組み合わせ最適化問題

Combinational Optimization

この章の目的

- 統計力学から計算機科学へ
  - 最低エネルギー状態を求める問題
  - 組合せ最適化問題
- 組合せ最適化問題
  - 厳密解を得られない場合
  - 近似的解法

組み合わせ最適化問題とは

- Combinational Optimization
- **離散変数の組** a set of discrete variables $\{x_i\}$
- **コストあるいはエネルギーなど**

$$E(\{x_i\})$$

- **最小化(最大化)**

$$\min_{\{x_i\}} E(\{x_i\})$$

組合せ最適化問題の例

- スピン系の基底状態(エネルギー最小)
- 巡回セールスマン問題(Traveling Salesman Problem)
  - N 個の都市を全て一度ずつ訪問する最短経路
- 最短経路問題(Shortest Path Problem)
  - 二点を結ぶ最短経路
- 二分割問題(Bipartition Problem)

組合せ最適化問題の解法

- 解法は基本的に列挙法 (enumeration)
  - 離散変数に関する問題であるため
  - 組み合わせ最適化問題の解法とは列挙の合理化
  - 変数の数が多くなると指数関数的に組み合わせ数が増えることがある
  - 変数の数に対してその解法手順が多項式程度で増えるものをPと呼ぶ。
- 近似解を速く見つけるほうが重要なものも多数ある

- 演習4 最短経路問題の解法を調べ、実際にプログラムを作成しなさい。

スピングラスと二分割問題

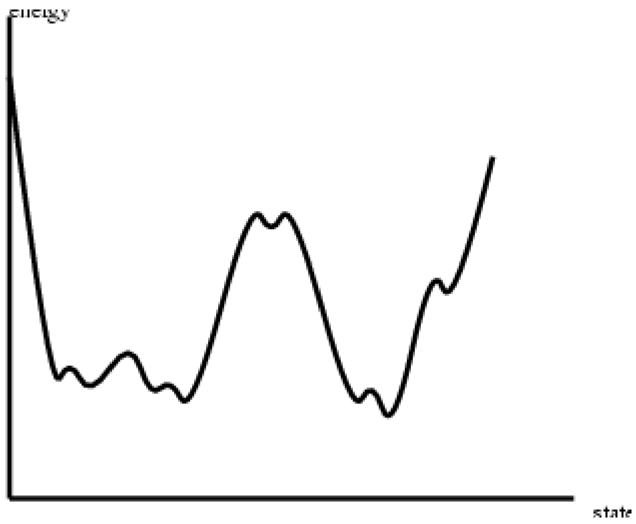
- Ising spin glassは上向きと下向きへの二分割問題

$$E = -\frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{i \neq j} J_{ij} s_i s_j$$

- $\{J_{ij}\}$ は平均0、分散1の正規分布
  - エネルギー極小値の数
  - カスケード的相転移

$$\langle m \rangle \sim e^{0.2N}$$

エネルギー眺望 (Energy Landscape)



- 高温では、全ての状態が等確率で実現
- 低温では、低エネルギー状態が指数関数的に高確率で実現
- 温度を下げると、次々に詳細が見えてくる

様々な近似解法

- 分割攻略(Divide and Conquer)
  - 問題を小さく分け、各小問題の厳密解を作る
- ランダム法(Random Method)
  - 状態をランダムに生成し、そのなかの最小を解とする。
  - 極小であることも保障できない。
- 緩和法(Relaxation Method)
  - 適当な初期条件から緩和させる。
  - 極小値を得ることができる。

Simulated Annealing

- 緩和法の利点＋乱数による極小値からの脱出
- Annealing：徐冷、焼きなまし
  - 徐々に温度を下げていくこと
- 高温で、全ての状態を実現
- 次第に温度を下げ、低エネルギー状態の実現確率を上げる

- 一定温度で十分に緩和させ、平衡状態を作る
  - Monte Carlo法
- 無限にゆっくり下げれば、確率1で最低エネルギー状態を得ることができる。
- S. Kirkpatrick et al., Science **220** (1983) 671.

