればわかるように、本手法では

$$\delta_h(p_t(s_i, s_j, n, t), t) = \delta + t \log n \quad (22)$$

の高さを飛び上がるような移動として表現されなければならない。一方、 s_j から s_i への遷移はエネルギー差が非正（負）であり、式 (12) より遷移確率は

$$p_t(s_j, s_i, n, t) = 1/n \quad (23)$$

である。これは従来手法では、図 4 (b) 同様、落ちるような移動として表現されるが、式 (19) に式 (23) を代入すればわかるように、本手法では

$$\delta_h(p_t(s_j, s_i, n, t), t) = t \log n \quad (24)$$

図 6 遷移の表現
Fig. 6. Expression of transitions.

の高さを飛び上がるような移動として表現されなければならない。

以上のような移動を表現するために、本手法では、従来手法と同じように解を配置しエネルギーを描いた後、更に図 5 (b) のように、解間に、飛び上がるべき高さを表す長さ $t \log n$ の線を描く。この図では、例えば s_i から s_j への遷移は、図 6 (a) のように、まず s_i のエネルギー値から一旦飛び上がり、すぐに s_j のエネルギー値へ落ちるという 2 段階の移動として表される。最初に飛び上がるべき高さは式 (22) より $\delta + t \log n$ であるが、図 5 (b) ではその高さが正しく表現される。一方、逆方向の s_j から s_i への遷移も同様に図 6 (b) のように 2 段階の移動として表される。最初に飛び上がるべき高さは式 (24) より $t \log n$ であるが、この高さも図 5 (b) では正しく表現される。すなわち、図 5 (b) は、 s_i, s_j 間の両方向の遷移の確率を高さと正しく表現している。以上の考察では式 (20) のように 2 つの解のエネルギーが異なると仮定したが、2 つの解のエネルギーが等しい場合も、同様の考察により、図 5 (b) で遷移確率を表現できることがわかる。

なお、直接遷移できない解が並んで配置される場合は、解間にエネルギー障壁の大きさを表す線をまず描き、更にその上に $t \log n$ の長さの線を描くこととする。例えば図 3 の s_1 から s_2 へは直接遷移できない。この場合、 s_1, s_2 間のエネルギー障壁の大きさは s_6 のエネルギー値であるため、それより更に $t \log n$ ほど高い線を s_1, s_2 間に描く。同様に各解間のエネルギー障壁の大きさを求め線を描くと、図 3 の解空間は図 6 (c) のように表現される。従来手法では s_1, s_2 間のエネルギー障壁の大きさを表現できなかったが、図 6 (c) からは、「 s_1 から s_2 へ遷移する際は、 s_1, s_2 間に描かれた線で表されるような遷移確率に対応するエネルギーの壁を越えなければならない」ことを読み取ることができる。ここで、 s_1, s_2 間の線は s_1 から s_2 への遷移確率を直接表しているわけではなく、エネルギー障壁の大きさに対応する確率を表現していることに注意しなければならない。

一般的な解空間において、任意の解 s_i から任意の解 s_j へ他の解を経由して遷移する場合、そのような遷移の経路は複数存在し得る。そのような各経路におけるエネルギーの壁のうちで最も低い壁の高さが、既に定義した通り、 s_i, s_j 間のエネルギー障壁の大きさである。本手法による描画

図 7 式 (25) を用いて得られた図 5 の解空間の描画
Fig. 7. Plot of the solution space shown in Fig. 5 based on eq. (25).

