

レプリカ数と温度の自動設定機能を持つレプリカ交換法

岡本, 啓吾 / OKAMOTO, Keigo

(出版者 / Publisher)

法政大学大学院理工学研究科

(雑誌名 / Journal or Publication Title)

法政大学大学院紀要. 理工学・工学研究科編

(巻 / Volume)

60

(開始ページ / Start Page)

1

(終了ページ / End Page)

6

(発行年 / Year)

2019-03-31

(URL)

<https://doi.org/10.15002/00022041>

レプリカ数と温度の自動設定機能を持つレプリカ交換法

REPLICA EXCHANGE METHOD WITH AUTOMATIC SETTING OF THE NUMBER OF REPLICAS AND THEIR TEMPERATURES

岡本啓吾

Keigo OKAMOTO

指導教員 平原誠

法政大学大学院理工学研究科応用情報工学専攻修士課程

The replica exchange method for combinatorial optimization problems involves setting the number of replicas and their corresponding temperatures as parameters. However, if the parameter values are not appropriate, exchange of replicas cannot be performed efficiently, and an optimal solution cannot be obtained. It is thus necessary to manually set them by trial and error. In this study, a replica exchange method is proposed that can automatically set the number of replicas and their corresponding temperatures by taking into account the overlap region of replicas' cost distribution. The proposed method was applied to the traveling salesman problems and vehicle routing problems.

Key Words : replica exchange method, SA, automatic setting, cost distribuion

1. はじめに

組合せ最適化問題の解法の一つにレプリカ交換法[1]がある。レプリカ交換法では、レプリカ数やレプリカごとの温度を予め設定し、各レプリカでの解探索、およ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数やレプリカごとの温度を人手により試行錯誤して決定する必要がある。

本研究では、レプリカ数と温度の自動設定を行うアルゴリズムをレプリカ交換法に導入することを目的とする。また、本アルゴリズムを巡回セールスマン問題および配送計画問題に適用することで性能評価を行う。

2. 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題(TSP)とは、都市の集合と各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。本研究では TSP のベンチマーク集である TSPLIB[2]の問題を使用する。

3. 配送計画問題

配送計画問題とは、拠点から出発した複数の車両がすべての都市をちょうど一度ずつ訪問し拠点に戻るときのコ

スト最小の経路を求める組合せ最適化問題である。都市は TSP と同じものを使用し、拠点の座標は各問題の都市の座標の重心とした。

4. 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。解 y の受理確率 $P(y)$ は

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

で与えられる。ここで、 T は温度を表している。温度が高いほど受理確率は高くなる。

温度一定の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 1 のようにベル型である。

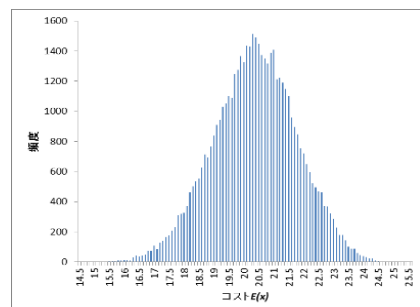


図1 メトロポリス法によるコスト分布

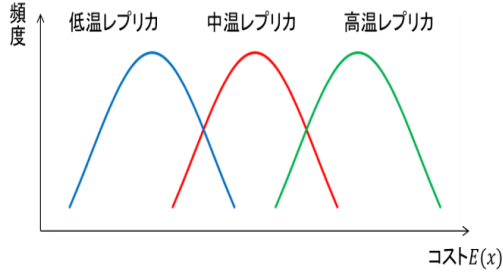


図2 レプリカごとのコスト分布

5. レプリカ交換法

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 M 個の独立なレプリカからなる。レプリカごと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。図2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。

温度 T_i に対応したレプリカ i の解 x_i と温度 $T_{i+1} (> T_i)$ に対応したレプリカ $i+1$ の解 x_{i+1} が交換される確率は以下の式で表される。

$$P(T_i, E(x_i), T_{i+1}, E(x_{i+1})) = \begin{cases} 1 & \Delta \leq 0 \text{ のとき} \\ \exp(-\Delta) & \Delta > 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (2)$$

$$\Delta = \left(\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_{i+1}} \right) (E(x_{i+1}) - E(x_i)) \quad (3)$$

