

MAX-MIN Ant System における効率的なフェロモンの初期化法

Effective Pheromone Trail Initialization in MAX-MIN Ant System

落合 純一^{*1}
Junichi Ochiai

狩野 均^{*2}
Hitoshi Kanoh

^{*1} 筑波大学大学院システム情報工学研究科
Graduate School of System and Information Engineering, University of Tsukuba

^{*2} 筑波大学システム情報系
Faculty of Engineering, Information and Systems, University of Tsukuba

In this paper, we present a method to improve the performance of MAX-MIN Ant System (MMAS) for the traveling salesman problem. The proposed method gives deviations from the initial pheromone trails by using sub tours calculated by a greedy algorithm. For the purpose of evaluating the proposed method, we added pheromone trail initialization of conventional methods to MMAS. We also describe the conventional methods and how to add these pheromone trail initialization to MMAS. The experimental results using benchmark problems with 51 to 318 cities suggested that the proposed method is better than the conventional method in the quality of the solution.

1. はじめに

近年、蟻の採餌行動をモデル化した最適化手法であるアントコロニー最適化法 (ACO) の研究が活発に行われ、巡回セールスマン問題 (TSP) などの組合せ最適化問題に対して、他のメタヒューリスティクスよりも有効であることが示されている[Dorigo 04]。現実の蟻は、地面のフェロモンを感知して餌にたどり着き、自身もフェロモンを分泌しながら餌を巣に運ぶ。よって、蟻が多く通る場所のフェロモンの濃度は高くなる。一方、フェロモンは揮発性であるため、蟻が通らない場所のフェロモンの濃度は小さくなる。ACO は、解の情報をフェロモンとして扱いながら探索を進める。その結果、良い解の周辺はフェロモン濃度が高くなって探索が集中的に行われ、それ以外の場所にフェロモンが残っていたとしても濃度は徐々に小さくなる。よって、フェロモンの扱い方次第で ACO の性能が大きく異なる。

代表的な ACO に MAX-MIN Ant System (MMAS) [Stützle 00]がある。MMAS の一番の特徴は、フェロモンに下限値と上限値を適切に与えていることである。フェロモンに上限値が与えられることで、その周辺のみが探索されることを防ぐ。また、フェロモンに下限値が与えられることで、どのような解も探索される可能性が残ることから、遺伝的アルゴリズムにおける突然変異の効果を得られる。

一方、探索前に有用な解の情報を計算し、フェロモンの初期化に利用することで性能を向上させる手法が提案されている [Tsai 04][亀田 07][Kanoh 10][Dai 09]。これらの手法は、フェロモンの初期化時にフェロモンに偏りを与えることで探索空間を狭め、効率的に探索を進めるものである。

本研究では、性能の向上を目的に、新しいフェロモンの初期化方法を提案する。フェロモンの初期化に用いる情報は、汎用性と計算速度から、Greedy 法[Dorigo 04]に基づいたものを利用する。フェロモンの初期化後の探索を担う ACO は、代表的な ACO である MMAS を用いた。フェロモンの初期化法を評価するために、従来手法[Tsai 04][亀田 07][Kanoh 10][Dai 09]のフェロモンの初期化処理を MMAS に組み込み、提案手法と

比較した。対象問題は TSP とし、TSP のベンチマークとして公開されている TSPLIB[TSPLIB]の中から都市数 51-318 の問題を選び実験を行った。

2. 関連研究

2.1 巡回セールスマン問題 (TSP)

巡回セールスマン問題 (TSP) は完全グラフ $G = (N, A)$ として表現される。ここで、 N は頂点集合であり、 A は辺集合である。TSP では頂点を都市として扱い、各都市間の辺には距離が与えられている。TSP の目的は、全ての都市を 1 回だけ通る最短の巡回路を求めることである。

TSP の代表的な構築法に Nearest Neighbor 法 (NN 法) がある。NN 法は Greedy 法の 1 つであり、まずランダムな都市を 1 つ出発地点とし、出発地点から最も近い都市を訪問する。次に、現在の都市から最も近い未訪問都市を訪問し、全ての都市を訪問するまでこの処理を繰り返す。最後に出発地点に戻り、巡回路が作成される。NN 法で作成した巡回路は、距離が短い辺を順に選択していることから、最適解の辺が含まれやすい。

