巡回セールスマン問題

モデリングとシミュレーション特論

2019年度

只木進一

サンプルプログラム

- https://github.com/modeling-and-simulation-mc-saga/TSP

例：巡回セールスマン Traveling Salesman Problem

- N個の都市c_iと距離$d(c_i, c_j)$
  - 完全グラフと仮定
  - 本来通過できない都市間は距離を非常に大きく設定する
- 全ての都市を一回だけ回って、出発点に戻る経路のうち、最短経路を求める
  - 全部調べて、一番良いものを選ぶ

- 可能な経路：$(N-1)!/2$
  - Nとともに指数関数的に増大
  - 現実的問題が実際的時間で解けない
- Stirlingの公式

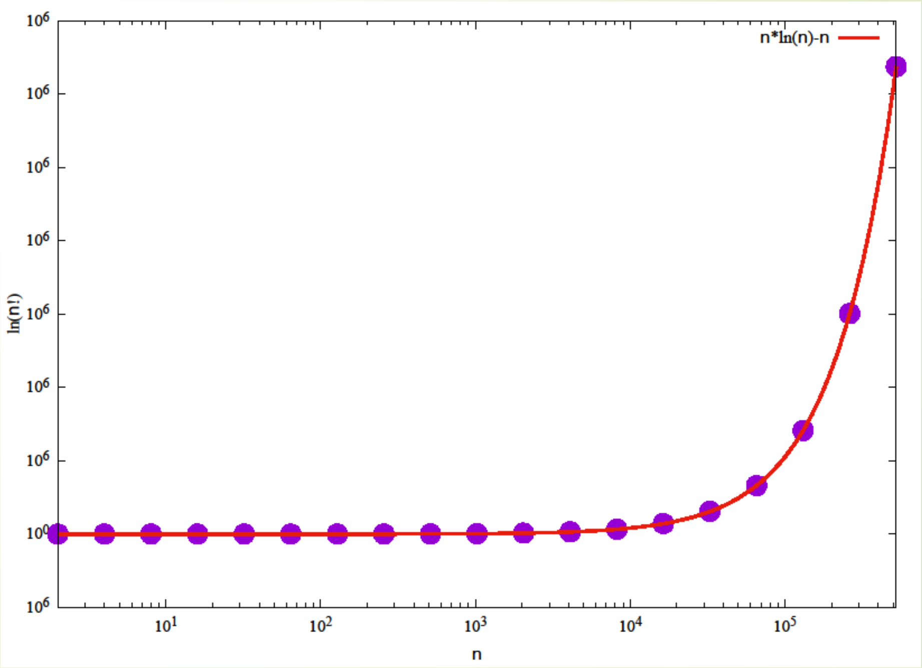
$$\ln n! = n \ln n - n + O(\ln n)$$

n	$n!$
1	1
2	2
3	6
4	24
5	120
6	720
7	5040
8	40320
9	362880
10	3628800

手に負えません！

Uncontrollable!

$$\ln n! = \sum_{k=1}^{n} \ln k$$



最適化問題の近似解
Approximate optimum solutions

- 現実的な最適化問題は、真の最適解を求めることが本当の目的か？
  - 適正な時間内に、良い解を求めれば良いのではないか？
  - 短時間で、良い近似解を求める方法は？

自然は上手に最適化している？

the Nature can optimize?

- 徐冷による結晶成長
  - ゆっくり冷えると、きれいな結晶に
- タンパク質
  - 生体内での合成で、適正な構造
- アリの食餌
  - 次第に最短距離を利用する
- 遺伝
  - 適応度の高い種が生き残る

近似的最適化手法を自然から学ぶ

自然がしている最適化?
Optimization in the Nature?