では、 s_i と s_j が離れて配置されていたとしても、 s_i, s_j 間に描かれた線のうちで最も上端の高いものが、 s_i, s_j 間のエネルギー障壁の大きさに対応する確率を表現している。これは、解の配置順序の定め方、及び解間に描く線の長さの決め方より明らかである。

〈3・4〉 遷移確率の表現 図 5 (b) は解間の遷移確率を表そうとした図である。しかし、解のエネルギーをグラフの y 座標としているため、同図から遷移確率を読み取ることは難しい。これに対し、以下では、温度 t におけるエネルギー f_x を

$$y(f_x, t) = -\exp(-f_x/t) \dots\dots\dots (25)$$

という y 座標に対応させることにより、描画から遷移確率を読み取れるようになることを示す。

再び、図 5 のような解空間を考える。解 s_i のエネルギーは $f(s_i)$ であり、図 5 (b) における解 s_i, s_j 間の線の上端に相当するエネルギーは

$$f_{ij} = f(s_i) + \delta + t \log n \dots\dots\dots (26)$$

である。これらのエネルギーに対応する y 座標 $y(f(s_i), t)$, $y(f_{ij}, t)$ を式 (25) により求め、それらの比を求めると

$$\frac{y(f_{ij}, t)}{y(f(s_i), t)} = (1/n) \exp(-\delta/t) \dots\dots\dots (27)$$

となる。これは s_i から s_j への遷移確率 $p_t(s_i, s_j, n, t)$ である。また、解 s_j のエネルギー $f(s_j)$ と f_{ij} について同様の比を求めると、やはりその値は s_j から s_i への遷移確率 $p_t(s_j, s_i, n, t)$ となる。すなわち、式 (25) を用いて得られた描画からは、図 7 のように、遷移確率を y 座標の比として読み取ることができる。

〈3・5〉 描画手法 以上の考察に基づき本論文で提案する描画手法の概要を図 8 に示す。また、本手法により得られる解空間の描画の様子を図 10 に示す。

本手法では、従来手法と同様に、近傍に基づいて解を配置しそのエネルギーを描画するため、従来手法同様、グラフの凸凹 (図 10 A) を見ることにより、局所最適解からの脱出が容易かどうかを推測できる。また、従来手法同様、水平線でグラフを切ったときに生じる区間 (図 10 B) を見て、あるエネルギー以下で互いに到達可能な解の集合の大

- I. 「任意のエネルギー f に対し、互いにエネルギー f 以下で到達可能な解が連続して並ぶ」ような解の順序 P を求める。
 - I-1. すべての解を生成する。
 - I-2. 「互いにエネルギー f 以下で到達可能な解」からなる図 9 のような（階層的な）解のクラスタリング C を、ボトムアップに形成する。
 - I-3. C に基づき P を求める。
- II. P の順に解を x 軸方向に並べ、解のエネルギーのグラフを描く。ただし、温度 t におけるエネルギー f は、 $-\exp(-f/t)$ という y 座標に対応させる。
 - II-1. 各解のエネルギーを表現する折れ線を描く。
 - II-2. 更に解間の遷移確率を表現するために、解間に垂直線分を描く。

図 8 描画手法

Fig. 8. Outline of the proposed method.

図 9 階層的な解のクラスタリング C

Fig. 9. Hierarchical clustering C of solutions.

図 10 本手法による解空間描画

Fig. 10. Example of a solution space plot generated by the proposed method.

きさを知ることができる。ただし本手法では $\langle 3 \cdot 3 \rangle$ で述べたように、垂直線分によりエネルギー障壁の大きさを正しく表現するため、図 3 のように従来手法では正しく表現できない解空間も、正しく表現できる。

従来手法では、遷移確率が描画に表現されない。例えば $\langle 3 \cdot 1 \rangle$ で述べたように、近傍の大きな悪い解空間が、良い解空間と同様になだらかなグラフとして表現されてしまう。それに対し本手法では、 $\langle 3 \cdot 4 \rangle$ で述べたように、垂直線分の上端の位置（図 10 C）を見て遷移確率を判断できる。

また $\langle 3 \cdot 1 \rangle$ で述べたように、従来手法ではエネルギーに基づいて描画を生成するため、温度の影響が描画に反映されない。それに対し本手法では、遷移確率に基づいて描画を生成するため、遷移確率を通して温度の影響が描画に反映される。

図 11 文献 (7) の SA における解空間

Fig. 11. Plots of a solution space explored in SA described in Ref. (7).

