

並列シミュレーテッドアニーリングにおける温度自律探索
吉田 武史

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (SA) では膨大な計算量が必要な点, 温度パラメータの設定が困難な点が課題である. そのため, 計算時間短縮を目的とした並列 SA の研究は数多く報告されており, 解探索過程で解交換などを行うことで解探索能力の向上も実現されている.

しかし, 依然として温度パラメータの設定は非常に困難で, 重要温度²⁾に着目した温度スケジュールが並列 SA に望まれる. そこで私の研究では解探索過程で重要温度を探索し, 自律的に温度スケジュールを決定する手法を提案する.

2 適応的温度並列 SA

温度並列シミュレーテッドアニーリング (TPSA)¹⁾ は並列処理と親和性が高く, 温度スケジュールの自動化が可能な並列アルゴリズムである. しかし, 解探索初期に探索温度範囲を設定する必要があり, その範囲によって解精度が大きく変化する. また重要温度以外のプロセスで効率的な解探索が行えていないことも示されている.

そこで TPSA に自律的に最適な温度範囲を探索するメカニズムを組み込んだ適応的 TPSA (Adaptive TPSA: ATPSA) を提案する. ATPSA のアルゴリズムを Fig. 1 に示す.

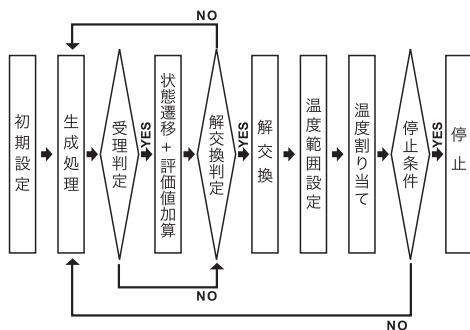


Fig. 1 ATPSA のアルゴリズム

ここでは TPSA に加えた操作として, 評価値計算とその値を基にした温度範囲設定について述べる.

評価値計算

ATPSA では全プロセスに同一の基準値を設定する. 各プロセスでは, 解が基準値以下になった場合, その差を評価値とする. その結果, 解交換周期ごとに各プロセスが異なる評価値をもつ. なお, 基準値は, 解交換周期ご

との全プロセスの解平均を用いる.

温度範囲設定

解交換周期ごとに全プロセスが同期をとり, 評価値の比較を行う. ATPSA の最高温度と最低温度の間に重要温度領域が含まれる場合, 重要温度領域の評価値が高く, 他の温度の評価値は低くなる. そこで評価値が 0 以上の温度範囲のみを次の解交換周期の解探索温度範囲と設定する. この温度範囲内で各プロセスの温度を再定義する.

TSP を対象問題として ATPSA, TPSA, 逐次 SA を比較実験した結果を Fig. 2 に示す. Fig. 2 では, 左図に各手法で得られた解の精度として最適解からの誤差を示し, 右図に kroA100 という TSP に ATPSA を適用した際の各プロセスの温度推移を示す. Fig. 2 の左図に

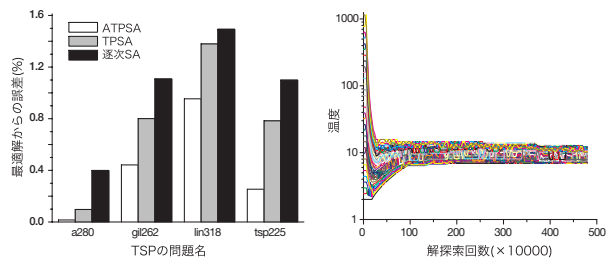


Fig. 2 ATPSA の実験結果

示すように, ATPSA は他の手法と比較して良好な解探索能力を示す. また, 右図に示すように各プロセスの温度が重要温度周辺に収束しており, どの TSP においてもこの結果を確認できた. つまり ATPSA は, 自律的に重要温度に収束するメカニズムで温度スケジュールを決定するため, 良好な解探索能力を示すと考えられる.

3 今後の研究に関して

今後はこの ATPSA に加えて, 温度を GA 操作を用いて決定する並列遺伝的 SA (PGSA) を検証し, それらをタンパク質の構造解析に利用する予定である.

参考文献

- 1) 小西健三, 瀧和男. 温度並列シミュレーテッド・アニーリング法の評価. 情報処理学会論文誌, 1995
- 2) Mark Fielding. Simulated Annealing with an Optimal Fixed Temperature. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000