

A-017

レプリカのコスト分布の重なり率を用いた温度調節機能を持つレプリカ交換法 Replica Exchange Method with Adaptive Temperature by Overlap Rate of Cost Distribution of Replica

岡本 啓吾

Keigo Okamoto

法政大学大学院理工学研究科

平原 誠

Makoto Hirahara

法政大学理工学部

組合せ最適化問題の解法の一つであるレプリカ交換法では、レプリカ毎に温度を設定する必要があるが、設定した温度が適切でないと解交換がうまく行われず良好な解を得ることができない。適切な温度に設定するには人手により試行錯誤する必要がある。本研究では、レプリカのコスト分布の重なり具合から解交換の起こりやすさを調節することで温度を自動調節するレプリカ交換法を提案する。本手法を巡回セールスマン問題に適用したところ、温度調節なしのレプリカ交換法やシミュレーテッドアニーリング (SA) より高性能であることが確認された。

1. はじめに

現代社会において、メタ戦略を用いた組合せ最適化問題の研究が多くなされており、その実用的な問題例として郵便配達経路の最適化やコンテナの積荷の最適化[1]などが挙げられる。

このような最適化問題の解法の一つにレプリカ交換法[2]がある。レプリカ交換法は、レプリカ毎に温度を予め設定し、各レプリカでの解探索、及びレプリカ間での解交換を行う。低温レプリカでの探索で局所解に陥っても、解交換によって高温レプリカで探索が行われれば局所解から脱出し、より良い解にたどり着くことが期待できる。

しかし、良好な解を得るにはレプリカ毎の温度を手手により試行錯誤して決定する必要がある。この問題を解決するために、遺伝的アルゴリズムを利用した自動温度調節機能を持つレプリカ交換法[3]や探索に有効な温度範囲を自律的に探索するレプリカ交換法[4]などの研究が行われてきた。しかし、これらの手法は自動温度調節を行うためのパラメータが多く、そのチューニングが困難である。

本研究では、パラメータの数を少なくした自動温度調節機能をレプリカ交換法に導入することによって温度設定の手間をなくすことを目的とする。また、温度調節を行う場合と行わない場合との性能比較を、巡回セールスマン問題を通じて行う。

2. 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題(TSP)とは、都市の集合と都市間の移動コストが与えられたとき、すべての都市をちょうど一度ずつ訪問し出発点に戻る巡回路 x の総移動コスト $E(x)$ が最小のものを求める組合せ最適化問題である。本研究で扱う巡回セールスマン問題は以下のように定義される。 N 個の都市の集合を $V = \{1, 2, \dots, N\}$ 、都市 i と都市 j の間の移動コストを d_{ij} とすると、総移動コスト $E(x)$ は次式で表される。

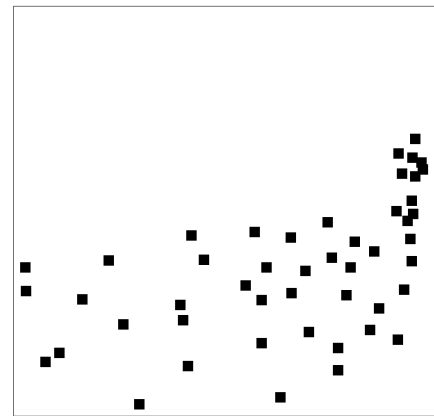


図 1 TSP 問題例

$$E(x) = \sum_{k=1}^{N-1} d_{k,k+1} + d_{N,1} \quad (1)$$

本研究では、TSP のベンチマーク集である TSPLIB[5]の問題を使用する。図 1 に問題例を示す。

3. レプリカ交換法

3.1 メトロポリス法

メトロポリス法とは、現在の解 x から生成した新しい解 y の受理判定基準の与え方である。メトロポリス法のアルゴリズムを以下に示す。

- ①現在の解 x から新しい解 y を生成する。
- ②解 y の受理判定を行う。解 y の受理確率 $P(y)$ は

$$P(y) = \begin{cases} 1 & E(x) \geq E(y) \\ \exp\left(-\frac{E(x)-E(y)}{T}\right) & E(x) < E(y) \end{cases} \quad (2)$$