4. 評価

本手法を、オブジェクト指向スクリプト言語 Ruby⁽⁶⁾ を用いて、VT-Alpha600H/U (18.0 SPECint95) 上で実現し、SA における解空間を視覚化した。以下では、例として、方形パッキング手法⁽⁷⁾における解空間の描画例を示し、本手法の有効性を示す。具体的には、4 つの方形をなるべく小さな領域に詰め込むように配置するという組合せ最適化問題を考え、更にその問題に対して SA に基づく文献 (7) を適用したとし、そのときの解空間を視覚化する。4 つの方形は、各辺の長さが 100 以下になるようにランダムに生成した。なお、文献 (7) では一つの解を方形系列の対で表現するため、解の総数は $4!^2 = 576$ である。また、以下に示す描画を得るために要した CPU 時間は 5-235 秒であった。

まず、「片方の方形系列において隣り合う 2 つの方形を交換する」ことにより定義される大きさが 6 の近傍を考え、温度が 5,000 のときの解空間描画を生成した。その結果を図 11 に示す。図 10 と比較すればわかるように、本手法による描画では垂直線分が非常に密集し、黒い領域として表されている。 $\langle 3 \cdot 5 \rangle$ で述べた通り、その領域の下側境界は従来手法による描画と同様の凸凹になっている。また、上側境界には、従来手法による描画には無い垂直線分がいくつか存在し、 $\langle 3 \cdot 5 \rangle$ で述べた通り、エネルギー障壁の大きさがより正確に表されているとわかる。

また、比較のため、大きさの等しい別の適当な近傍を考え、同様に解空間描画を生成した。その結果を図 12 に示す。明らかに同図の方が起伏に富んでおり、SA を適用した際に局所最適解に捕らわれやすいと予想できる。

なお、実際に SA を実行すると、図 11 の近傍を用いた場合の方が、平均して良い解が得られた。図 12 の近傍を用

図 12 大きさが等しい別の近傍に対する解空間

Fig. 12. Plot of a solution space defined by another set of neighbor relations, where the size of neighbor is same as one in Fig. 11.

図 13 大きな近傍に対する解空間

Fig. 13. Plots of a solution space defined by another set of neighbor relations, where the size of neighbor is bigger than one in Fig. 11.

いた場合、良い解が得られる場合もあるが得られないことも多く、得られる解のエネルギーにばらつきが大きい。この結果は、明らかに、図 12 の方が局所最適解に捕らわれやすいであろうという予想を支持している。

次に、解集合全体を各解の近傍とし、同様に解空間描画を生成した。その結果を図 13 に示す。〈3・1〉で述べた通り、従来手法では、あたかも良い解空間であるかのようななだらかな描画が得られてしまう。しかし本手法の描画からは、黒い領域の上側境界と x 軸の間のすき間が（ほとんど）無いことを見てとれる。図 7 に示したような距離の比が遷移確率を表していることを考えると、これは任意の 2 つの解間の遷移確率が小さいことを表している。したがって、良い解（近似最適解）への遷移が起こる確率も小さく、収束が遅いとわかる。近傍が大きな場合は、各近傍解の選択確率が小さくなり遷移確率も小さくなるため、このように x 軸と黒い領域のすき間が狭い解空間描画が得られる。

更に図 11 で用いた近傍を用い、温度が異なるときの解空間描画をいくつか生成した。その結果を図 14 に示す。こ

図 14 温度による解空間の変化

Fig. 14. Solution space plots at different temperatures.

で、再度、図 7 について考える。図 7 の描画において、解 s_i , s_j に対応する y 座標 $y(f(s_i), t)$, $y(f(s_j), t)$ の差が大きいということは、 s_i から s_j への遷移確率 $p_t(s_i, s_j, n, t)$ と s_j から s_i への遷移確率 $p_t(s_j, s_i, n, t)$ の差が大きいということを意味する。これは、遷移確率が図 7 に示したような比で与えられることを考えると、容易に理解できる。

