

# SMBO によるレプリカ交換法のオンライン最適化

土屋 遼太郎<sup>†</sup> 平原 誠<sup>†</sup>

<sup>†</sup> 法政大学大学院理工学研究科

## 1. はじめに

組み合わせ最適化問題において短時間で良質な解を得る枠組みはメタヒューリスティクスと呼ばれ、その1つにレプリカ交換法がある。レプリカ交換法は温度の異なる複数の系で同時並列的に探索し、定期的に隣り合うレプリカ間で解を交換しながら最適化する手法である。レプリカ交換法には主に最高温度や最低温度、レプリカ間の温度の比といったパラメータが存在する。従来[1]はその値の決定のため事前実験など、ユーザが試行錯誤する必要があった。よって、利用の障壁になっている。

本研究では、レプリカ交換法のパラメータを Sequential Model-Based Global Optimization (SMBO) により逐次的に自動で最適化する手法を提案する。

## 2. レプリカ交換法

メタヒューリスティクスの例としてシミュレーテッド・アニーリング法(SA)がある。SA は解が悪い方向にも遷移しやすい高温状態から、悪い方向に遷移しづらい低温へと徐々に冷却することで良質な解を得る手法である。しかし、これでは冷却後局所解からの脱出がしづらくなる。レプリカ交換法では温度の異なる複数のレプリカで同意並列的に探索することで、常に高温から低温まで探索を行うため、局所解に陥りづらくしている。

## 3. Sequential Model-Based Global Optimization

機械学習においてパラメータ(ハイパーパラメータ)の値の調整が課題となっており、自動調整の手法として SMBO[2]がある。これはあるパラメータの値を用いた際に得られる最終的なコストを Gaussian Process Regression (GPR)[3]などのベイズ最適化手法で回帰し、その回帰結果から次に試行すべき、パラメータの値を決定する手法である。なお、パラメータの上下限が必要である。

## 4. SMBO によるレプリカ交換法のオンライン最適化

本手法では最高温度とレプリカ間の温度比を SMBO により逐次的に最適化する。最高温度の上下限は指数による改悪の近似[4]を用いることで推定を行う。レプリカ間の温度比は高温側から見た比とすることで、0 より大きく 1 未満の値とした。レプリカ交換法への SMBO の導入を考える。本手法では解とパラメータの値を同時に探索することで、パラメータ調整の簡略化を図る。そのため、GPR への入力を更新前後のパラメータの値、教師を変更後のパラメータで得られたコストとし、解交換周期ごとに SMBO によるパラメータの値の変更を行う。

表1. TSP による提案手法の評価。数値は大域最適解からの距離[%]である。記号は従来研究[1]と比べ有意差が得られたことを示す。○は提案手法の方が従来研究より良いことを示し、●は提案手法の方が従来研究より悪いことを示す。

問題	従来[1]	提案	問題	従来[1]	提案
nrw1379	2.05	●3.03	rl1323	3.76	○2.36
pcb1173	2.87	3.05	rl1889	3.73	○3.17
pr2392	3.09	3.36	u1060	1.26	●2.72
rat783	2.26	●2.92	vm1084	3.16	3.13
rl1304	5.37	○2.41			

## 5. 実験

巡回セールスマン問題(TSP)により提案手法の評価を行った。使用する問題は TSP のベンチマーク問題である TSPLIB の問題[5]であり、大域最適解が得られている問題とした。終了条件や探索回数といった実験条件は従来研究[1]と合わせた。

実験結果を表 1 に示す。半数以上の問題について、従来研究の結果に対して有意に良い、あるいは同等という結果が得られた。

## 5. むすび

提案手法は従来必要であったユーザによるパラメータの値の調整作業を省き、従来程度の精度を得ることができた。加えて、本結果は SMBO をオンライン最適化に用いることができる可能性を示した。

## 参考文献

- [1] 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, pp. 127-136, 1997.
- [2] DONALD R. Jones, MATTHIAS Schonlau, WILLIAM J. Welch: "Efficient Global Optimization of Expensive Black-Box Function, Journal of Global Optimization," Vol. 13, pp. 455-492, 1998.
- [3] CARL Rasmussen, CHRISTOPHER KI Williams: "Gaussian processes for machine learning," The MIT press, 2006.
- [4] 土屋遼太郎, 平原誠: "SMBO によるレプリカ交換法のオンライン最適化," 第 36 回ファジイシステムシンポジウム講演論文集, pp.385-388, 2020.
- [5] TSPLIB: <http://elib.zib.de/pub/mpstestdata/tsp/tsplib/tsplib.html> [accessed Nov. 10, 2020].