で与えられる。ここで、 T は温度パラメータを表している。温度 T が高いほど受理確率は高く、温度 T が低いほど受理確率は低くなる。

メトロポリス法によるサンプリングで得られる解のコスト分布は一般的に図2のようなベル型である。

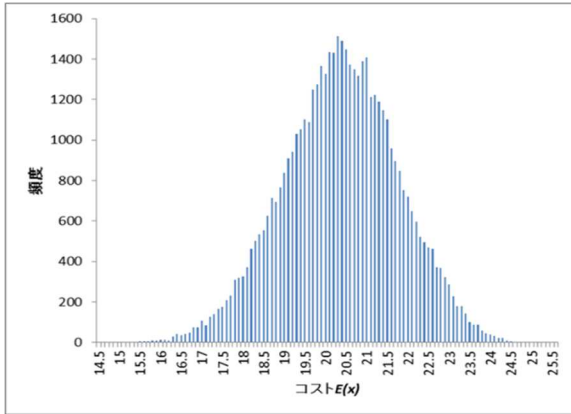


図2 メトロポリス法によるサンプリング

3.2 レプリカ交換法

メトロポリス法による探索は、高温の場合は改悪解を多く受理するため図3左のように低コストの解を探索しづらい。一方、低温の場合は図3右のように局所解に陥ってしまう可能性がある。レプリカ交換法は、解交換によって局所解からの脱出を図り、より良い解を探索する方法である。

レプリカ交換法における系は、 M 個の異なる温度 $T_i (i = 1, \dots, M)$ をもつ相互作用しない独立なレプリカからなる。図4にレプリカ数が3個の場合のレプリカごとのコスト分布を示す。レプリカ交換法では、レプリカ毎に温度一定のメトロポリス法による解探索を行い、探索中に一定間隔でレプリカ間での解交換を行う。

温度 T_i に対応したレプリカ i の解 x_i と温度 $T_j (> T_i)$ に対応したレプリカ j の解 x_j が交換される確率は

$$P(T_i, E(x_i), T_j, E(x_j)) = \begin{cases} 1 & \Delta \leq 0 \\ \exp(-\Delta) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

$$\Delta = \left(\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_j} \right) (E(x_j) - E(x_i)) \quad (4)$$

で与えられる。低温で探索が行われていた解 x_i が解交換により高温で探索されることで局所解から脱出することができる。また、高温で探索が行われていた解 x_j が低温で探索されることで、より低コストへ進むことができる。

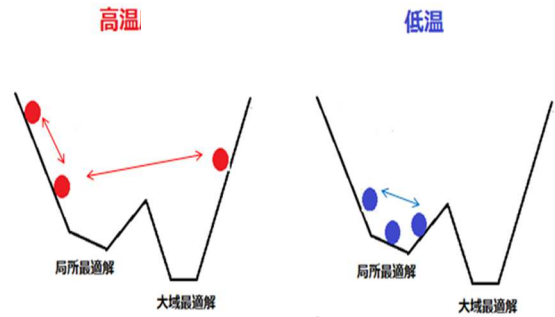


図3 高温と低温における解の移動

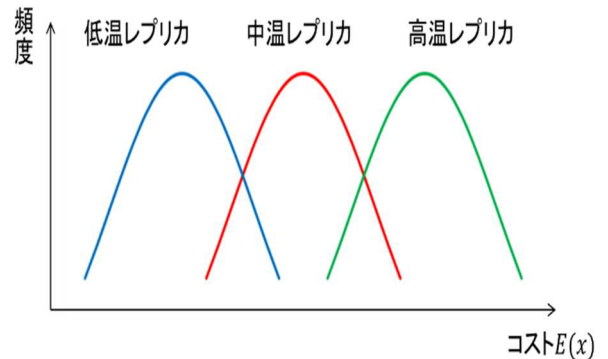


図4 レプリカ毎のコスト分布

4. 自動温度調節機能を持つレプリカ交換法

レプリカ交換法の問題点として、温度設定が困難であるということが挙げられる。適切な温度設定でないと解交換がうまく行われず良好な解を得ることができない。解交換にはレプリカのコスト分布の重なり具合が影響する。2つのコスト分布が離れすぎていると解交換が起きにくくレプリカ毎の独立な探索になってしまう。一方、2つのコスト分布が近すぎると解交換が起きすぎて似通った温度での探索になってしまう。

