

シミュレーテッド・アニーリングにおける初期温度の新チューニング法

足利工業大学
01604170 足利工業大学白井 裕 Yutaka SHIRAI
松本 直文 Naofumi MATSUMOTO

1. はじめに

シミュレーテッド・アニーリング(Simulated Annealing: SA)は、ブロック・レイアウト問題などの組合せ最適化問題に対し、有効性が指摘されている[1-4]。従来のSAでは、問題毎に初期温度のチューニングが必要であった。ブロック間のフローや部品のサイズによらず、初期温度をほぼ同等のオーダにできれば、パラメータ・チューニングの労力が大幅に低減できる。

本稿では、目的関数値の正規化を行い、予備的試行なしに、フローやブロックサイズといった入力データのみから、初期温度を概略的に設定する方法を提案する。その妥当性を、ブロックレイアウト問題の数値実験により明らかにする。

2. ブロックレイアウト問題の定式化(2)

ブロック・レイアウト問題は、生産工程等の設備や部門をサイズの異なる矩形ブロックとみなし、各ブロック間に近接性もしくはフローの要求が与えられたときに、ブロック間に重なりがなく、かつ近接性もしくはフローを重みとした重み付き距離の総和を最小とする配置を求める問題であり、

$$\min. f = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_{ij} d_{ij} \quad (i \neq j) \quad (1)$$

s.t. ブロック間に重なりがない。

と定式化できる。ここで、 n はブロック数、 c_{ij} はブロック*i*から*j*へのフロー、 d_{ij} はブロック*i*と*j*の重心間のユークリッド距離とする。

3. SAによる解法

3.1 問題に特有のヒューリスティック

(1) コーディング法 本研究では、解候補の表現(コーディング)法として、2次元の配置順序を記述する方法ではなく、ブロックの中心座標と向きリストで記述する方法を採り、解候補を次のように表現する[2]。

$\{(x_1, y_1, h_1, v_1)(x_2, y_2, h_2, v_2) \cdots (x_n, y_n, h_n, v_n)\}$
ここで、 x_i, y_i はブロック*i*の重心の*x, y*座標、 h_i, v_i はブロック*i*の横、縦の長さである。これにより、座標が連続量となり、デッドスペースが低減できる。一方、ブロック間の重なりと隙間の除去の過程が必要となる。

(2) 重なり除去過程 適当に順序付けられたリストより一対のブロックを取り出し、重なり判定と判定後のブロック移動を行う。ブロックの移動は、一対のブロックの重なりを除くための最小移動距離の方向をとる。

(3) 隙間除去過程 配置ブロック群の中心を求め、*x, y*方向の順に中心に向けて各ブロックを移

動し、隙間を除去する。

(4) ミラー交換 ブロックの配置空間上に、任意の長方形領域を決め、その領域の中心に関する点対称の位置に、領域内のブロックを移動する。

3.2 SAアルゴリズム[2]

一般のSAでは、コントロール・パラメータ(温度)を微小ステップずつ低下させ、各ステップで有限回*L*のマルコフチェーンを作成する。これは、無限マルコフチェーンに対する近似になっている。これにより、準平衡が成立つと仮定する。

この場合、冷却パラメータ*r*と内部ループ回数*L*のパラメータが必要になる。一方、本解法は、 $L=1$ としたケースに相当し、パラメータを一つ減らすことができる。 $L=100, r=0.9$ とした場合は、段階的に温度が低下するのに対し、 $L=1, r=0.999$ とした場合は、漸近的に上記の場合と同じ度合いで、滑らかに温度低下する。他のパラメータを同一にして、両者の比較実験を行った結果は、両者ほとんど差のないことがわかった。従って、本解法でも、準平衡の仮定は成立つと考える。ここでは、 $L=1$ に相当する、以下のアルゴリズムを採用する。

[step 0] 初期温度 t_0 、終了温度 t_f 、冷却パラメータ*r*、perturbの確率*p_r*を設定する。

[step 1] ランダムな初期配置の生成(重なり隙間除去)。これを*x*とし、目的関数値を求める。 $t=t_0$ とする。

[step 2] 温度*t*が終了温度ならば、そのときの配置と目的関数値を出力して終了。

[step 3] *x*に摂動(perturb)を与える。

[step 4] 重なり除去：

[step 5] 隙間除去：

[step 6] 新しい配置*x'*の評価関数値を求め、これと*x*の目的関数値の差 Δf を計算する。

[step 7] 一様乱数 $r(0 \leq r \leq 1)$ を発生させ、

$\exp(-\Delta f/t) > r$ ならば、 $x=x'$ とする。

[step 8] $t=r \cdot t$ とし、step 2へ。

Step 3の解の摂動について、最良の摂動は、摂動毎に1/2の確率で一対ブロック交換またはミラー交換を施し、さらに突然変異的に(確率*P_r*で)90度回転を行うものであった[2]。

これまでの実験[2]より、*P_r*は0.01とした。また解の最適性と計算時間の両面から見て、冷却パラメータは、0.999に設定する。

4. 従来の初期温度(t_0)の設定法

4.1 Aartsらの方法(5)

初期段階における解の変更率を χ_0 とし、また

m_1 : コスト低下のPerturb回数、

m_2 : コスト増加のPerturb回数とする。

Δf に、予備実験におけるコスト増($\Delta f > 0$)のケースの平均値を用いて、初期温度は、

$$t_0 = \Delta f_{mean}^{(+)} \left[\ln \left(\frac{m_2}{m_2 \chi_0 - (1 - \chi_0) m_1} \right) \right]^{-1} \quad (2)$$

