

適応的温度調節機能を持つ並列シミュレーテッドアニーリング

Parallel Simulated Annealing with an Adaptive Temperature

輪湖 純也

Junya WAKO

Abstract: Simulated annealing (SA) is an effective general heuristic method for solving many combinatorial optimization problems. This paper deals with two problems in SA. One is the long computational time of the numerical annealings. The other one is the determination of the appropriate temperature schedule in SA. On the other hand, there is an important temperature region in a temperature schedule of SA, where the search is carried out very efficiently. This paper proposes a new model of Parallel SA, which temperature autonomously converges the important temperature region. The proposed method is applied to solve many JSPs (Jobshop Scheduling Problems), and it is found that the method is very useful and effective.

1 はじめに

シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing:SA) は広範囲の組合せ最適化問題に有効な汎用的近似解法であり, 温度を緩慢に冷却することで良好な解を得ることが可能である¹⁾. SA の最大の特徴は, 温度と呼ばれるパラメータを用いた改善方向への状態遷移であり, 温度を緩慢に冷却することで良好な解を得ることが可能である²⁾. しかしながら, 緩慢な冷却による膨大な計算コストと, 温度スケジュールを決定するためのパラメータチューニングは, SA が抱える問題点と指摘され, これらを克服するための研究は数多く行われている.

SA の計算コストが高いという問題を克服するために, 近年では SA を並列化するアプローチが注目され, 計算時間の短縮だけでなく, 解探索能力の向上も報告されている^{2, 3)}. 一方, 温度スケジュールに関する研究も数多く行われており, なかでも, 特定の温度のみの探索で良好な解が得られることが確認されている^{4, 5)}. 対象問題依存であるこの温度を適応的に決定することで, 解探索能力を向上させることが可能であると考えられる.

そこで, 本論文では探索に有効な温度を自律的に探索するメカニズムを持つ並列 SA (Parallel SA with an Adaptive Temperature:PSA/AT) を提案する. 提案手法をジョブショップスケジューリング問題 (Job-shop Scheduling Problem: JSP) に適用し, 解探索能力と自律的に決定する温度スケジュールについて検証を行う.

2 SA と温度並列 SA

SA は, 金属を融解状態になるまで加熱し, 徐々に冷却する操作「焼きなまし (アニーリング)」を計算機上で模擬した汎用最適化手法である¹⁾. SA のアルゴリズムは生成処理, 受理判定, クーリングの 3 つの処理から構成される. SA の欠点は, 温度の緩慢な冷却による膨

大な計算コストと, 対象問題に適した温度スケジュールの設定が困難であることの 2 点である.

小西らが提案する温度並列 SA (Temperature Parallel SA:TPSA)^{7, 8)} は, 並列処理と高い親和性を持ち, 温度スケジュールを自動化することにより SA が抱えるこれらの問題を克服する手法と考えられる. TPSA では, 複数のプロセスに異なる温度を与え, 各プロセスは一定温度のアニーリングを行う. さらに, ある一定間隔で隣接する温度のプロセス間で確率的に解交換を行う. Fig. 1 に逐次 SA に用いる温度スケジュールと, TPSA における温度スケジュールを示す. 図に示すように, 逐次 SA では高温から緩慢に冷却することで解が収束するのに対して, TPSA では複数の解が独自の温度スケジュールを自動決定する.

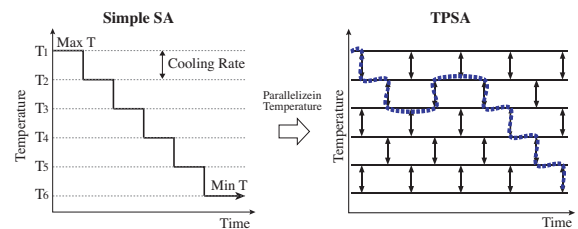


Fig. 1 逐次 SA と TPSA の温度スケジュール

しかしながら, TPSA においても問題点が存在する. TPSA では, 逐次 SA と同様に最高温度と最低温度を対象問題に適した値に設定する必要がある, この決定が不適切である場合, 良好な解を得ることはできない. そのため, 自動化された温度スケジュールを持つ新たな手法の開発は現在も待たれている.