6. レプリカ数と温度の自動設定アルゴリズム

レプリカ交換法の問題点として、レプリカ数 M や温度 T というパラメータの設定が困難であるということが挙げられる[3]。それらの設定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。解交換にはレプリカ間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ては解交換が起きにくくレプリカごとの独立な探索になってしまい、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、適切なパラメータ値を自動設定することによってこの問題の解決を図る。式(2)と(3)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 $E(x_{i+1})$ より大きい場合には必ず解交換が行われることが分かる。つまり、レプリカごとのコスト分布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することができるため[4]、目的の重なり具合になるようにレプリカを設定していく。

本研究では、コスト分布が正規分布であると仮定する。すると、温度一定メトロポリス法によるサンプリングによりコストの平均値と標準偏差を求めることができ、コスト分布を推定することができる。

数値実験を行ったところ温度 T とコスト平均値 μ の関係 $\mu(T)$ および温度 T とコスト標準偏差 σ の関係 $\sigma(T)$ は、どちらも問題の規模によらずシングモイド関数で表せるという

ことが示唆された。

$$\mu(T) = \frac{b_\mu}{1 + \exp(-a_\mu \ln T + d_\mu)} + c_\mu \quad (4)$$

$$\sigma(T) = \frac{b_\sigma}{1 + \exp(-a_\sigma \ln T + d_\sigma)} + c_\sigma \quad (5)$$

ここで、 $a_\mu, b_\mu, c_\mu, d_\mu, a_\sigma, b_\sigma, c_\sigma, d_\sigma$ はパラメータであり最急降下法によって求められる。これによって事前のサンプリングのみで温度 T のコスト分布を推定することができる。

次にレプリカ数と温度の設定を行う。従来研究[5]で用いられている方法で求めた最高温度(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)と最低温度(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)をそれぞれ上限 T_U と下限 T_L とする。図3のように2つのレプリカのコスト分布の重なり率 P (赤色部分の面積) が目的の重なり率 P_0 となるように $\mu(T)$ と $\sigma(T)$ を用いて高温レプリカのコスト分布を設定する。そして、式(4)の逆関数

$$T(\mu) = \exp \left(\frac{d_\mu - \ln \frac{b_\mu + c_\mu - \mu}{\mu - c_\mu}}{a_\mu} \right) \quad (6)$$

を用いて高温レプリカの温度を設定する。これを、第1レプリカの温度 T_1 を下限 T_L として P_0 になるようにレプリカを追加していき、上限 T_U を超えるまで繰り返すことでレプリカ数と各レプリカの温度を自動で設定する。

次に、各レプリカに探索回数を割り振る。探索回数の割り振りには以下の式を用いる。

$$l_i = \frac{L}{\sum_{j=1}^M \frac{T_1}{T_j}} \times \frac{T_1}{T_i} \quad (i = 1, \dots, M) \quad (7)$$

ここで、 l_i はレプリカ i の探索回数、 L は総探索回数を表している。これによって低温レプリカほどより多くの探索回数が割り振られる。

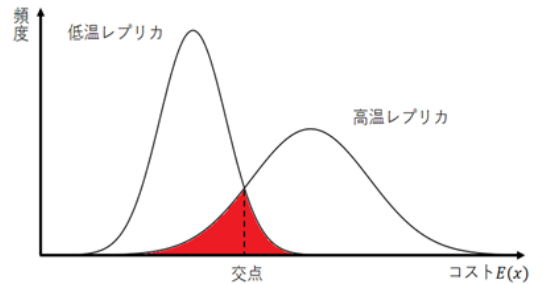
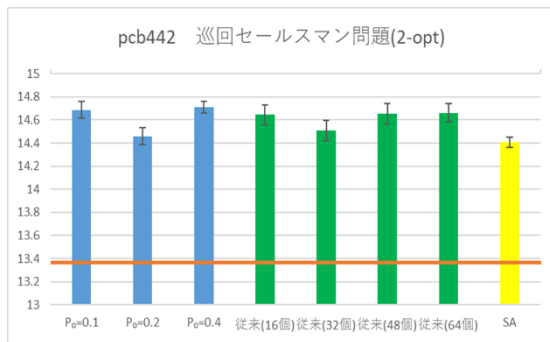