そこで、適切な温度に自動調節することによってこの問題の解決を図る。式(3)、(4)より、低温レプリカのコスト $E(x_i)$ が高温レプリカのコスト $E(x_j)$ より大きい場合に必ず解交換が行われることが分かる。つまり、コスト分布の重なり具合を推定することでおおよその解交換の起こりやすさを予想できる。本研究では、レプリカ交換法にコスト分布の重なり具合を利用した温度調節機能を導入することによって適切な重なり具合に調節する。

温度調節機能のアルゴリズムを以下に示す。

(1) コスト分布の推定

レプリカのコスト分布の推定を行う。本研究ではコスト分布は正規分布であると仮定する。レプリカ

毎の温度一定メトロポリスによる N 回のサンプリングにより、レプリカ i のコストの平均値 μ_i 、標準偏差 σ_i を求めることで、レプリカ i のコスト分布 $f_i(E(x_i))$ は、

$$f_i(E(x_i)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i^2}} \exp\left(-\frac{(E(x_i) - \mu_i)^2}{2\sigma_i^2}\right) \quad (5)$$

と表される。

(2) 重なり率の推定

推定したコスト分布の交点を求め、重なっている部分の面積(重なり率 P)を推定する。図5の左側のコスト分布をレプリカ i 、右側のコスト分布をレプリカ j とすると、レプリカ i とその隣のレプリカ $j (= i + 1)$ の交点 E_{ij} において、

$$f_i(E_{ij}) = f_j(E_{ij}) \quad (6)$$

であり、

$$E_{ij} = \frac{\mu_j\sigma_i^2 - \mu_i\sigma_j^2 \pm \sqrt{(\mu_i - \mu_j)^2 + 2(\sigma_i^2 - \sigma_j^2) \log \frac{\sigma_i}{\sigma_j}}}{\sigma_i^2 - \sigma_j^2} \quad (7)$$

と求まる。この際、2つの交点 $E_{ij}^{(1)}$ 、 $E_{ij}^{(2)}$ ($> E_{ij}^{(1)}$) が求まるが、どちらの値を用いて重なり率を推定するかは以下に示すように2つのレプリカの標準偏差の大小関係によって決定する。

$$E_{ij} = \begin{cases} E_{ij}^{(1)} & \sigma_i > \sigma_j \\ E_{ij}^{(2)} & \sigma_i < \sigma_j \end{cases} \quad (8)$$

重なり率は、交点 E_{ij} から左右に分け、図5の R_i と R_j を推定することで得られる。 R_i と R_j は次式で与えられる。

$$R_i = 0.5 - \int_{\mu_i}^{E_{ij}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i^2}} \exp\left(-\frac{(E(x_i) - \mu_i)^2}{2\sigma_i^2}\right) dE(x) \quad (9)$$

$$R_j = 0.5 - \int_{E_{ij}}^{\mu_j} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_j^2}} \exp\left(-\frac{(E(x_j) - \mu_j)^2}{2\sigma_j^2}\right) dE(x) \quad (10)$$

重なり率 P_{ij} は上記で推定した R_i と R_j の和

$$P_{ij} = R_i + R_j \quad (11)$$

で表される。

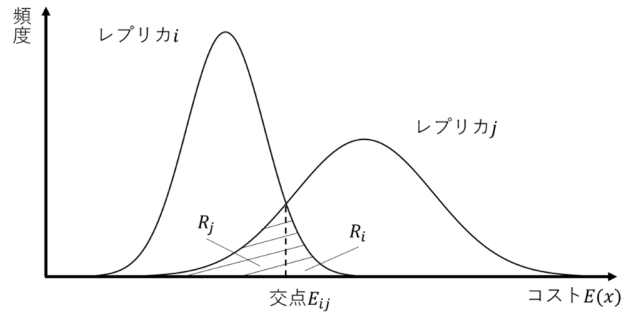


図5 重なり率

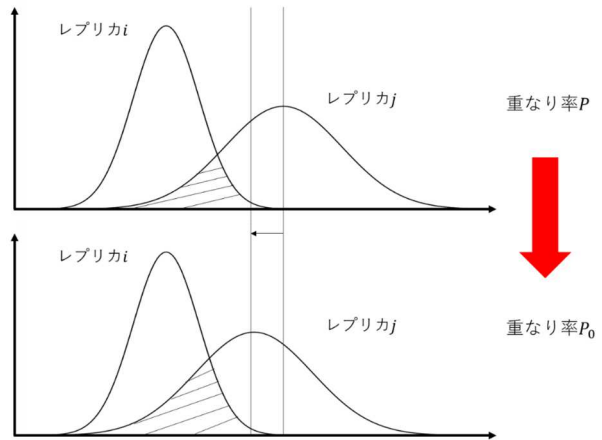


図6 重なり率の調節

(3) 温度調節

推定した重なり率 P を用いて温度調節を行う。図6のように、推定した重なり率 P が目的の重なり率 P_0 でない場合、高温レプリカ j の平均値を調節することによって P を調節する。