3 SA における重要な温度領域

3.1 重要温度領域の確認

近年の研究において，特定範囲の温度での解探索によって良好な解を得ることが報告されている⁵⁾．本論文では，この特定範囲の温度領域を重要温度領域と呼ぶ．JSP における重要温度領域の存在を確認するために，一定温度 SA が解探索性能に与える影響について調べる．実験は，温度を 50.0 から 1.0 まで等比的に 32 分割し，総探索数を 320000 に固定し，20 回試行の平均を比較する．その中で最も良好な解から誤差 1% 以内の解を得た温度を重要温度領域 $T_{opt} \text{ Region}$ とする．Fig. 2 に，JSP の代表的なベンチマーク問題である ft10 を用いた結果を示す．Fig. 2 の横軸に温度，縦軸に Makespan をとる．

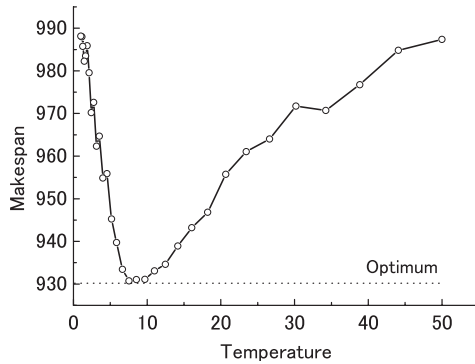


Fig. 2 ft10 における重要温度領域

この図より，温度 7 ~ 10 付近で精度の良い解が得られており，JSP に重要温度領域が存在することを確認できる．Table 1 に JSP の代表的なベンチマーク問題の $T_{opt} \text{ Region}$ を示す．Table 1 から，重要温度領域の値やその温度領域の広さは問題に依存していることが分かる．

Table 1 JSP の重要温度領域

JSP	最適解	$T_{opt} \text{ Region}$
ft10	930	5.8~14.2
orb1	1059	7.5~14.2
abz7	665	1.7~3.5
abz9	686	1.7~3.0
la21	1046	3.5~12.5
la40	1222	2.7~12.5

3.2 各温度による解の動きの特徴

次に，最高温度，最低温度，重要温度の各一定温度の SA を実行した時の解の動きを比較する．Fig. 3 に ft10 における解探索の履歴を示す．横軸に解探索回数，縦軸に Makespan をとる．

この図から，温度と解の動きが密接に関係していることが分かる．つまり高温状態での探索は解が収束せず，

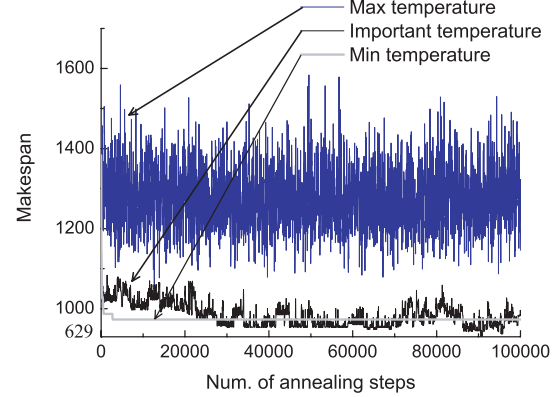


Fig. 3 高温, 低温, 重要温度の各一定温度 SA での解の動き

また低温状態での探索は局所解に陥っているのに対し，重要温度での探索は解品質が良好な領域で効率的な探索が可能である．

これらの結果から分かるように，対象問題ごとに重要温度領域を特定することができれば，その温度で集中的に解探索を行うことにより，良好な解を得ることができる．このような考えを基本として，適応的に温度調節を行う並列 SA (Parallel SA with an Adaptive Temperature: PSA/AT) を提案する．

4 適応的温度調節機能を持つ並列 SA

PSA/AT では，解の値とは別に重要温度指数 (Important Temperature Index: ITindex) と呼ばれる値を計算することにより，重要温度領域を探索するメカニズムを持つ．PSA/AT のアルゴリズムを Fig. 4 に示す．

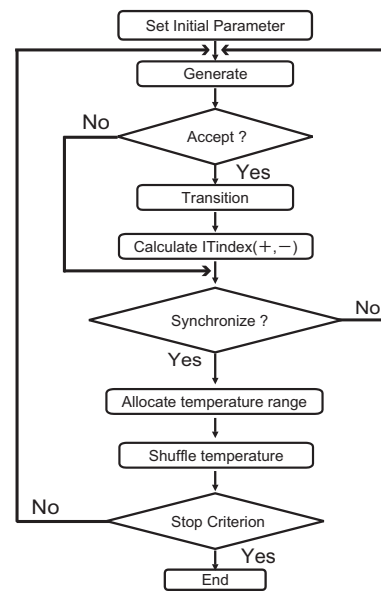


Fig. 4 PSA/AT のアルゴリズム

解の生成，受理判定，状態遷移：

解生成 (Generate) では，現状態から近傍範囲内の次状態を生成する処理を行う．受理 (Accept) 判定では，その次状態へ遷移するかを Metropolis 基準を用いて判定し，受理された場合は解遷移 (Transition)，非受理の場合は新たな次状態を生成する．これらの処理は通常の SA と同じである．ここで，JSP の次状態生成には，クリティカルブロック近傍 (CB 近傍)⁹⁾ を用いる．CB 近傍により生成された次状態のいくつかは，実行可能ではない．そこで，ここでは GT 法¹⁰⁾ により実行可能解への修正を加えている．