巡回セールスマン問題

- N 個の都市と各都市間の距離$d\,(a,b)$が定義されている。
- 経路の組み合わせの爆発的増大

$$M = (N-1)!/2$$

$$N = 5 \;\rightarrow\; M = 12$$

$$N = 10 \;\rightarrow\; M = 181440$$

$$N = 20 \;\rightarrow\; M \sim 10^{17}$$

- ある経路をμとする
  - 経路 $\left\{ c_0^\mu, c_1^\mu, \ldots, c_{N-1}^\mu \right\}$
  - 境界条件 $c_N^\mu = c_0^\mu$
  - 距離

$$D^\mu = \sum_{k=0}^{N-1} d\left(c_k^\mu, c_{k+1}^\mu \right)$$

- 平衡状態で経路μが実現する確率

$$P(\mu) = Z^{-1} \exp\left(-\beta D^\mu \right)$$

- ある経路μから別の経路νへの遷移
  - $D^{\nu} < D^{\mu}$ ならば確率1で経路νへ
  - そうでない場合、確率 $p = \exp\left[-\beta \left(D^{\nu} - D^{\mu} \right) \right]$ で経路νへ

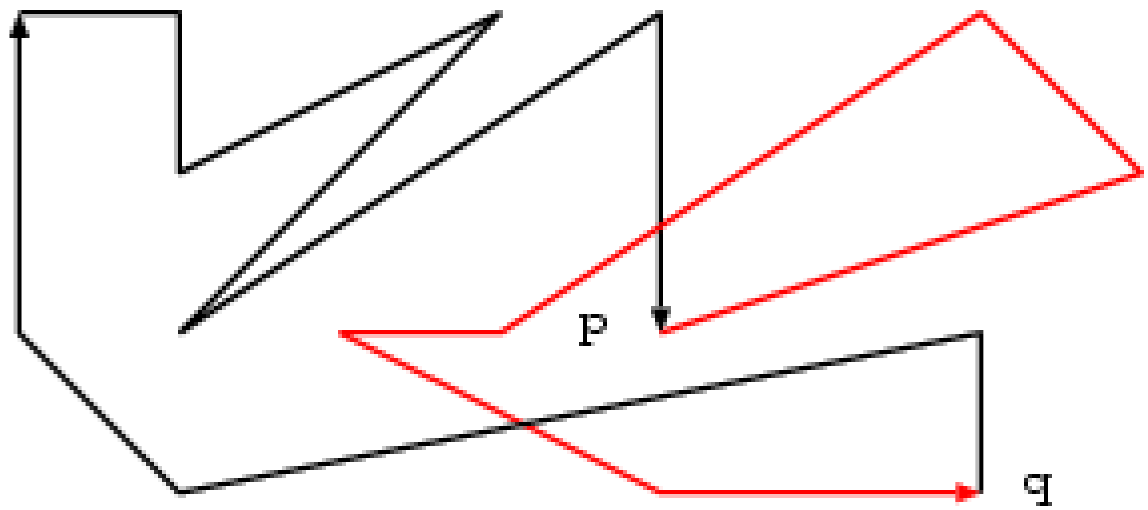
新しい経路の作り方

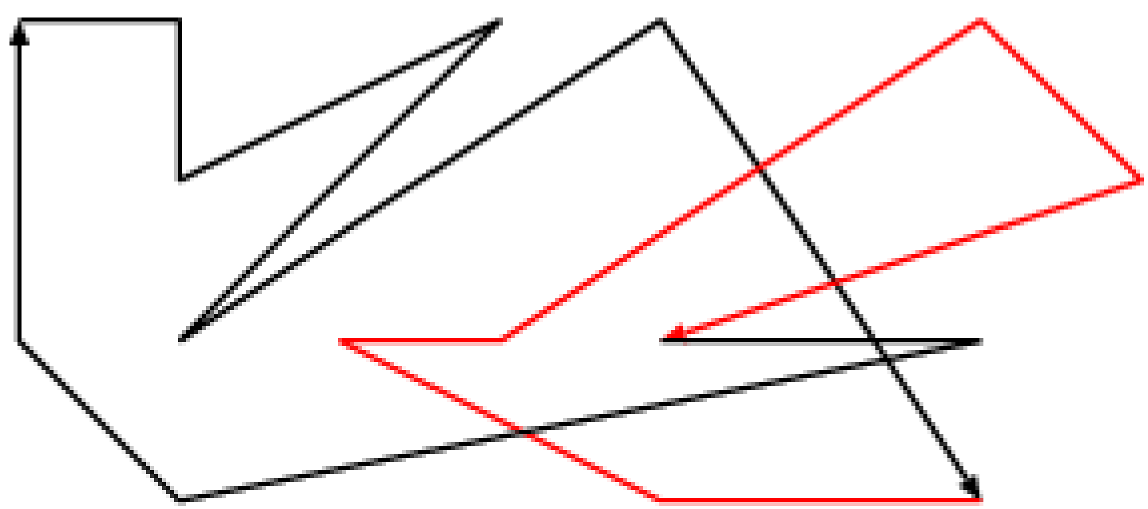
- 経路μから二点pとqをランダムに選択

$$\left\{c^\mu_{0,} c^\mu_{1,} \ldots, c^\mu_{p}, c^\mu_{p+1}, \ldots, c^\mu_{q-1}, c^\mu_{q}, \ldots, c^\mu_{N-1}\right\}$$