図3 高温レプリカのコスト分布設定

7. 実験 1

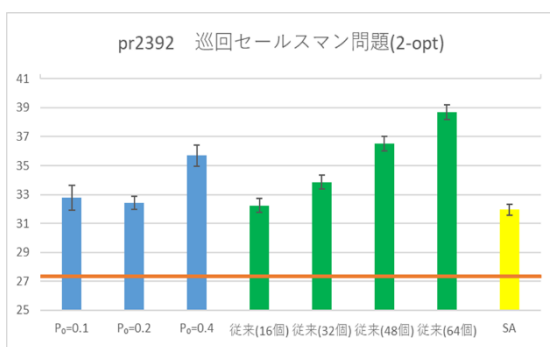
TSPLIB の att48,eil101,pcb442,pr2392 (数字は都市数) という規模の異なる問題を目的の重なり率 $P_0 = 0.1, 0.2, 0.4$ と設定した提案手法, レプリカ数 $M = 16, 32, 48, 64$ と設定した従来研究 [5] の温度設定を用いたレプリカ交換法, SA [6] で解き, 出力コストの平均値を比較した. 近傍解の生成方法には 2-opt 近傍と交換・挿入近傍を用いた.

近傍生成に 2-opt 近傍を用いた場合の pcb442 と pr2392 に対する実験結果をそれぞれ図 4 と 5 に示す. 図の上側のグラフは各手法の出力コストの平均値 ($\pm 1SD$) であり, 赤色の横線は最適解のコストを表している. 図の下側の表はボンフェローニ法による多重比較の結果であり, 有意水準 5% で有意差があった場所に丸印を付けた.



	$P_0=0.1$	$P_0=0.2$	$P_0=0.4$	従来(16個)	従来(32個)	従来(48個)	従来(64個)	SA
$P_0=0.1$		○			○			○
$P_0=0.2$			○	○		○	○	
$P_0=0.4$					○			○
従来(16個)								○
従来(32個)							○	
従来(48個)								○
従来(64個)								○
SA								

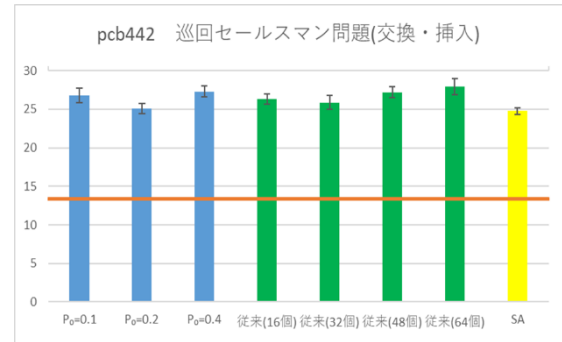
図 4. 実験 1 巡回セールスマン問題 pcb442 (2-opt 近傍) に対する実験結果



	$P_0=0.1$	$P_0=0.2$	$P_0=0.4$	従来(16個)	従来(32個)	従来(48個)	従来(64個)	SA
$P_0=0.1$		○				○	○	
$P_0=0.2$			○			○	○	
$P_0=0.4$				○			○	○
従来(16個)						○	○	○
従来(32個)							○	○
従来(48個)								○
従来(64個)								○
SA								

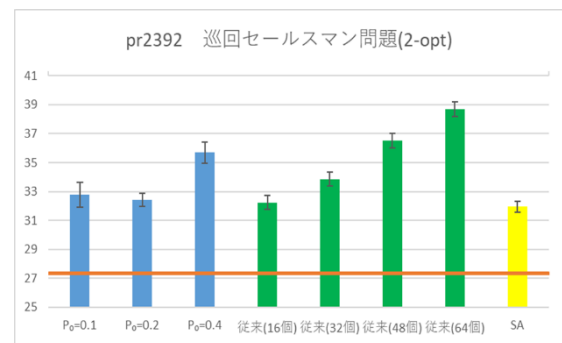
図 5. 実験 1 巡回セールスマン問題 pr2392 (2-opt 近傍) に対する実験結果

近傍生成に交換・挿入近傍を用いた場合の pcb442 と pr2392 に対する実験結果をそれぞれ図 6 と 7 に示す.