2.2 MAX-MIN Ant System (MMAS)

一般的な ACO のアルゴリズム[Dorigo 04]を図 1 に示す。ACO では、初期化の後、3 つの主な処理を探索の終了条件を満たすまで繰り返す。まず、複数の蟻による解の作成を行う。次に、オプションで指定されているならば作成された解に対して局所探索を行う。最後に、作成された解を基にフェロモンの更新を

Procedure ACO ()

```
Set parameters;
Initialize pheromone trails;
while (terminal condition not met) {
  Construct ant solutions;
  Apply local search; /* option */
  Update pheromone;
}
```

図 1 一般的な ACO のアルゴリズム

連絡先: 落合純一, 筑波大学大学院システム情報工学研究科,
〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, 029-853-6909,
ochiai@kslab.cs.tsukuba.ac.jp

行う。フェロモンとは、各頂点間の辺に与えられている値であり、良い解に含まれている辺のフェロモンの値は大きくなり、それ以外の辺のフェロモンの値は小さくなることで探索が進む。以下では、TSPを対象にした場合の、MMASにおける蟻による解の作成、フェロモンの更新、フェロモンの初期化について詳しく述べる。

複数の蟻はランダムな初期都市に配置され、確率的に都市を移動し、初期都市に戻る。蟻 k が都市 i にいるとき、次に移動する都市として j を選ぶ確率 p_{ij}^k は次の式で定義されている。

$$p_{ij}^k = \begin{cases} \frac{[\tau_{ij}]^{\alpha} [\eta_{ij}]^{\beta}}{\sum_{l \in N^k} [\tau_{il}]^{\alpha} [\eta_{il}]^{\beta}} & \text{if } j \in N^k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 N^k は蟻 k の未訪問都市の集合、 τ_{ij} は都市 i, j 間のフェロモンの値、 α はフェロモンの重み、 β は距離の重みである。 η_{ij} はヒューリスティクス値と呼ばれ問題ごとに異なる値であり、TSPの場合は都市 i, j 間の距離の逆数となる。

フェロモンの更新は次の式で定義されている。

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &\leftarrow [(1-\rho)\tau_{ij} + \Delta\tau_{ij}^{\text{best}}]_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} \\ [x]_b^a &= \begin{cases} a & \text{if } x > a \\ b & \text{if } x < b \\ x & \text{otherwise} \end{cases} \\ \Delta\tau_{ij}^{\text{best}} &= \begin{cases} \frac{1}{f(s^{\text{best}})} & \text{if } (i, j) \in s^{\text{best}} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \\ \tau_{\max} &= \frac{1}{\rho \times f(s^{\text{best}})} \\ \tau_{\min} &= \frac{1 - \sqrt[n]{p_{\text{best}}}}{\left(\frac{n}{2} - 1\right) \times (1 - \sqrt[n]{p_{\text{best}}})} \times \tau_{\max} \end{aligned}$$

ここで、 ρ はフェロモンの蒸発率、 s^{best} は探索開始時からの最良解、 $f(s^{\text{best}})$ は s^{best} の目的関数値、 τ_{\max} はフェロモンの最大値、 τ_{\min} はフェロモンの最小値、 n は都市数である。 p_{best} は、最適解の経路のフェロモンの値が τ_{\max} 、それ以外の経路のフェロモンの値が τ_{\min} と仮定し、 η_{ij} を無視した場合、蟻が作成する解が最適解である確率である。一般的に p_{best} の値は 0.05 が用いられる。

フェロモンの初期化では、全ての辺のフェロモンの値をフェロモンの初期値 τ_0 にする。MMAS では、 τ_0 に τ_{\max} が用いられ、 s^{best} は NN 法で求めた解を用いる。よって、MMAS の探索は、序盤は全ての辺のフェロモンの値が大きい、有用でないと思われる辺のフェロモンの値はゆっくり小さくなり、最終的に有用と思われる辺のフェロモンの値は τ_{\max} に近く、それ以外の辺のフェロモンの値は τ_{\min} に近くなり、探索が収束する。