により求める。この方法では、問題毎にM回(例えば、M=100)のランダムな摂動を行う。

4.2 Connollyの方法(6)

この方法では、初期温度(t_0)と終了温度(t_f)を求めるため、M/100回の予備実験を行い、解が増加するケースのうちより Δf_{min} と Δf_{max} を求めておき

$$t_0 = \Delta f_{min} + (\Delta f_{max} - \Delta f_{min}) / 10 \quad (3)$$

$$t_f = \Delta f_{max} \quad (4)$$

ただし、 $M = 50n(n-1)/2$ (5)

5. 初期温度の新しい設定法

式(1)の目的関数を次のように正規化する。

$$\bar{f} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_{ij} d_{ij}}{n(n-1)C_{mean} d_{mean}} \quad (6)$$

ここで、

$$C_{mean} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_{ij}}{n(n-1)} \quad d_{mean} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n h v_i}}{2}$$

この目的は、初期温度を与えられた c_{ij} や部品のサイズに依らず、同等のオーダにすることである。

この正規化した目的関数をSAアルゴリズムで使用すると、Step 7の改悪許容確率の式 $\exp(-\Delta f/t) > r$ から、温度 t も正規化される。これにより、初期温度 t_0 のオーダは、問題に依存せずほぼ一定になり、初期温度は、予備的試行を行うことなく、概略的に決定できるものと考えられる。

6. 数値実験の結果と考察

本研究では、ブロック数10と27の問題について、正規化した目的関数を用いて、従来の初期温度の設定法によって t_0 を算出する。さらに、初期温度が解に与える影響を調べ、従来の t_0 が最良の値かどうかを検討する。最良の t_0 が、問題によらず、ほぼ同じ値に設定できるかをみる。ここで、冷却パラメータは0.999、回転確率は0.01とし、試行はそれぞれの初期温度の設定で、初期配置をランダムに換えて10回ずつ繰り返した。実験は、C言語を使用して、PC(CPU:486DX4,100MHz)上で行った。

各問題毎に各方法による初期温度を比較して表1に示す。この表より、正規化しない f を用いると、設定 t_0 のオーダは問題毎に異なる。また、 t_0 が f に与える影響を調べると(図1参照)、低い t_0 と高い t_0 の間に適切な t_0 が存在することがわかる。各問題の初期温度は、解のバラツキを考慮して、3000程度が最適であった。13の問題については、表1では、30000程度であるが、実験の結果、これより低い値に設定したときに良い f の値を得た。

図1には、正規化した f に与える初期温度の影響を問題10について示す。図中のAは、M=100としてAartsの方法により算出した t_0 、B₁はM=100、B₂は(5)

表1 初期温度の設定例

problem size n	Aarts's method ($\chi_0=0.6$)	Connolly's method	
10	490	469	366
13	30600	35830	26707
27	861	730	991
M	100	100	eq.(5)

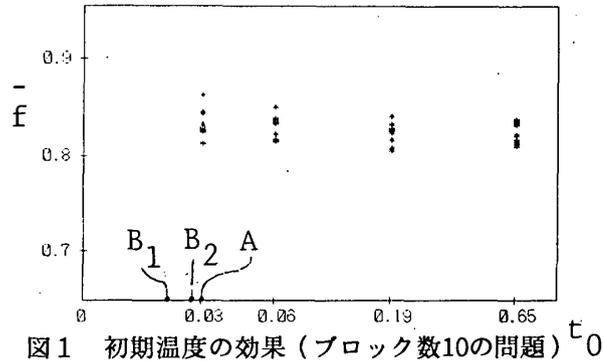


図1 初期温度の効果(ブロック数10の問題) t_0

式のMを用いたConnollyの方法による t_0 を示す。正規化した f によれば、問題に依存せず、初期温度を0.1程度に設定したときに、最良解を得ることが分かった。従来の2方法では、初期温度は10,27の問題では0.1よりかなり低めに、13の問題では高めに設定される。これより、従来の初期温度の設定法は、必ずしも最適なチューニングを与えない。

7. むすび

本稿で提案した、新しい初期温度の設定法では、目的関数値を正規化することにより、問題によらず0.1程度の値を初期温度として設定することが、推奨される。これにより、初期温度を設定するための予備実験が不要となり、パラメータチューニングの手間が大幅に軽減できる。

参考文献

- (1) 茨木：組合せ最適化法をめぐる最近の話題，日本OR学会，第30回シンポジウム資料，(1994)，pp.1-10.
- (2) 白井，松本：日本経営工学会H7秋季大会予稿集，1995，pp..
- (3) Shahookar, K. and Mazumder, P.: VLSI Cell Placement Techniques, ACM Computing Surveys, Vol. 23, No.2, 1991.
- (4) Zegordi, S.H. et al.: Simulated annealing scheme incorporating move desirability table for solution of facility layout problems, J. of OR SJ, Vol.38, No.1, 1995, pp.1-20.
- (5) Aarts, E. and Korst, J.: Simulated Annealing and Boltzmann Machines, 1990, 57-75, John Wiley.
- (6) Connolly, D.T.: An improved annealing scheme for the QAP, Euro. J. of OR, Vol.46, '90, pp.93.