

レプリカ交換モンテカルロ法の 巡回セールスマン問題への適用

北大理 佐々木志剛、根本幸児

1 introduction

エネルギー基底状態を見つける、最適化問題が困難な系として巡回セールスマン問題、スピングラス等がよく知られているが、その原因として、これらの系の自由エネルギーが低温相で非常に多くの local minimum を持っている事が挙げられる。もし、これらの系に対して低温での熱平衡状態を実現することができるのなら、我々はかなり高い確率で基底状態を見つけることができる。そのうえ、低温相におけるこれらの系の熱力学的性質も調べることができる。しかし、通常のモンテカルロ法では系はなかなか local minimum から抜け出すことはできず、熱平衡状態に達するのに非常に長い時間がかかってしまう。

この困難を克服するために、これまで数多くのアルゴリズムが開発され、今なお開発され続けている。これらのアルゴリズムのうちの1つが福島・根本によって開発されたレプリカ交換モンテカルロ法である^{1,2)}。このアルゴリズムはスピングラス等に適用され、これまでに多くの成果を挙げている。今回我々はこのアルゴリズムを巡回セールスマン問題への適用し、いくつか興味ある結果が得られたのでその紹介を行なう。

2 レプリカ交換モンテカルロ法

この節では、レプリカ交換モンテカルロ法について簡単に説明する。詳細については^{1,2)}を参考にして頂きたい。このアルゴリズムでは M 個のレプリカからなる合成系を考える。これらのレプリカは互いに相互作用をせず、それぞれ異なった温度の熱浴に接している。これらの逆温度を $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_M$ と表わす。説明を簡単にするため、 $\beta_1 < \beta_2 < \dots < \beta_M$ であるとする。

この合成系では、逆温度 $\beta_1, \dots, \beta_M$ に接しているレプリカの状態が $X_1, \dots, X_M$ である時の熱平衡状態の重みは次のように与えられる。

$$P_{\text{eq}}(X_1, \dots, X_M) = Z^{-1} \prod_{k=1}^M \exp[-\beta_k \mathcal{H}(X_k)] \quad (1)$$

$$Z = \text{Tr}_{X_1, \dots, X_M} \prod_{k=1}^M \exp[-\beta_k \mathcal{H}(X_k)] \quad (2)$$

ここで $\mathcal{H}$ はハミルトニアンを表わす。レプリカ交換モンテカルロ法では、この熱平衡状態をできるだけ早く実現する為、個々のレプリカに対して通常のモンテカルロシミュレーションを行なう他に、レプリカの交換という操作を行なう。このレプリカの交換によって、それぞれのレプリカが接している熱浴の温度は時間が進むと共に次々と変化する。そのため、たとえ温度が低い時に local minimum に捕われていても、温度が高くなった時にそこから脱することができるため、系の熱平衡化が促進される。

2つの交換するレプリカの温度が違いすぎると、実際には交換がほとんど受理されないため、以降では隣り合うレプリカとの交換のみを考える。また、合成系の状態が $\{X_1, \dots, X_M\}$ である時に、 m 番目と $m+1$ 番目のレプリカを交換する確率を $W(m|X_1, \dots, X_M)$ と表わす。(1) 式の熱平衡分布を実現するために、この遷移確率には次の詳細釣り合いの条件が課せられる。

$$\begin{aligned} W(m|\dots X_m, X_{m+1} \dots) P_{\text{eq}}(\dots X_m, X_{m+1} \dots) \\ = W(m|\dots X_{m+1}, X_m \dots) P_{\text{eq}}(\dots X_{m+1}, X_m \dots) \end{aligned} \quad (3)$$

もしメトロポリス型の遷移確率を採用するのであれば、 $W(m|X_1, \dots, X_M)$ は次のように与えられる。

$$W(m|X_1, \dots, X_M) = \begin{cases} 1 & \Delta \leq 0 \\ \exp[-\Delta] & \Delta > 0 \end{cases} \quad (4)$$

$$\Delta = -[\beta_m - \beta_{m+1}][\mathcal{H}(X_m) - \mathcal{H}(X_{m+1})] \quad (5)$$