MMAS では、計算時間の高速化のために Candidate List[Dorigo 04]が用いられることが多い。Candidate List とは、都市ごとの距離が近い上位数都市による集合であり、一般的に Candidate List の数は 20 が用いられる。本研究では、蟻が解を作成する際に Candidate List を利用した。Candidate List を利用した蟻による解の作成について以下に示す。蟻がある都市にいるとき、その都市の Candidate List に未訪問都市が存在するならば、Candidate List の中の未訪問都市から式(1)を用いて訪問先の都市を確率的に選択する。Candidate List に未訪問都市が

存在しない場合、式(1)の選択確率が一番大きい都市を決定的に訪問先として選択する。

2.3 従来手法

MMAS だけでなく、通常の ACO のフェロモンの初期化では、全ての辺のフェロモンを一律にする。そこで、有用と思われる辺のフェロモンとそれ以外の辺のフェロモンに偏りを持たせることで、探索を効率良く進める以下の手法が提案されている。

(1) Tsaiらの手法[Tsai 04]

Tsai らは、NN 法で作成した 2 つの巡回路を利用する方法と、NN 法を改良した手法 (DNN 法) で作成した 2 つの経路を利用する方法を提案した。

NN 法で作成した 2 つの解を利用する方法は、辺が 2 つの巡回路の両方に含まれている場合は $3\tau_0$ で初期化し、辺が片方の巡回路に含まれている場合は $2\tau_0$ で初期化し、どちらの巡回路にも含まれていない場合は τ_0 で初期化する。

DNN 法は、最初にランダムな都市と、その都市から最も近い都市を選択する。次に、2 つの都市を起点として、交互に最も近い未訪問都市を訪問し、未訪問都市が無くなるまで繰り返す。よって、DNN 法では 2 つの経路が作成される。DNN 法を利用する方法は、辺が DNN 法で作成した経路に含まれている場合は $2\tau_0$ で初期化し、含まれていない場合は τ_0 で初期化する。

(2) 亀田らの手法[亀田 07][Kano 10]

亀田らは、NN 法で複数の巡回路を作成し、それらに対して 2-opt を適用したものを初期解として利用する方法を提案した。以下に初期解の利用方法の式を示す。

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &\leftarrow (1-r)\tau_0 + \frac{r}{n_0} \sum_{k=1}^{n_0} \delta\tau_{ij}^k \\ \delta\tau_{ij}^k &= \begin{cases} \frac{1}{f(s_{0k}^k)} & \text{if } (i, j) \in s_{0k}^k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned}$$

ここで、 n_0 は初期解の数、 s_{0k}^k は k 個目の初期解、 r は範囲 $[0,1]$ のパラメータであり、初期解を重視するほど 1 に近くなるのである。

(3) Daiらの手法[Dai 09]

Dai らは、最小全域木を利用する方法を提案した。辺が最小全域木に含まれている場合は $(\tau_0)^\theta$ で初期化し、含まれていない場合は τ_0 で初期化する。ここで、 θ は最小全域木の重みであり、 θ が大きいほど最小全域木の辺を集中的に探索することになる。

3. 提案手法

3.1 フェロモンの初期化に利用する情報

本研究では、DNN 法を繰り返して作成した複数の経路をフェロモンの初期化に利用した。DNN 法で作成する経路は、NN 法で作成した巡回路と比べて距離が大きい辺は含まれにくく、DNN 法の処理は NN 法と同様に貪欲算法に基づいているため、最適解の辺が含まれやすいと考えられる。また、貪欲算法に基づいていることから、TSP に限定するものでなく、他の組合せ最適化問題にも適用することができる。

3.2 フェロモンの初期化

フェロモンの初期化には 2 つの方法を提案する。

(1) 重複度でフェロモンに偏りを持たせる方法 (P1)

フェロモンの初期化の式を以下に示す.

$$\tau_{ij} \leftarrow \left[\left(\frac{1}{n_{\text{repeat}}} \sum_{k=1}^{n_{\text{repeat}}} c_{ij}^k \right) \tau_0 \right]_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}}$$

$$c_{ij}^k = \begin{cases} 1 & \text{if } (i, j) \in a_k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

ここで, n_{repeat} は DNN 法を繰り返す回数, a_k は k 回目の DNN 法で作成した 2 つの経路の辺集合である. DNN 法で作成したどの経路にも含まれていない辺のフェロモンは τ_{\min} で初期化され, 毎回 DNN 法で作成した経路に含まれている辺のフェロモンは τ_{\max} で初期化される. それ以外の辺のフェロモンは, DNN 法で作成した経路に現れる回数に比例する値で初期化される.