- 二点pからqへの経路を反転する

$$\left\{c^\mu_{0,} c^\mu_{1,} \ldots, c^\mu_{q}, c^\mu_{q-1}, \ldots, c^\mu_{p+1}, c^\mu_{p}, \ldots, c^\mu_{N-1}\right\}$$

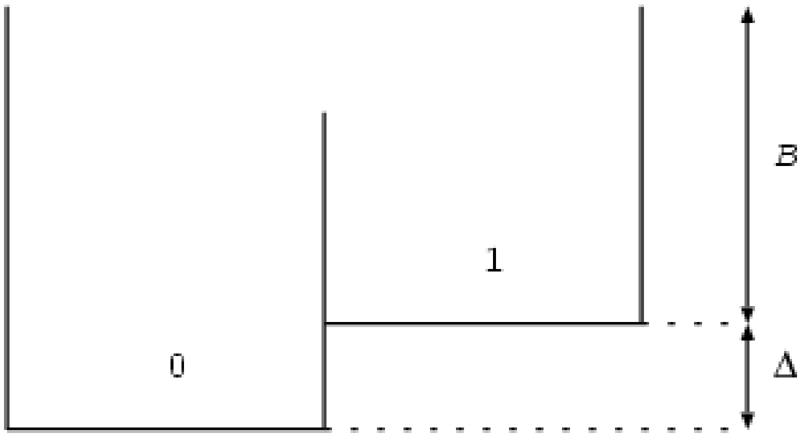

p
q



- 演習5 簡単な(小さい)巡回セールスマン問題をsimulated annealingで解き、厳密解と比較しなさい。

残留エネルギー (Residue Energy)

- Simulated Annealingによって求めた状態と最低エネルギー状態とのエネルギー差
- 二準位系(二つの準位しかない系) $i=0,1$
  - 状態*i* にある確率



$$P=P_{1},\quad P_{0}=1-P$$

Master方程式

- 確率の時間変化(Master方程式)

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} &= e^{-(B+\Delta)/T}(1-P) - e^{-B/T}P \\
&= -\gamma\left(P - P_{\mathrm{eq}}\right)
\end{aligned}
$$

$$
\gamma = e^{-(B+\Delta)/T} + e^{-B/T}
$$

$$
P_{\mathrm{eq}} = \left(1 + e^{\Delta/T}\right)^{-1}
$$

$$P(t)=P_{\mathrm{init}}e^{-\gamma t}+P_{\mathrm{eq}}$$

- 低温極限 $T=0$ では $\gamma=0$ となり、緩和に無限の時間を要する。
- 高温極限 $T=\infty$ では、 $P=1/2$ となる。
- Master方程式の右辺の最大にする最適温度
  - 効率良く徐冷

$$T=T_{\mathrm{opt}}$$

- Master方程式の右辺を温度で微分する

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial}{\partial T}\left[e^{-(B+\Delta)/T}(1-P) - e^{-B/T}P\right] \\
&= \frac{B+\Delta}{T}e^{-(B+\Delta)/T}(1-P) - \frac{B}{T}e^{-B/T}P \\
&= T^{-2}e^{-(B+\Delta)/T}\left[(B+\Delta)(1-P) - BP\,e^{\Delta/T}\right]
\end{aligned}
$$

- 最適な温度

$$
\exp\left[-\frac{\Delta}{T_{\mathrm{opt}}}\right] = \frac{P}{1-P}\frac{B}{B+\Delta}
$$

- **最適温度でのMaster方程式**

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} = -\frac{\Delta}{B}(1-P)\left(\frac{P}{1-P}\frac{B}{B+\Delta}\right)^{(B+\Delta)/\Delta}$$

- **十分時間が経過すると** $P \ll 1$

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} \approx -\frac{\Delta}{B}\left(\frac{B}{B+\Delta}\right)^{(B+\Delta)/\Delta} P^{(B+\Delta)/\Delta}$$

$$P = \bar{P} t^{-\Delta / B}, \quad \bar{P} = \left(\frac{B}{B + \Delta} \right)^{-(B+\Delta)/B}$$

- Annealing schedule

$$T_{\text{opt}} \sim \frac{B}{\ln t}$$

- **残留エネルギー**

$$E = \Delta t^{-\Delta / B}$$