3 温度の設定

このアルゴリズムにおいて唯一調整しなければならないのは、温度の設定である。まず最初に、一番低い温度 T_L は基底状態を高い確率で見つけ出すくらい低温に、一番高い温度 T_H は容易に local minimum から抜け出せるくらいに高温に決定する。問題は、 T_L から T_H の間にいくつの温度をどのくらいの間隔で用意するかである。我々はこの温度を、エルゴード時間 τ_E が最少になるように設定することを試みた。ここで τ_E は、個々のレプリカが一番低い温度 $T_L (= 1/\beta_M)$ から高い温度 $T_H (= 1/\beta_1)$ まで移るのにかかる平均的な時間で、低温で独立なサンプルを得るのにかかる時間、と見なすことができる。

まず最初に、逆温度 β_m と β_{m+1} のレプリカが交換を起こす平均確率 $a(m)$ を、近似的に次のように評価できると考える。

$$a(m) \approx \exp[-\{\beta_m - \beta_{m+1}\}\{U(\beta_m) - U(\beta_{m+1})\}] \quad (6)$$

ここで、 $U(\beta)$ は逆温度 β における熱平均エネルギーである。そして、この交換確率が温度に依らないように、つまり $a(m) = a(m=1, 2, \dots, M-1)$ を満たすように温度の設定を行なう。

次に、この交換確率 a を用いてエルゴード時間 τ_E を次のように評価する。今、 m 番目のレプリカに着目をする。このレプリカが左に動くためには、交換するレプリカ対として $\{\beta_{m-1}, \beta_m\}$ が選ばれ、その交換が受理されなければならない。その確率は $a/2$ である。同様に考え、右に動く確率も $a/2$ である。このことから、個々のレプリカは平均 0、分散 a のランダムウォークをしていると見なすことができる。従って T_L から、そこから M だけ離れた T_H まで移動するのにかかる時間、つまり τ_E はおおよそ次のように評価できる。

$$\tau_E = M^2/a \quad (7)$$

これらの近似評価を用いて、我々は次のように温度を決定した。

(i) 適当な数の温度を β で見て均等に配置してレプリカ交換モンテカルロ法を行なう。そして $T_L \leq T \leq T_H$ での熱平均エネルギーを評価する。

(ii) ある温度の個数 M に対して

$$\begin{aligned} \beta_1 &= 1/T_H \\ \{\beta_{m+1} - \beta_m\} \{U(\beta_{m+1}) - U(\beta_m)\} &= C(M) \quad (m = 1, \dots, M-1) \\ \beta_M &= 1/T_L \end{aligned} \quad (8)$$

を満たす $\{\beta_m\}$ 及び $C(M)$ を数値的に求める。ここで、 $a = \exp[-C(M)]$ が成り立つことに注意する。

(iii) $\tau_E(M) = M^2/a = M^2 \exp[C(M)]$ を評価する。

(iv) このようにして $\tau_E(M)$ を様々な M に対して評価し、それを最小化する温度の個数 M 、及びそれに対応する温度を採用する。

4 エルゴード時間のサイズ依存性

この節では、前節の方法に従って温度の決定をした場合、エルゴード時間がサイズにどのように依存するかについて考察する。

まず最初に、エルゴード時間が温度の個数 M にどのように依存するか考える。仮に温度の個数を 2 倍にすると、(8) 式の $\beta_{m+1} - \beta_m$ 、 $\mathcal{H}(\beta_{m+1}) - \mathcal{H}(\beta_m)$ は共におおよそ $\frac{1}{2}$ になり、その結果 $C(M)$ はおおよそ $\frac{1}{4}$ になると考えられる。このことから、 $C(M)$ は M^{-2} に比例していると考えることができる。図 1 は都市数 100 の巡回セールスマン問題に対して実際に $C(M)$ を評価して得られた結果だが、確かに M^{-2} に比例していることがわかる。またエネルギーの示量性から、その比例定数は系のサイズ N に比例することがわかる。従って、 $\tau_E(M)$ はおおよそ次のように評価できる。