	$P_0=0.1$	$P_0=0.2$	$P_0=0.4$	従来(16個)	従来(32個)	従来(48個)	従来(64個)	SA
$P_0=0.1$		○						○
$P_0=0.2$			○			○	○	
$P_0=0.4$								○
従来(16個)								○
従来(32個)							○	
従来(48個)								○
従来(64個)								○
SA								

図 6. 実験 1 巡回セールスマン問題 pcb442 (交換・挿入近傍) に対する実験結果



	$P_0=0.1$	$P_0=0.2$	$P_0=0.4$	従来(16個)	従来(32個)	従来(48個)	従来(64個)	SA
$P_0=0.1$		○				○	○	
$P_0=0.2$			○		○	○	○	
$P_0=0.4$				○			○	○
従来(16個)						○	○	○
従来(32個)							○	○
従来(48個)								○
従来(64個)								○
SA								

図 7. 実験 1 巡回セールスマン問題 pr2392 (交換・挿入近傍) に対する実験結果

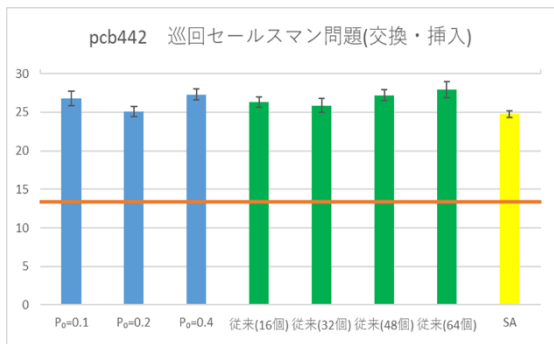
2-opt 近傍を用いた場合と交換・挿入近傍を用いた場合の両方において, 提案手法は使用した 4 種類の問題全てで目的の重なり率 $P_0 = 0.2$ の結果が最も良い傾向であった. 一方, 従来手法は att48 (未掲載) と pcb442 ではレプリカ数 32 個, eil101 (未掲載) ではレプリカ数 64 個が最も良い傾向であり, pr2392 ではレプリカ数 16 個の結果が最も良かった. このことから, 従来手法は問題によってレプリカ数というパラメータを調節する必要があるが, 提案手法は全ての問題で $P_0 = 0.2$ とすればよく, パラメータの調節をする必要がないということが言える. 提案手法の $P_0 =$

0.2と SA の結果を比較すると、全ての問題で有意差はなく同程度の性能であると言える。

8. 実験 2

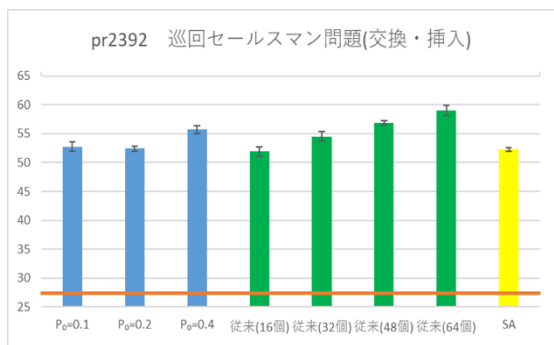
TSPLIB の att48,eil101,pcb442,pr2392 を基にして作成した配送計画問題を目的の重なり率 $P_0 = 0.1, 0.2, 0.4$ と設定した提案手法, レプリカ数 $M = 16, 32, 48, 64$ と設定した従来研究[5]の温度設定を用いたレプリカ交換法, SA[6]で解き, 出力コストの平均値を比較した. 近傍解の生成方法には 2-opt 近傍と交換・挿入近傍を用いた.

近傍生成に 2-opt 近傍を用いた場合の pcb442 と pr2392 に対する実験結果をそれぞれ図 8 と 9 に示す.



	$P_0=0.1$	$P_0=0.2$	$P_0=0.4$	従来(16個)	従来(32個)	従来(48個)	従来(64個)	SA
$P_0=0.1$								
$P_0=0.2$				○	○	○	○	
$P_0=0.4$					○			
従来(16個)								○
従来(32個)								
従来(48個)								
従来(64個)								
SA								