重要温度指数の計算 (Calculate ITindex)：

Fig. 3 で示したように，SA では解の動きと温度に間接な関係があるため，解の動きを比較することによってそれぞれの温度の善し悪しを表現できる．重要温度指数は，この考えに基づいて設計されており，解探索による解の動きから計算される， $ITindex(+)$ と $ITindex(-)$ の 2 つの値からなる．

具体的には，全プロセスに同一の基準値を設定し，各プロセスごとに受理された解が基準値より良好なエネルギーで遷移した場合， $ITindex(+)$ の値を 1 加算し，基準値より悪いエネルギーで遷移した場合， $ITindex(-)$ の値を 1 加算する．本論文では，基準値に全プロセスの同期周期ごとのエネルギー平均を用いている．この値を用いれば，次式により受理率 p の計算が行える．ここで， N は同期周期を示している．

$$p = (ITindex(+) + ITindex(-))/N \quad (1)$$

次周期の温度割り当て (Allocate temperature range)：

次周期の温度範囲は，同期周期ごとに全プロセスが同期をとり，重要温度指数の比較を行うことで決定する．その際，次の条件を用いて，次周期の最高温度，最低温度を設定し，この温度範囲内で各プロセスの温度を等比間隔で割り当てる．

- 最高温度の決定方法

If $ITindex(+)_\text{max} > ITindex(-)_\text{max}$

最高温度を維持する

Else

最高温度を下げる

If $p_\text{max} < 0.05$

最高温度を上げる

- 最低温度の決定方法

If $ITindex(+)_\text{min} > ITindex(-)_\text{min}$

最低温度を維持する

Else

最低温度を上げる

If $p_\text{min} < 0.05$

最低温度を下げる

ここで， $ITindex(+(-))_\text{max}$ は，最高温度で探索するプロセスが持つ $ITindex(+(-))$ ， $ITindex(+(-))_\text{min}$ は，最低温度の $ITindex(+(-))$ ， $p_\text{max}(\text{min})$ は，最高 (最低) 温度の受理率を示している．最高温度，最低温度を上下させる幅は，等比的に割り当てた温度の 1 段高いまたは低い温度にする．

これにより最高 (最低) 温度が重要温度領域よりも高 (低) い場合は，温度を下 (上) げるため，重要温度領域を含む温度範囲の決定が可能になる．

解交換 (Shuffle temperature)：

次周期の最高温度と最低温度の割当てを行った後，ランダムに選択した 2 つのプロセス間で解交換を行い，これを非復元抽出によりプロセス数/2 回行う．

5 数値実験

5.1 実験概要

提案手法の有効性を検証するために，PSA/AT，温度並列 SA (TPSA) を JSP に適用し，解探索能力の比較を行う．実験に用いるパラメータは，同期周期を 200，1 プロセスの解探索回数を 32000，プロセス数を 32 とする．

なお，最高温度，最低温度については次のように決定する．

- 最高温度：最大の改悪となる遷移が 50% の確率で受理されるような温度
- 最低温度：最小の改悪となる遷移が同期周期内で 1 回は受理されるような温度

5.2 実験結果と評価

まず PSA/AT と TPSA の温度スケジュールを検証する．Fig. 5 に，PSA/AT と TPSA を ft10 に適用した時の温度スケジュールを示す．

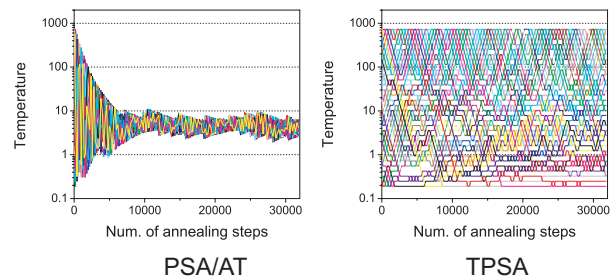


Fig. 5 ft10 における温度スケジュール

図の横軸は解探索回数、縦軸は温度であり、全てのプロセスの解が推移した温度スケジュールを示している。この図では、32 プロセスの温度変化を全て示しているため、図が複雑になっている。そこで、Fig. 5 の ft10 の結果から、最終的に最も良い解が得られたプロセスの温度変化だけを取り出すと Fig. 6 のようになる。