(2) 重複度でフェロモンに偏りを持たせない方法 (P2)

NN 法で複数の巡回路を作成した場合, 基本的には多くの巡回路に含まれている辺ほど最適解の辺の可能性は高い. しかし, 重複している数が小さい辺でも最適解の辺である場合もあり, 重複している数が大きい辺でも最適解の辺でない場合もある. DNN 法でも同様のことが言えるため, 重複度でフェロモンに偏りを持たせない初期化方法も提案する. このフェロモンの初期化は, DNN 法で作成した経路に含まれている辺のフェロモンは τ_{\max} として初期化し, 含まれていない辺のフェロモンは τ_{\min} として初期化するものである.

4. 評価実験

4.1 従来手法

本研究では, MMAS, Tsai らの手法 (TSAI), 亀田らの手法 (KAMEDA), Dai らの手法 (DAI) を提案手法と比較した. しかし, MMAS 以外の従来手法は, 単純に提案手法と比較できるものではないため, 以下に比較手法について示す.

(1) Tsai らの手法 (TSAI)

Tsai らは, フェロモンの初期化に 2 つの方法を提案しているが, NN 法の 2 つの解を利用する方法より, DNN 法で作成した 2 つの経路を利用する方法の方が良い結果を示されている. よって, 比較手法でも DNN 法を利用する.

Tsai らは MMAS 以外の ACO を用いており, Tsai らのフェロモンの初期化法を単純に MMAS に導入すると性能が落ちてしまう. よって, DNN 法で作成した 2 つの経路に含まれる辺のフェロモンを τ_{\max} として初期化し, 含まれていない辺のフェロモンは τ_{\min} として初期化した.

(2) 亀田らの手法 (KAMEDA)

亀田らの手法では, NN 法と 2-opt で作成した複数の巡回路をフェロモンの初期化に利用している. しかし, 本研究では局所探索法を考慮していないため, NN 法のみで作成した複数の巡回路をフェロモンの初期化に利用することとした. 亀田らの手法のパラメータである n_0 は都市数, r は 1 とした.

(3) Dai らの手法 (DAI)

Dai らの手法は, Tsai らの手法と同様に, MMAS 以外の ACO を用いているため, 単純に MMAS に導入すると性能が落ちてしまう. よって, 最小全域木に含まれている辺のフェロモンを τ_{\max} として初期化し, 含まれていない辺のフェロモンは τ_{\min} として初期化した.

4.2 実験条件

プログラムは Visual C++ 2010 で作成し, CPU は Core i7-860, メモリ容量は 8GB, OS は Windows7 64bit の環境で実験を行った. 実験の対象問題は, TSP のベンチマークとして TSPLIB で公開されている問題の中から, eil51, eil76, eil101, kroA100, kroA200, lin318 を選択し, eil51 の終了条件は 500 ステップ, eil76 の終了条件は 1000 ステップ, eil101 と kroA100 の終了条件は 1500 ステップ, kroA200 の終了条件は 2000 ステップ, lin318 の終了条件は 3000 ステップとした. 亀田らの手法の初期解の数は都市数とし, 提案手法の DNN 法の繰り返し数も都市数とした. 各手法のパラメータの値は, α は 1, ρ は 0.02 で共通とし, P1 の β は 2, P1 以外の手法の β は 5 とした. これらの条件は予備実験から求めたものである.