高温レプリカ j の平均値調節には黄金分割法を用いる。その後、高温レプリカ j の温度を調節する。本研究では、温度とコスト平均値は比例関係であると仮定する。すると、

$$(T_j - T_i) : (T_j^* - T_i) = (\mu_j - \mu_i) : (\mu_j^* - \mu_i) \quad (12)$$

という比例式が得られる。ここで、 T_j^* は調節後のレプリカ j の温度、 μ_j^* は調節後レプリカ j のコスト平均値を表している。よって、

$$T_j^* = T_i + \frac{(\mu_j^* - \mu_i)(T_j - T_i)}{\mu_j - \mu_i} \quad (13)$$

を用いて調節後のレプリカ j の温度 T_j^* を求める。

5. 実験 1

5.1 目的

目的の重なり率 P_0 の設定を変えた場合の解交換回数や温度変化についての実験を行う。 P_0 を設定することによって解交換回数を調節することができるのかを検証する。

5.2 実験内容

使用する問題は att48 で、問題名の数字は都市数を表している。各都市の座標値を 0 から 1 の範囲で表すために都市 i の座標値 (x_i, y_i) を

$$x_i \leftarrow \frac{x_i - x_{\min}}{\max(x_{\max} - x_{\min}, y_{\max} - y_{\min})} \quad (14)$$

$$y_i \leftarrow \frac{y_i - y_{\min}}{\max(x_{\max} - x_{\min}, y_{\max} - y_{\min})} \quad (15)$$

と変換する。ここで、 x_{\min} 、 x_{\max} は x 座標値の最小値、最大値、 y_{\min} 、 y_{\max} は y 座標値の最小値、最大値を表している。

レプリカ数 $M = 8$ 、初期温度は最低温度 $T_1 = 0.01$ 、最高温度 $T_8 = 100$ 、それ以外の温度は最低温度と最高温度の間を等分割するように設定する。各レプリカの探索回数は 50 万回とする。近傍解生成には 2-opt を用いる。2-opt 近傍とは、図 7 のように現在の巡回路 x に対し、任意の 2 本の枝をつなぎ直し、新たな巡回路 y を生成する方法である。探索 1250 回ごとに隣り合う 2 つのレプリカがランダムに選択され、式(5)、(6)に従い解交換を行う。温度調節は各レプリカの探索 10 万回ごとに行い、調節後の温度のコスト平均値と標準偏差推定のためのサンプリングは 10 万回とする。目的の重なり率 $P_0 = 0.3$ 、 0.4 、 0.5 としてそれぞれ 5 回ずつシミュレーションを行う。

5.3 実験結果と考察

$P_0 = 0.3, 0.4, 0.5$ としたときの解交換回数の 5 回の平均値 \pm SD を図 8 に、探索終了時のレプリカ毎の温度の 5 回の平均値 \pm SD を図 9 に示す。図 7 から、 P_0 が大きくなるにつれて解交換回数が増えていることが分かる。これは、 P_0 が大きいほどコスト分布が近くなるためであると考えられる。

高温に対応したレプリカほど解交換回数が多くなっている。これは、式(3)、(4)において温度 T が高くなるほど解交換確率が大きくなるからである。

図 8 から、 P_0 が大きくなるにつれて最高温度が低くなっており、レプリカの温度に近い値になっていることが分かる。 P_0 が大きいほどコスト分布は近くなるため、温度も近い値になる。逆に、 P_0 が小さいほどコスト分布は離れるため、温度も離れた値になる。