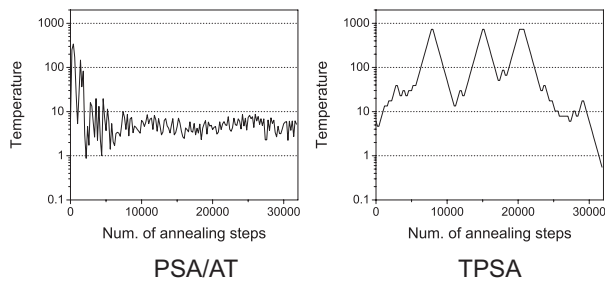


Fig. 6 ft10 における最良解の温度スケジュール

これらの図から、PSA/AT では解探索が進むとともに、温度が特定の温度領域に収束することが分かる。Table 1 に示す重要温度領域と Fig. 6 を比較すると、PSA/AT の収束する温度と重要温度領域がほぼ一致していることが分かる。

次に、Fig. 7 に各手法での 30 回試行の平均値 f_{ave} と最適解 f_{opt} との誤差率 $(f_{ave}/f_{opt} - 1) \cdot 100$ を示す。図の横軸は対象問題を示し、縦軸は誤差率 (%) を示している。

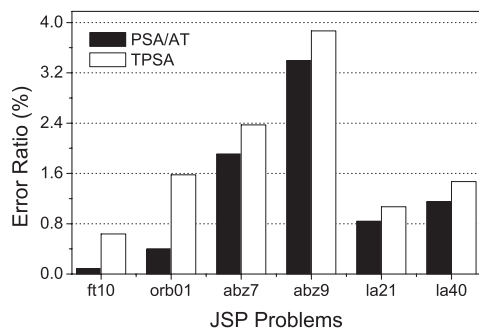


Fig. 7 誤差率の比較

この図から、全ての問題において PSA/AT は TPSA より良好な解を得ており、提案手法の高い解探索能力が分かる。このことは、PSA/AT の持つ適応的温度調節機能によって、ほぼ全ての解が重要温度領域で探索を行うことにより、解品質の良好な範囲で解推移が継続するためであると考察される。

6 結論

本論文では SA における重要温度領域の存在をジョブショップスケジューリング問題 (JSP) において確認し、そ

の値や範囲は各問題に依存することが分かった。そこで、並列 SA の各プロセスの温度を適応的に決定する手法、Parallel SA with an Adaptive Temperature (PSA/AT) を提案した。提案手法では、重要温度指数に基づいて温度範囲を調節することで、解探索に最適な温度スケジュールが自動的に決定される。

この PSA/AT と TPSA を JSP を用いて性能比較を行った結果、PSA/AT が TPSA よりも高い解探索能力を示すことが分かった。このことは、PSA/AT の重要温度領域に収束する温度スケジュールが TPSA の温度スケジュールよりも探索に効果的であることを示している。

参考文献

- 1) Kirkpatrick, S., Gelett Jr. C. D., Vecchi, M. P. Optimization by Simulated Annealing. Science. 1983
- 2) Aarts, E. and Korst, J. Simulated Annealing and Boltzmann Machines. John Wiley & Sons. 1989.
- 3) Daniel R. Greening. Parallel Simulated Annealing Techniques. Physica D. 1990.
- 4) David T. Connolly. An improved annealing scheme for the QAP. European Journal of Operational Research. 1990.
- 5) Mark Fielding. Simulated Annealing with an Optimal Fixed Temperature. SIAM J. . 2000.
- 6) L. Ingber. Very Fast Simulated Re-Annealing. Mathematical and Computer Modelling. 1989.
- 7) 小西健三, 瀧 和男, 木村宏一. 温度並列シミュレートッドアニーリング法とその評価. 情報処理学会論文誌. 1995.
- 8) 小西健三, 屋敷正史, 瀧 和男. 温度並列シミュレートッドアニーリング法の巡回セールスマン問題への適用と実験的解析. 電子情報通信学会論文誌. 1997.
- 9) 山田武士, Bruce E. Rosen, 中野良平. クリティカルブロックシミュレートッドアニーリング法によるジョブショップスケジューリング問題の解法. 電気学会論文誌. 1994.
- 10) B. Giffler and G. L. Thompson. Algorithms for solving production scheduling problems. Operations Research. 1960.