$$\tau_E(M) \approx \exp\left[\frac{\alpha N}{M^2}\right] \quad (9)$$

ここで、 α はある定数である。この式から、 $\tau_E(M)$ は $M^* = \sqrt{\alpha N}$ に唯一の極小値を持つこと、レプリカ交換確率 $a = \exp[-C(M^*)]$ は、 α や N によらずに $\exp(-1)$ となること、 $\tau_E(M^*) = \alpha N \exp(1)$ であることが簡単に確かめられる。このことから、エルゴード時間は系のサイズに比例する、とすることができる。

このエルゴード時間に対応する量はマルチカノニカル法においても測定されており、ここでは基底エネルギー付近のエネルギーの低い状態から、非常に高い温度に対応するエネルギーの高い状態に移るのにかかる時間が測定されている。そして、エルゴード時間はサイズのべき乗に比例するのだが、そのべきの指数は、例えば2次元10状態ポッツモデル³⁾では2.325、3次元 $\pm J$ イジングスピングラス^{4,5)}では3.42、あるいは3.8という結果が得られている。それと比較して、レプリカ交換モンテカルロ法はエルゴード時間が系のサイズ N に対してかなりゆっくりと増加すると言することができる。

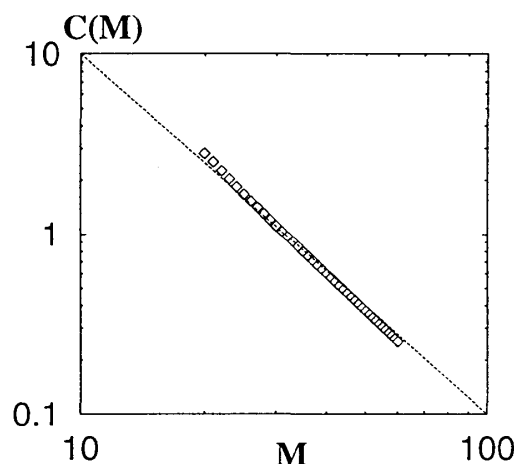


図1: $C(M)$ の M 依存性。点線は M^{-2} の直線を表わす。

5 巡回セールスマン問題への適用

この節では、レプリカ交換モンテカルロ法の巡回セールスマン問題への適用とその結果の紹介を行なう。その前に、まず我々が行なったシミュレーションの具体的な方法について説明する。

巡回経路の更新のための素過程として、反転・平行移動と呼ばれる2つの操作を行なった。これらの操作は、巡回経路の中から1つながりの部分を取り出し、前者はその部分に対して反転を、後者は平行移動をすることによって実行される(図2参照)。これらの素過程は、巡回セールスマン問題のモンテカルロシミュレーションを行なう際によく用いられる一般的なものである⁶⁻⁹⁾。この2つの素過程のうちどちらを行なうかは $\frac{1}{2}$ の確率でランダムに選ばれる。これらの操作を行なう部分の選び方は ${}_NC_2$ 通りだけあり、オーダーとして N^2 なので N^2 回の素過程を試みるたびに1MCS進んだと考える。そして、1MCSごとにレプリカ交換を試みる。また、隣りの都市との平均距離をエネルギー・温度の単位とした。ここで隣りの都市との平均距離は、例えば面積 S の2次元平面中に N 個の都市がある時、 $\sqrt{S/N}$ と評価される。

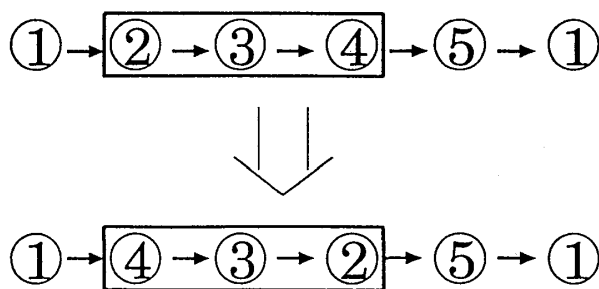
まず最初に、我々は最適解がわかっている、都市数100の2次元巡回セールスマン問題に対してレプリカ交換モンテカルロ法を適用した。この問題は1/kサンプリング法¹⁰⁾においても適用されているので、それとの比較も行なう。 $T_L = 0.075$ 、 $T_H = 1.875$ として、3節で説明した方法を用いて温度を決定した。そして、1/kサンプリング法と同様に、異なった初期ルートと乱数を用いた10回の試行を行なった。