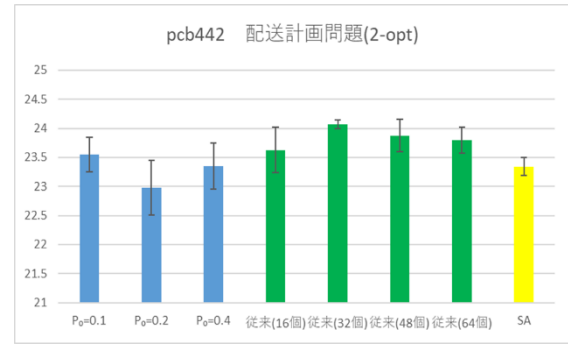
図 8. 実験 2 配送計画問題 pcb442(2-opt 近傍)に対する実験結果



	$P_0=0.1$	$P_0=0.2$	$P_0=0.4$	従来(16個)	従来(32個)	従来(48個)	従来(64個)	SA
$P_0=0.1$						○	○	
$P_0=0.2$				○	○	○	○	
$P_0=0.4$					○			
従来(16個)						○	○	○
従来(32個)							○	○
従来(48個)								○
従来(64個)								○
SA								

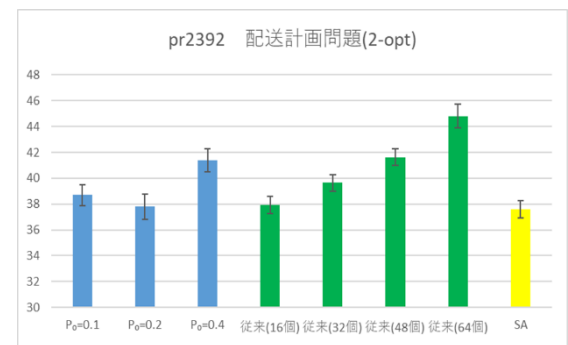
図 9. 実験 2 配送計画問題 pr2392(2-opt 近傍)に対する実験結果

近傍生成に交換・挿入近傍を用いた場合の pcb442 と pr2392 に対する実験結果をそれぞれ図 10 と 11 に示す.



	$P_0=0.1$	$P_0=0.2$	$P_0=0.4$	従来(16個)	従来(32個)	従来(48個)	従来(64個)	SA
$P_0=0.1$		○	○		○	○	○	○
$P_0=0.2$			○		○	○	○	○
$P_0=0.4$				○		○	○	○
従来(16個)						○	○	○
従来(32個)							○	○
従来(48個)								○
従来(64個)								○
SA								

図 10. 実験 2 配送計画問題 pcb442(交換・挿入近傍)に対する実験結果



	$P_0=0.1$	$P_0=0.2$	$P_0=0.4$	従来(16個)	従来(32個)	従来(48個)	従来(64個)	SA
$P_0=0.1$			○		○	○	○	○
$P_0=0.2$			○		○	○	○	○
$P_0=0.4$				○		○	○	○
従来(16個)						○	○	○
従来(32個)							○	○
従来(48個)								○
従来(64個)								○
SA								

図 11. 実験 2 配送計画問題 pr2392(交換・挿入近傍)に対する実験結果

2-opt 近傍を用いた場合において, 提案手法は使用した 4 種類の問題全てで目的の重なり率 $P_0 = 0.2$ の結果が最も良い傾向であった. 従来手法は全ての問題でレプリカ数 16 個の結果が最も良い傾向であった. 提案手法の $P_0 = 0.2$ と SA の結果を比較すると, 全ての問題で有意差はなく同程度の性能であると言える.

交換・挿入近傍を用いた場合において, 提案手法は att48(未掲載)では目的の重なり率 $P_0 = 0.2$, その他の問題では $P_0 = 0.1$ が最も良い傾向であった. 従来手法は eil101(未掲載)ではレプリカ数 48 個, その他の問題では

レプリカ数 16 個が最も良い傾向であった。pcb442 では全ての手法の中で SA が最も良く、pr2392 では試行回数を増やせば有意差ありで SA が最も良くなると思われる。

9. 実験 3

組合せ最適化問題で良い解を求めるためには膨大な量の計算が必要である。しかし、解の良さを多少犠牲にしても探索回数を少なくする必要がある場合がある。そこで、配送計画問題に対して各手法の探索回数を実験 2 の半分にして解き、出力コストの平均値を比較した。近傍生成には交換・挿入近傍を用いた。pcb442 と pr2392 に対する実験結果を図 12 と 13 に示す。

