

重要温度領域と並列 SA の温度スケジュール
吉田 武史

1 研究活動報告

今月は修士論文の執筆と, PSA/AT(GA) をタンパク質に適用する実験を行った. 修士論文は「遺伝的アルゴリズムを用いた適応的温度調節を行う並列シミュレーテッドアニーリング」をタイトルとして, TSP を対象問題に PSA/AT(GA) を適用するという内容である. 本報告では, この論文執筆に際して調査した文献から 2 点を紹介する.

2 重要温度領域の決定方法について

我々の研究における重要温度領域の決定方法は, 一定温度 SA を様々な温度で実行し, それぞれで得られた解から主観的に重要温度領域を決定していた. しかし, 重要温度領域を報告している Connolly¹⁾ と Mark²⁾ らは, 様々な温度で一定温度 SA を何度も試し, 各温度での解の品質 (式 (1)), 最適解発見率 (式 (2)), 実行時間 (式 (3)) から重要温度領域を決定している.

$$\mathbb{E}[\min\{f(X_1), \dots, f(X_N)\}] \quad (1)$$

$$P(\tau(T_{opt}) \leq N) = \max_{T \in [0, \infty]} P(\tau(T) \leq N) \quad (2)$$

$$\mathbb{E}[\tau(T_{opt})] = \min_{T \in [0, \infty]} \mathbb{E}[\tau(T)] \quad (3)$$

式 (1) に示す $f(X_t)$ は, t 番目の推移で得られた解 X_t のエネルギーを示す. この式では, 予備実験で決定する評価計算回数 N の一定温度 SA を行い, 各温度で得られた最良エネルギーの中から最良のものを得た温度を重要温度領域としている.

式 (2) では, 一定温度 SA で最適解に到達する確率を全ての温度で比較し, その中から最大値を取る時の温度を重要温度領域としている.

式 (3) では, 一定温度 SA で最適解に到達するまでの時間を全ての温度で比較し, その中で最小の時間を取った温度を重要温度領域としている. また, 一定温度 SA で最適解に到達しない場合は, 最適解から誤差 ϵ の解 x を得るまでに要した時間から, 重要温度領域を決定する.

3 MPSA について

並列 SA の温度スケジュールの多くは, 従来の逐次 SA に用いたものを, そのまま適用する手法が多い. これに対して温度並列 SA³⁾ や MPSA⁴⁾ は, 並列に実行する各 SA の温度スケジュールが異なることが特徴的である.

ここでは MPSA について紹介する.

Hector が示す MPSA(Methodology to Parallelize Simulated Annealing) では, 異なる温度が割り当てられた複数のプロセッサが同時に解探索を行うことで, 計算時間の短縮をはかっている. Fig. 1 に MPSA の概略図を示す.

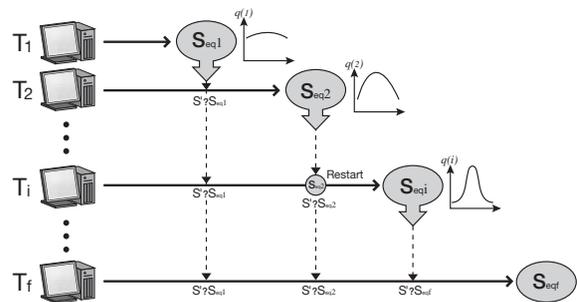


Fig. 1 Methodology to Parallelize Simulated Annealing

MPSA では各プロセッサに異なる温度 T と初期解 S が割り当てられ, その温度での一定温度 SA を同時に行う. 解のエネルギー分布が準平衡状態に達したプロセッサは最終的な解を低温のプロセッサに送信し, その解より悪い解を持つプロセッサは現在の解を置き換えて解探索を再開する. 最終的には, 最も低い温度のプロセッサが最良の解を持ち, その解は各温度での準平衡状態を経ているため, 良好な品質を示すと考えられる.

このように, MPSA では SA の並列化によって温度スケジュールを分割し, 計算時間の短縮をはかっている. しかし, 各プロセッサの初期の温度割り当てには十分な予備実験が必要であり, 高い温度から低い温度へと順に準平衡状態に達しない場合, 待ち状態に陥るプロセッサが生じることなど, いくつかの問題点があげられる.

参考文献

- 1) David T.CONNOLLY. An improved annealing scheme for the qap. *European Journal of Operational Research*, Vol. 46, pp. 93-100, 1990.
- 2) Mark Fielding. Simulated annealing with an optimal fixed temperature. *SIAM J.*, Vol. 11, No. 2, pp. 289-307, 2000.
- 3) 小西健三, 瀧和男, 木村宏一. 温度並列シミュレーテッド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.
- 4) Hector Sanvicente S. and Juan Frausto S. A methodology to parallel the temperature cycle in simulated annealing. *Lectures Notes on Computer Science*, pp. 63-74, 2000.