温度が 25,000 のときには、黒い領域の下側境界の起伏が緩やかで、各解に対応する y 座標の差も小さく、よりエネルギーの大きな解から小さな解へと遷移する確率と、それらの解間を反対向きに遷移する確率に大きな差はない。したがって、一旦局所最適解へ遷移しても容易に脱出できる。一方、温度が 1,000 のときには、起伏が激しく、 y 座標の差も大きく、遷移の向きによる確率の差も大きい。そのため、高いエネルギーの壁を乗り越えるのは困難である。このように本手法では、描画からはっきりと温度の影響を読み取ることができる。

5. ま と め

本論文では、SA における遷移確率の表現について考察し、遷移確率を適切に表現するような解空間の描画手法を提案した。更に実際に生成した解空間描画により、本手法の有効性を示した。

本手法ではすべての解を列挙する必要がある。そのため、SA を用いる必要があるような規模の組合せ最適化問題に対して、本手法をそのまま適用することはできない。しかし、ほとんどの組合せ最適化問題において、ある規模の問題に対して効率の良い近傍は、異なる規模の問題に対しても同じように効率的である。すなわち、規模が異なっても解空間の性質は余り変らないと考えられる。したがって、実際よりも小さな規模の問題に対して得られた解空間描画でも、解空間の解析・評価には十分に役立つと思われる。

どうしても、実際の問題の解空間が調べたい場合は、解空間の一部を描画することもできる。例えば、ある解から2回（もしくは適当な回数）の遷移により到達できる解の集合を求め、本手法を適用すると、その解の周辺の解空間を描画することができる。これについては現在検討中であり、稿を改めて報告する予定である。

(平成11年9月16日受付, 同11年12月27日再受付)

文 献

- (1) C. R. Reeves: モダンヒューリスティックス (1997) 日刊工業新聞社
- (2) 久保幹雄: 「メタヒューリスティックス」, 離散構造とアルゴリズム IV, 171~230 (1995) 近代科学社
- (3) 久保幹雄: 「巡回セールスマン問題への招待 III」, オペレーションズ・リサーチ, **39**, 3, 156~162 (1994)
- (4) R. H. J. M. Otten and L. P. P. van Ginneken: The Annealing Algorithm (1989) Kluwer Academic Publishers
- (5) 三宮信夫・喜多一・玉置久・岩本貴司: 遺伝アルゴリズムと最適化 (1998) 朝倉書店
- (6) まつもとゆきひろ・石塚圭樹: オブジェクト指向スクリプト言語 Ruby (1999) アスキー
- (7) 長尾明・澤卓・重弘裕二・白川功・神戸尚志: 「方形パッキング法の一算法」, 電子情報通信学会論文誌, **J81-A**, 10, 1362~1371 (1998)

重 弘 裕 二 (正員) 1965年生。1992年3月大阪大学大学院博士後期課程単位修得退学。同年4月同大学助手。1998年4月大阪工業大学工学部電気工学科講師。博士(工学)。VLSI設計自動化, 各種最適化アルゴリズムなどの研究に従事。電子情報通信学会, IEEE, 情報処理学会, エレクトロニクス実装学会, 計測自動制御学会, 電気学会会員。

長 尾 明 (非会員) 1962年生。1986年3月神戸大学大学院修士課程了。同年4月シャープ株式会社入社。レイアウト検証, 自動配置配線などの半導体CADの研究に従事。1993年4月社会人を含む選抜により大阪大学大学院博士後期課程に入学。1996年9月同課程単位修得退学。現在, 設計技術開発センター主任。博士(工学)。電子情報通信学会, IEEE, エレクトロニクス実装学会会員。

増 田 達 也 (正員) 1950年生。1981年3月大阪大学大学院博士課程単位修得退学。日本学術振興会奨励研究員を経て, 1985年4月大阪大学工学部電気工学科助手。1987年4月大阪工業大学工学部電気工学科講師。現在同教授。工学博士。ニューラルネットワーク, ファジィ制御, 遺伝的アルゴリズム, 多目的意志決定, システム構造分析などの研究に従事。電気学会, 電子情報通信学会, 計測自動制御学会, システム制御情報学会, 日本ファジィ学会, 日本オペレーションズ・リサーチ学会, IEEE各会員。