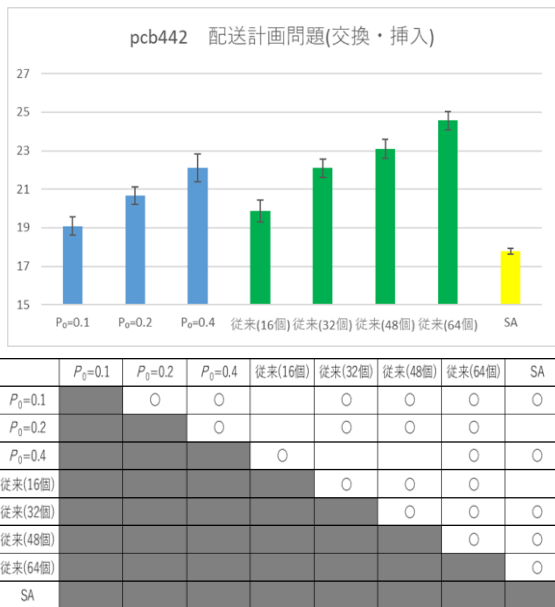


図 12. 実験 3 配送計画問題 pcb442(交換・挿入近傍, 探索回数半分)に対する実験結果



図 13. 実験 3 配送計画問題 pr2392(交換・挿入近傍, 探索回数半分)に対する実験結果

実験 2 では pcb442 で SA が全ての手法の中で最も良い結果だったが、実験 3 では提案手法の $P_0 = 0.1$ の方が良いという結果になった。pr2392 でも SA より提案手法の $P_0 = 0.1$ の方が良い傾向であり、試行回数を増やせば有意差が出るとと思われる。これらのことから、探索回数を少なくすると、レプリカ交換法より SA の方が結果が悪くなると考えられる。

10. 結論と今後の課題

実験 1 と 2 の結果から、従来手法は問題によってレプリカ数を調節する必要があるが、提案手法は全ての問題で $P_0 = 0.2$ とすればよい。つまり、出力コストは同程度でも提案手法はパラメータ調節の必要がないという点で従来手法より優れていると言える。実験 3 の結果から、少ない探索回数では SA より提案手法の方が優れているといえる。

今後の課題について述べる。1つ目はコスト分布についてである。本研究ではコスト分布を正規分布と仮定したが、低温では局所解に陥りやすくサンプリング結果が正規分布にならない場合がある。そのため、低温のコスト分布に他の分布を仮定して実験を行う必要がある。2つ目は $\mu(T)$ と $\sigma(T)$ の更新についてである。レプリカごとの探索で得られた解を利用して $\mu(T)$ と $\sigma(T)$ を更新することでより正確に近似することができると考えられる。3つ目は実験で使用する最適化問題についてである。実験で使った巡回セールスマン問題と配送計画問題は問題の構造が似ているため、実装機や箱詰め問題などの全く構造の異なる問題で実験を行う必要がある。

謝辞

本研究を進めるにあたり、ご指導いただいた修士論文指導教員の平原誠准教授に心より感謝いたします。

参考文献

- 1) Robert H. Swendsen, Jian-Sheng Wang : Replica Monte Carlo Simulation of Spin-Glasses, Phys. Rev. Lett., Vol.57, No.21, pp.2607-2609, 1986.
- 2) <http://comopt.ifi.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/>
- 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, pp.1-11, 2006.
- 4) 岡本啓吾, 平原誠: 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, FIT2017(第16回情報科学技術フォーラム), pp.125-132, 2017.
- 5) 小西健三, 瀧和男, 木村宏一: 温度並列シミュレーション・アニーリング法とその評価, 情報処理学会論文誌, Vol.36, No.4, pp.797-807, 1995.
- 6) S.Kirkpatrick, C.D.Gelatt, Jr, M.P.Vecchi : Optimization by Simulated Annealing, Science, Vol.220, No.4598, pp.671-680, 1983.

学会発表

- [a]岡本啓吾, 平原誠: 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, FIT2017(第16回情報科学技術フォーラム), 2017.
- [b]岡本啓吾, 平原誠: 自動温度設定機能を持つレプリカ交換法, 2018年電子情報通信学会総合大会, 2018.
- [c]岡本啓吾, 平原誠: レプリカ数と温度の自動設定機能を持つレプリカ交換法, 2018年電子情報通信学会ソサイエティ大会, 2018.