4.3 実験結果

本研究では, 乱数のシードを変えて実験を 50 回繰り返した. 最終ステップ後の最良解の巡回路長について, 50 回のうちの最小値, 50 回の平均値, 平均値と最適解の巡回路長との誤差を表 1 に示す. 表 1 では, 最小値が最適解の巡回路長の場合は太字にしており, 各問題で平均値が最小のものも太字にしている. 平均値を比較すると, 全ての問題で提案手法の P1 または P2 が最も良い値を示している. 最小値を比較すると, 最適解を見つけた問題数が一番多いのは TSAI, 一番少ないのは P2 であった. どの手法も最適解を見つけられなかった kroA200 と lin318 に対しては, どちらも KAMEDA が一番良い解を見つけている. 提案手法の P1 と P2 を比較すると, P1 が優っている問題数と P2 が優っている問題数は同数であり, 一概にどちらが良いとは言えない.

探索過程の例として, lin318 のステップ数に対する最良解の巡回路長を図 2 に示す. 図 2 を見ると, どの手法も 3000 ステップで収束していることがわかる. TSAI のフェロモンの初期化は, DNN 法で作成した 2 つの経路の辺を強調するため, $(n-2)$ 個の辺が強調される. KAMEDA のフェロモンの初期化は, 初期解に含まれる辺ごとのフェロモンの追加値が小さいため, 初期解に含まれる辺の多くが τ_{\min} に正規化され, τ_{\min} より大きい値でフェロモンが初期化される辺は少ない. DAI のフェロモンの初期化は, 最小全域木の辺を強調するため, $(n-1)$ 個の辺が強調される. よって, TSAI, KAMEDA, DAI は, 探索序盤では少ない辺が集中的に探索されるため, 序盤の探索効率が良い. P1 と P2 は, フェロモンが強調されている辺の数が多いため, TSAI, KAMEDA, DAI よりも序盤の探索効率は劣っている. しかし, 1000 ステップ弱で追い越していることがわかる.

各手法の違いはフェロモンの初期化のみであり, フェロモンの初期化後の処理は同じである. lin318 のフェロモンの初期化にかかる CPU 時間 (秒) と, 3000 ステップまでにかかる CPU 時間 (秒) を表 2 に示す. lin318 の各手法のフェロモンの初期化は, MMAS は NN 法を 1 回, TSAI は DNN 法を 1 回と NN 法を 1 回, KAMEDA は NN 法を 318 回, DAI は最小全域木を 1 回計算して NN 法を 1 回, P1 と P2 は DNN 法を 318 回と NN 法を 1 回行っている. 表 2 を見ると, KAMEDA, P1, P2 は, 他の手法よりもフェロモンの初期化に時間がかかっているが, 探索が収束するまでの時間を見ると, フェロモンの初期化にかかる時間の影響はないと言える.

5. おわりに

本論文では, DNN 法を複数回繰り返して得られた経路を, MMAS のフェロモンの初期化に利用する手法を提案した. 提

案手法には 2 つの初期化法があり、1 つは辺の重複度でフェロモンに偏りを与える方法、もう 1 つは DNN 法の経路に含まれる辺のフェロモンは上限値、含まれない辺は下限値として初期化する方法である。フェロモンの初期化の影響を比較するため、従来手法のフェロモンの初期化を MMAS に組み込み、TSP のベンチマークを用いて比較実験を行った。その結果、全ての問題に対して、従来手法より提案手法が有効であることが確認できた。

今後の課題として、DNN 法の起点の数を増やした評価が考えられる。起点を増やすことで、作成される経路に距離が長い辺は含まれにくくなり、より効率的なフェロモンの初期化が望める。しかし、起点を増やし過ぎると単に距離が短い辺からなる複数の経路が作成されるだけになり、性能の向上は見込めない。その他に、よりサイズが大きい問題を対象とした実験、TSP 以外の組合せ最適化を対象とした実験、局所探索法を考慮に入れた実験が考えられる。