- でたらめに、解空間を調べる
- よさそうなところを丁寧に調べる

- すごく素朴な
  - 合理化の方法は？
  - 様々な近似解法

確率過程
stochastic processes

- 過程が、非決定的に進む
  - 例：すごろく：さいころの目だけ、進む（それぞれ、確率1/6）
  - 例：ある状態Aから確率pで状態Bへ変化し、確率$1-p$でそのままAに留まる

simulated annealing (徐冷)
温度が徐々に下がるのをまねる

- 有限温度
  - 温度によって指定された遷移確率で、でたらめに状態を探索
  - 高温ほどでたらめさが大きい
    - 温度に応じた範囲で探索
    - Monte Carlo Simulation
- 徐々に温度を下げる
  - 探索範囲を狭くする

巡回路とその変更
Hamilton path and its update

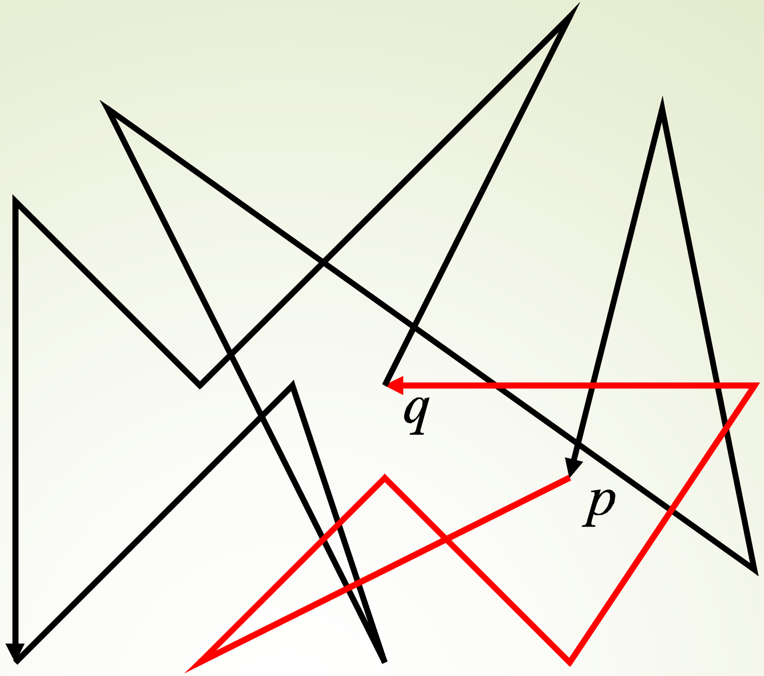
- N都市を巡るある順路μ
  - $\mu = \left[c_0^\mu, c_1^\mu, \cdots, c_{N-1}^\mu, c_N^\mu = c_0^\mu\right]$
- 経路長：$D^\mu = \sum_{k=0}^{N-1} d\left(c_k^\mu, c_{k+1}^\mu\right)$

- 経路μからでたらめに二点(p, q)を選ぶ

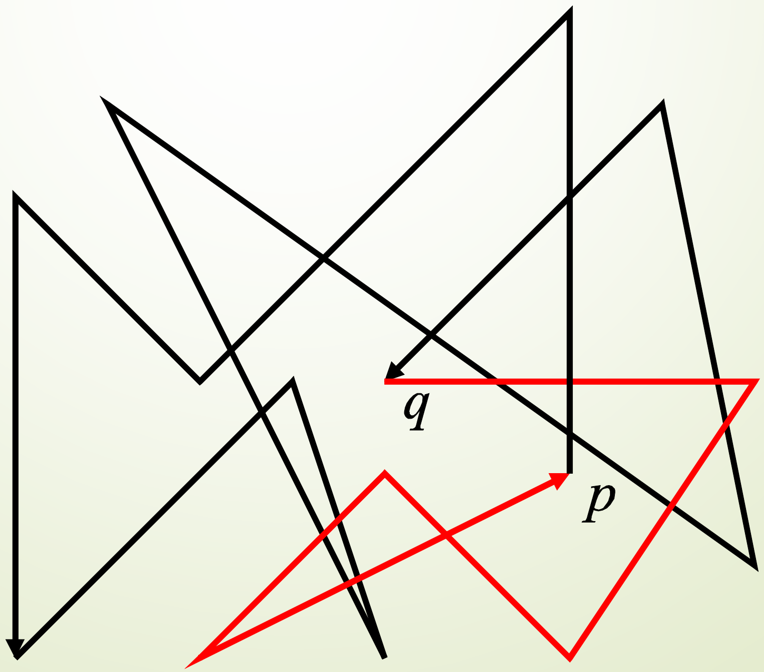
$$\left[c_0^\mu, c_1^\mu, \cdots, c_p^\mu, c_{p+1}^\mu, \cdots, c_{q-1}^\mu, c_q^\mu, \cdots, c_N^\mu\right]$$