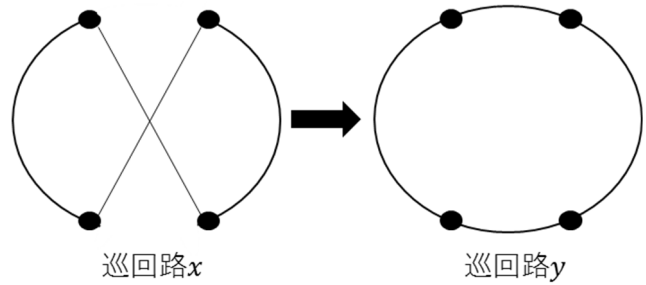


図 7 2-opt 近傍

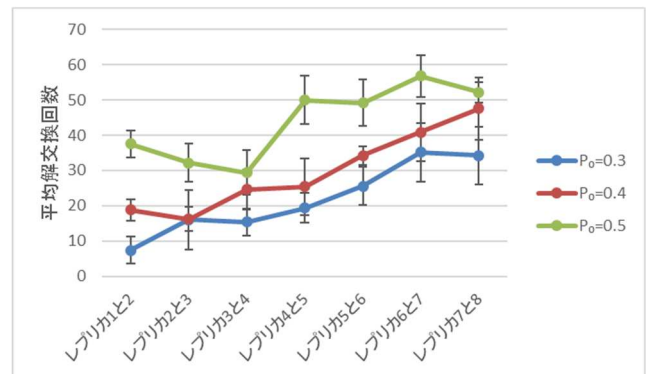


図 8 解交換回数の平均値 \pm SD

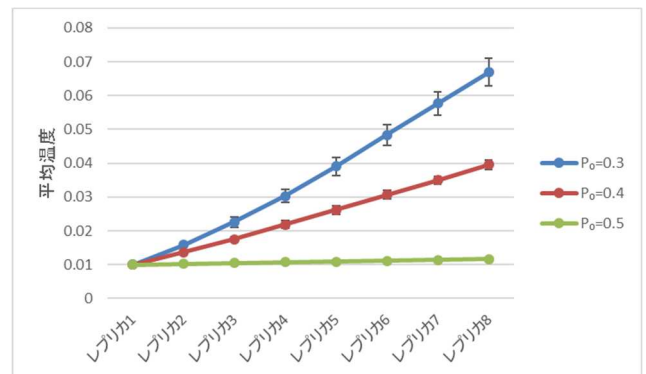


図 9 レプリカ毎の温度の平均値 \pm SD

これらの結果から、 P_0 を調節することで大まかな解交換回数の調節が可能であると考えられる。

6. 実験 2

6.1 目的

提案手法の性能を検証するために比較実験を行う。比較対象は温度調節を行わない一般的なレプリカ交換法と SA である。

6.2 実験内容

規模の異なる 4 種類の問題 att48、eil101、pcb442、pr2392 を温度調節ありレプリカ交換法、温度調節ありと同じ初期温度の温度調節なしレプリカ交換法、従来研究の温度設定を用いた温度調節なしレプリカ交換法[6]、SA で解き、探索中に得られた最小コストを比較する。

温度調整ありレプリカ交換法ではレプリカ数 $M = 32$ 、初期温度は最低温度 $T_1 = 0.01$ 、最高温度 $T_{32} = 100$ 、それ以外の温度は最低温度と最高温度を等比分割するように設定し、この設定を温度調節なしレプリカ交換法にも適用する。目的の重なり率 $P_0 = 0.4$ とする。また、従来研究で用いられている温度設定は以下の通りである。

- ・最高温度：最大の改悪となる状態遷移が 50% の確率で受理されるような温度
- ・最低温度：最小の改悪となる状態遷移が解交換周期内で 1 回は受理されるような温度
- ・残りの温度の振り分け：最高温度と最低温度の間を等比的に割り当てる

近傍生成には 2-opt 近傍を用いる。解交換は、隣り合う 2 つのレプリカがランダムに選択され、式(3)、(4)に従い解交換を行う。また、最低温度をサンプリングから求めるコスト標準偏差が 0 にならない程度の温度に設定しているため、探索中に得られた最小コストの解を最後に温度 $T = 0$ で落とし込む。それぞれの手法のその他のパラメータ設定を表 1~4 に示す。総計算量が各手法で同程度になるように設定した。問題ごとにそれぞれの手法で 10 回ずつシミュレーションを行った。

表 1 温度調整ありレプリカ交換法のパラメータ設定

	att48	eil101	pcb442	pr2392
レプリカ毎の探索回数	50 万	50 万	150 万	800 万
解交換間隔	1250	1250	1250	1250
温度調節間隔	10 万	10 万	30 万	80 万
落とし込み	5 万	5 万	20 万	100 万