まず、図3はレプリカ交換が受理された平均確率を温度に対してプロットしたものである。理論的に予想される値、 $\exp(-1)$ とはやや異なるが、ほとんど温度に依存せず一定値を保っていることがわかる。また図4は、ある1つの試行において、時間 t までに見つかったエネルギー最小値 $E_{\min}(t)$ が時間と共にどう減少するかをプロットしたものである。かなりはやい時間で $E_{\min}(t) \approx E_{\min}$ となっていることがわかる。そして図5は、ある1つのレプリカに着目した時、そのレプリカがある時刻で、何番目の熱浴に接しているかをプロットしたものである。温度は低温から高温へと順に並んでいる。 T_L から T_H の間を何度も行き来している様子が読み取れる。

最後に、最適解を見つけるまでに行なったエネルギー評価の回数を測定し、その結果を1/kサンプリング法と比較した。今回の我々のシミュレーションでは、10回の試行に対してエネルギー評価の回数が $6.1 \times 10^6 \sim 6.2 \times 10^7$ の値を取った。これに対して、1/kサンプリング法では同様に10回の試行に対して $2.0 \times 10^6 \sim 6.4 \times 10^7$ という結果が得られており¹⁰⁾、この2つのアルゴリズムは、ほぼ同程度の速さで最適解を見いだしていると言えることができる。

次に、4節で述べたようにエルゴード時間が本当に系のサイズ N に比例するのかどうかを、2次元巡回セールスマン問題のシミュレーションを行なって検証した。 $T_L = 0.1$ 、 $T_H = 2.5$ とし、 N 個の都市の配置は $\sqrt{N} \times \sqrt{N}$ の2次元平面上に一様分布に従って選んだ。そして、それぞれのサイズに対して、1つの都市配置に対するシミュレーションを行なった。その結果が図6である。確かにおよそサイズ N に比例していると言えることができる。