- 二点(p, q)の間を反転して新しい経路νとする

$$\nu = \left[c_0^\mu, c_1^\mu, \cdots, c_q^\mu, c_{q-1}^\mu, \cdots, c_{p+1}^\mu, c_p^\mu, \cdots, c_N^\mu\right]$$



μ

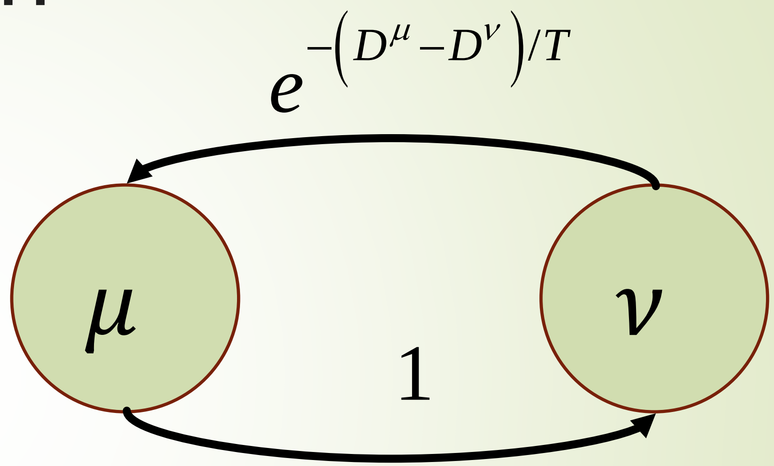


ν

- $D^\nu < D^\mu$ならば
  - 新しい経路νを選択する
  - 短い経路ならば選ぶ
- $D^\nu \geq D^\mu$ならば
  - 確率$\exp(-(D^\nu - D^\mu)/T)$で新しい経路νを選択する
  - 長い経路ならば、温度に依存した確率で選ぶ