表 2 温度調節ありと同じ初期温度の温度調節なしレプリカ交換法のパラメータ設定

	att48	eil101	pcb442	pr2392
レプリカ毎の探索回数	88 万	88 万	263 万	1475 万
解交換間隔	1250	1250	1250	1250
落とし込み	5 万	5 万	20 万	100 万

表 3 従来研究の温度設定を用いた温度調節なしレプリカ交換法のパラメータ設定

	att48	eil101	pcb442	Pr2392
レプリカ毎の探索回数	88 万	88 万	263 万	1475 万
解交換間隔	1250	1250	1250	1250
落とし込み	5 万	5 万	20 万	100 万

表 4 SA のパラメータ設定

	att48	eil101	pcb442	pr2392
温度ごとの探索回数	1 万	1 万	1 万	1 万
初期温度	100	100	100	100
終了温度	0.01	0.01	0.01	0.01
落とし込み	5 万	5 万	20 万	100 万

6.3 実験結果と考察

6.3.1 コストに関する結果

各問題において、それぞれの手法の 10 回のコスト平均値 \pm SD を図 10~13 に示す。また、温度調節を行うレプリカ交換法で得られた解の内、最も良かった解の誤差率と従来研究の温度設定を用いたレプリカ交換法を扱っている文献[7]の誤差率を表 5 に示す。誤差率(Error rate)(%)は

$$\text{Error rate} = \frac{E(x) - E(x_{opt})}{E(x_{opt})} \times 100 \quad (16)$$