表 1 各手法の実験結果

問題 (最適解)	手法	最小値	平均値 (最適解との誤差)
eil51 (426)	MMAS	428	428.74 (0.64%)
	TSAI	426	429.00 (0.70%)
	KAMEDA	427	429.20 (0.75%)
	DAI	426	428.40 (0.56%)
	P1	427	427.68 (0.39%)
	P2	428	428.68 (0.63%)
eil76 (538)	MMAS	538	539.90 (0.35%)
	TSAI	538	542.42 (0.82%)
	KAMEDA	538	541.22 (0.60%)
	DAI	539	540.06 (0.38%)
	P1	538	542.12 (0.77%)
	P2	538	539.44 (0.27%)
eil101 (629)	MMAS	630	634.68 (0.90%)
	TSAI	629	635.42 (1.02%)
	KAMEDA	630	638.64 (1.53%)
	DAI	631	641.82 (2.04%)
	P1	630	630.96 (0.31%)
	P2	630	637.32 (1.32%)
kroA100 (21282)	MMAS	21282	21434 (0.72%)
	TSAI	21282	21526 (1.15%)
	KAMEDA	21282	21394 (0.53%)
	DAI	21282	21437 (0.73%)
	P1	21282	21366 (0.40%)
	P2	21367	21430 (0.70%)
kroA200 (29368)	MMAS	29401	29477 (0.37%)
	TSAI	29399	29719 (1.20%)
	KAMEDA	29375	29543 (0.60%)
	DAI	29394	29636 (0.91%)
	P1	29413	29575 (0.71%)
	P2	29394	29465 (0.33%)
lin318 (42029)	MMAS	42200	42444 (0.99%)
	TSAI	42362	42887 (2.04%)
	KAMEDA	42144	42616 (1.40%)
	DAI	42175	42602 (1.37%)
	P1	42234	42467 (1.04%)
	P2	42184	42403 (0.89%)

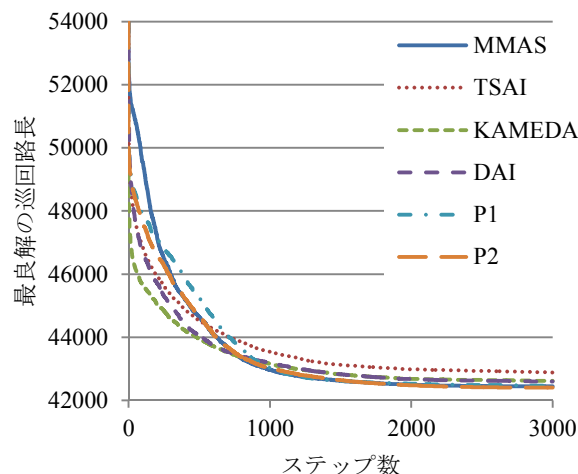


図 2 lin318 におけるステップ数に対する最良解の巡回路長

表 2 lin318 における各手法の計算時間 (秒)

手法	フェロモンの初期化	3000 ステップ後
MMAS	0.00	502.34
TSAI	0.00	488.78
KAMEDA	0.13	487.92
DAI	0.03	495.39
P1	0.11	493.84
P2	0.11	500.99

参考文献

- [Dai 09] Q. Dai, J. Ji and C. Liu: An Effective Initialization Strategy of Pheromone for Ant Colony Optimization, In Proc. of the 4th International Conference on Bio-Inspired Computing, pp. 1-4, (2009).
- [Dorigo 04] M. Dorigo and T. Stützle: Ant Colony Optimization, MIT Press, (2004).
- [Dorigo 10] M. Dorigo and T. Stützle: Ant Colony Optimization: Overview and Recent Advances, Handbook of Metaheuristics, International Series in Operations Research & Management Science, Vol. 146, pp. 227-263, Springer, (2010).
- [Kano 10] H. Kano and Y. Kameda: Pheromone Trail Initialization with Local Optimal Solutions in Ant Colony Optimization, In Proc. of the 2010 International Conference of Soft Computing and Pattern Recognition, pp. 338-343, (2010).
- [Stützle 00] T. Stützle and H. H. Hoos: MAX-MIN Ant System, Future Generation Computer System, Vol. 16, No. 8, pp. 889-914, Elsevier, (2000).
- [Tsai 04] C. -F. Tsai, C. -W. Tsai and C. -C. Tseng: A New Hybrid Heuristic Approach for Solving Large Traveling Salesman Problem, Information Sciences, Vol. 166, pp. 67-81, Elsevier, (2004).
- [TSPLIB] <http://comopt.ifl.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/>
- [亀田 07] 亀田陽介, 狩野均: 局所最適解をフェロモン初期化に用いたアントコロニー最適化法による TSP の解法, 情報処理学会数理モデル化と問題解決研究会, MPS-63-28, pp. 109-112, (2007).