状態遷移イメージ
state transition

- $D^{\nu} \leq D^{\mu}$の場合



- 平衡になるには

$$e^{-\left(D^{\mu}-D^{\nu}\right)/T} p(\nu) = p(\mu)$$

$$p(\nu) \propto e^{-D^{\nu}/T}, \qquad p(\mu) \propto e^{-D^{\mu}/T}$$

- 経路変更を十分繰り返す
- ある温度Tで、順路μが実現する確率

$$P(\mu) = Z^{-1}\exp\left(-D^{\mu}/T\right)$$

$$Z = \sum_{\mu}\exp\left(-D^{\mu}/T\right)$$

  - Zは、規格化定数。分配関数とも言う。
  - 経路長の長い経路は指数関数的に少ない確率で発生

有限温度の統計力学

Statistical Physics at Finite Temperature

- エネルギー順位が$\{E_i\}$である系
- 温度T
- Boltzmann定数k_B

$$P_i = \frac{1}{Z} e^{-E_i/k_B T}$$

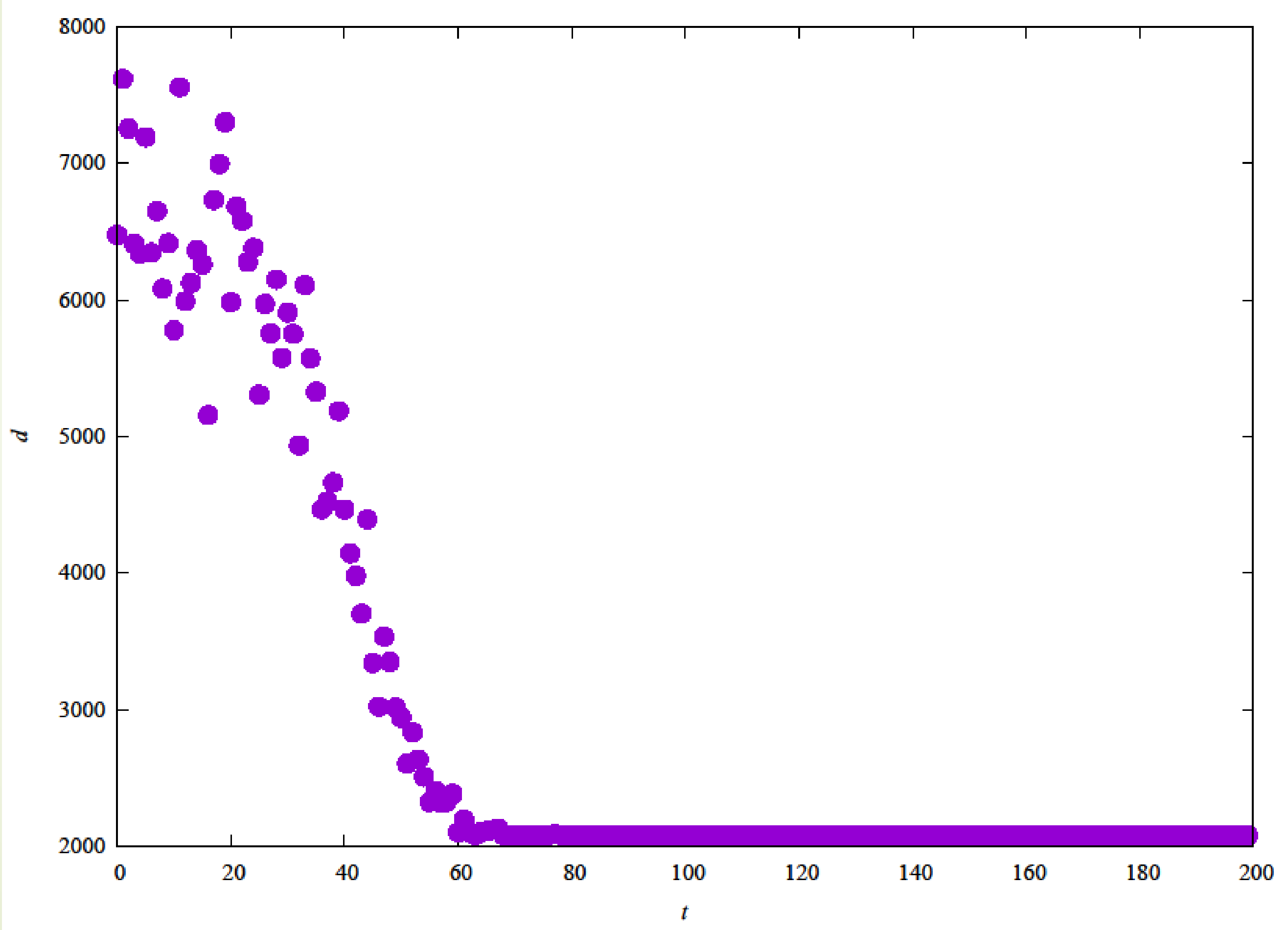
$$Z = \sum_i e^{-E_i/k_B T}$$

徐冷
annealing

- 高温
  - 様々な経路を試す
- 温度をゆっくりと下げていく
  - 選択の幅が次第に狭くなる
- 最短経路のものだけが生き残る

クラス設計
Class Plan

- 経路のクラスRoute
  - List<Point> path : 頂点列
  - double pathLength : 経路長
- Simulationクラス
  - 新しい経路への確率的変更
  - 温度を下げる


8000
7000
6000
5000
4000
3000
2000
d
0
20
40
60
80
100
120
140
160
180
200
t