という式で求められる。 $E(x_{opt})$ は最適解のコストを表している。

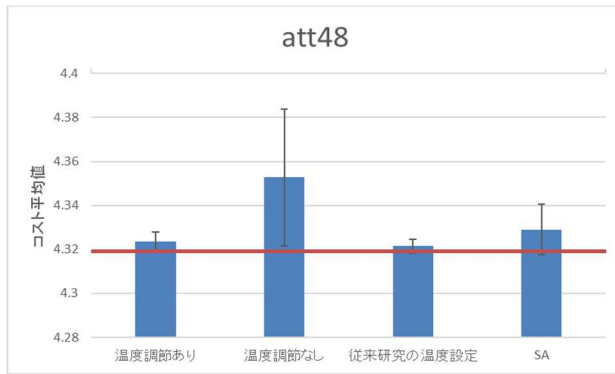


図 10 att48 の結果

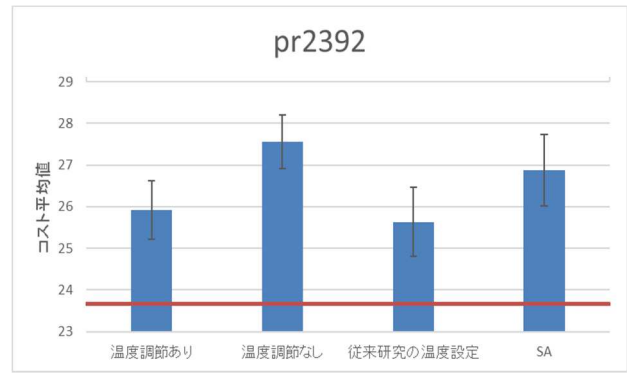


図 13 pr2392 の結果

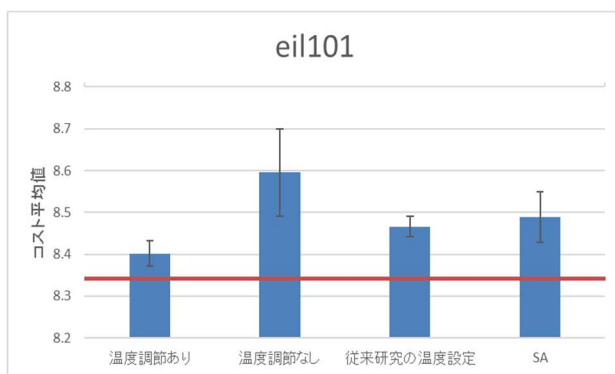


図 11 eil101 の結果

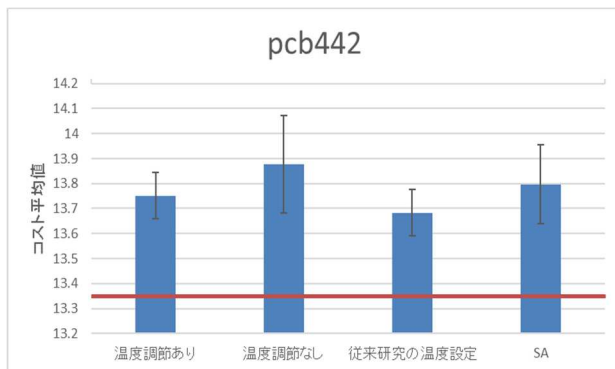


図 12 pcb442 の結果

表 5 誤差率の比較

	温度調節あり	文献
att48	0.00	0.00
eil101	0.00	0.00
pcb442	1.86	0.58
pr2392	4.38	2.43

実験の結果、問題の規模によらず温度調節なしより温度調整ありのコスト平均値の方が小さかった。標準偏差についても温度調節ありの方が小さく、安定していた。温度調整ありと従来研究の温度設定を比較すると、規模の大きい問題では従来研究の温度設定の方が良い結果が得られた。文献との誤差率の比較でも規模の大きな問題では従来研究の温度設定の結果を超えることはできなかった。温度調節ありレプリカ交換法では最低温度、目的の重なり率 P_0 がパラメータであり、適切な値に設定しなければ良好な解を得ることができない。問題の規模が大きくなるにつれて温度設定が重要になってくるが、実験で用いた最低温度 $T_1 = 0.01$ が適切な温度設定でなかったため規模の大きな問題では従来研究の温度設定の方が良い結果になったと考えられる。