(a) 反転



(b) 平行移動

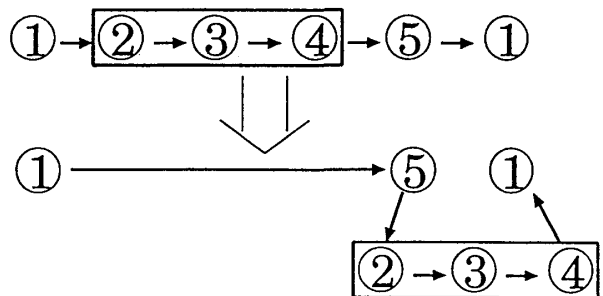


図2：巡回セールスマン問題で用いられる2つの素過程。

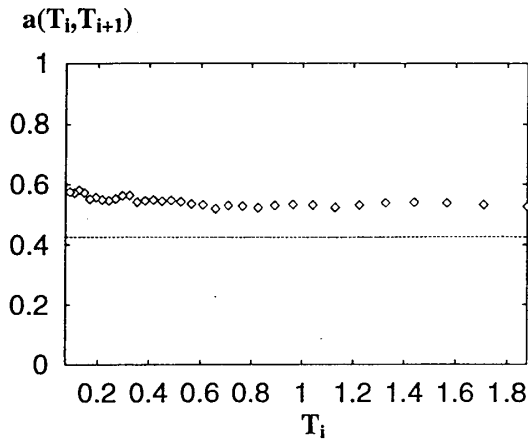


図3：レプリカ交換の平均確率。点線は理論的に予想される交換確率 $\exp(-1)$ を表わす。

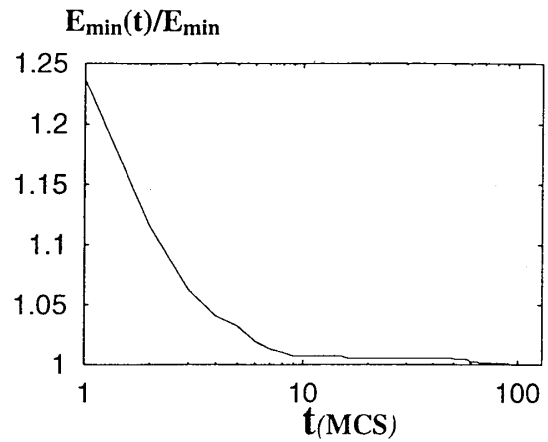


図4： $E_{\min}(t)$ の時間変化。

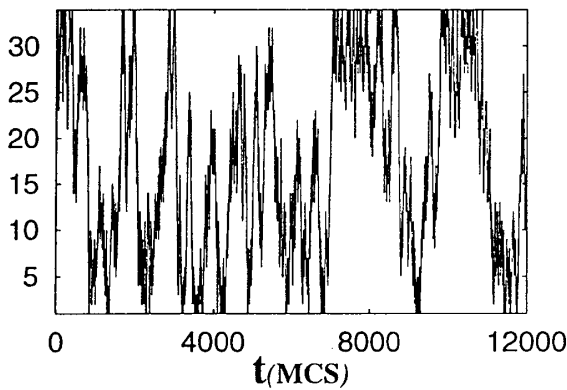


図5：ある1つのレプリカの温度変化。

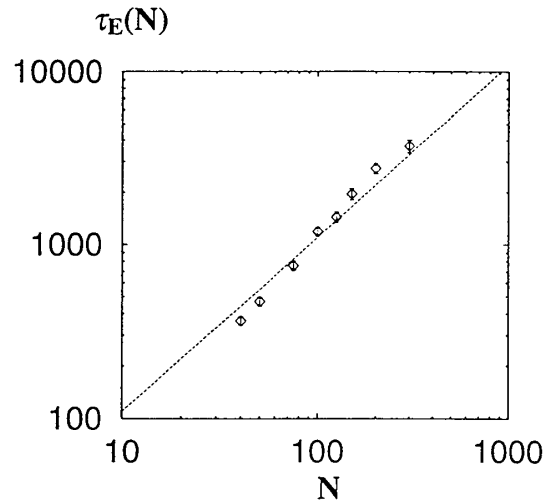


図6：エルゴード時間のサイズ依存性。点線は N^1 の直線を表わす。

6 まとめ

レプリカ交換モンテカルロ法の巡回セールスマン問題に対する適用を行なった。その際、エルゴード時間が最少となるように温度の設定を試みた。そしてこれらの温度を用いてシミュレーションを行ない、レプリカ交換確率が温度によらずほぼ一定値になること、エルゴード時間がサイズ N に比例することを確認した。またレプリカ交換モンテカルロ法と $1/k$ サンプリング法との比較を行ない、両者はほぼ同じくらいの速さで最適解を見つけ出していることがわかった。

参考文献

- [1] K. Hukushima, H. Takayama and K. Nemoto: Int. J. Mod. Phys. C 7 (1996) 337.

- [2] K. Hukushima and K. Nemoto: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 1604.
- [3] B. A. Berg and T. Neuhaus: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 9.
- [4] B. A. Berg, T. Celik and U. Hansmann: Europhys. Lett. **22** (1993) 63.
- [5] B. A. Berg, U. Hansmann and T. Celik: Phys. Rev. B **50** (1994) 16444.
- [6] S. Lin: Bell. Syst. Tech. J. **44** (1965) 2245.
- [7] S. Lin and B. W. Kernighan: Oper. Res. **21** (1973) 498.
- [8] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B. P. Flannery: *Numerical Recipes in C* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1992) 2nd ed.
- [9] T. J. P. Penna: Phys. Rev. E **51** (1995) R1.
- [10] B. Hesselbo and R. B. Stinchcombe: Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 2151.