従来研究の温度設定を試行錯誤して決定したが、その分の計算量は考慮されていない。そのため、その計算量を考慮したうえで総計算量を同程度にして実験を行う必要がある。

6.3.2 解交換回数に関する結果

各問題において、SA 以外の 3 つの手法の 10 回の解交換回数の平均値を図 14~17 に示す。

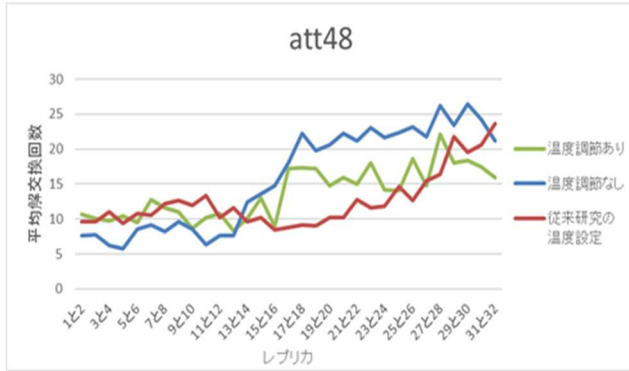


図 14 att48 の解交換回数

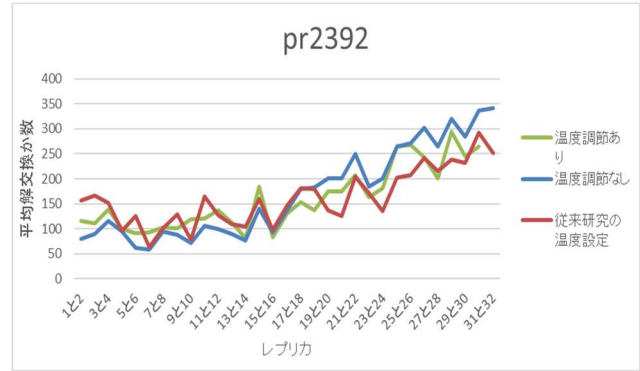


図 17 pr2392 の解交換回数

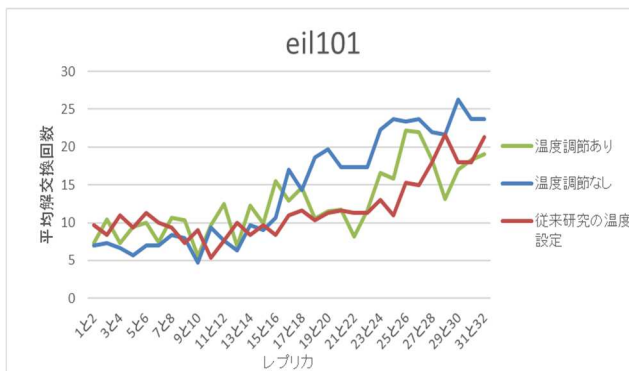


図 15 eil101 の解交換回数

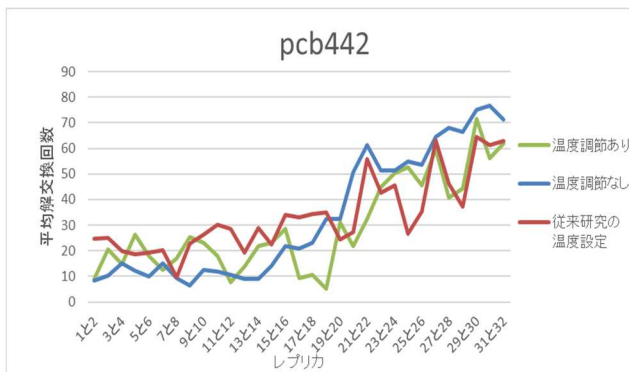


図 16 pcb442 の解交換回数

全ての問題において、どの手法も高温に対応したレプリカほど解交換回数が多くなっている。これは式(3)、(4)において温度 T が高くなるほど解交換確率が大きくなるからである。

解交換回数の増え方に注目すると、温度調節なしレプリカ交換法において、低温レプリカの解交換回数と高温レプリカの解交換回数の差が大きく、それに比べるとほかの2つの手法は差が小さい。温度調節ありレプリカ交換法では探索が進むにつれて固定の値である最低温度以外の全ての温度が小さくなっていったため、高温に対応したレプリカであっても解交換が起きづらくなり、低温レプリカと高温レプリカの解交換回数の差が小さくなったと考えられる。従来研究の温度設定を用いたレプリカ交換法も同様に、設定された最低温度と最高温度の値が近いため、高温レプリカであっても解交換が起きづらかったと考えられる。

温度調節を行うことによって、低温レプリカでの解交換が起きにくく高温レプリカでの解交換が頻繁に起きるということを防ぐことができ、全てのレプリカでまんべんなく解交換を起こすことができた。

7. まとめと今後の課題

実験1では目的の重なり率 P_0 を変えることによって解交換回数をおおまかに調節できることが分かった。実験2では規模の異なる問題を温度調節ありレプリカ交換法、温度調節ありと同じ温度設定の温度調節なしレプリカ交換法、従来研究の温度設定を用いた温度調節なしレプリカ交換法、SAの4つの手法で解いた結果、規模の小さい2つの問題では温度調節ありレプリカ交換法が最も良い結果であったが、規模の大きい2つの問題では従来研究の温度設定を用いたレプリカ交換法が最も良い結果であった。

提案手法においてパラメータは最低温度と目的の重なり率 P_0 である。遺伝的アルゴリズムを利用した自動温度調節機能を持つレプリカ交換法や探索に有効な温度範囲を自律的に探索するレプリカ交換法と

いった先行研究に比べてパラメータの数を減らすことができた。

本研究によって提案手法が TSP に対して有効であるということが分かった。その他の組合せ最適化問題に対しても有効性を確認し、提案手法の汎用性を確認する必要がある。

参考文献

- [1] 高原茂幸, "積荷安定性と重量制約を考慮したコンテナ積み付け問題", 日本知能情報ファジィ学会誌, Vol.18, No.6(2006)
- [2] Robert H. Swendsen, Jian-Sheng Wang, "Replica Monte Carlo Simulation of Spin-Glasses", PHYSICAL REVIEW LETTERS, Vol.57, No.21(1986)
- [3] 輪湖純也, 安藤景子, 三木光範, 廣安知之, "遺伝的アルゴリズムを用いた適応的温度スケジュールを持つ並列 SA", 情報処理学会論文誌, Vol.47, No.SIG1(2006)
- [4] 松井勇樹, 三木光範, 廣安知之, "適応的温度調節機能を持つ温度並列シミュレーテッドアニーリングプログラム", 情報処理学会研究報告, Vol.2009-MPS-76, No.25(2009)
- [5] <http://comopt.ifi.uni-eidelberg.de/software/TSPL>
IB95/
- [6] 豊永昌彦, 秋濃俊郎, "高速アニーリング・シミュレーション法: FAST", 情報処理学会 SA 研究報告, Vol.70(1986)
- [7] 小西健三, 屋鋪正史, 瀧和男, "温度並列シミュレーテッドアニーリング法の巡回セールスマン問題への適用と実験的解析", 電子情報通信学会論文誌, Vol.J80-D-I, No.2(1997)