Kemal H. Sahin, Amy R. Ciric:
A dual temperature simulated annealing approach for solving bilevel programming problems,
Computers and Chemical Engineering,
Vol. 23, pp. 11-25,1998.

第12回論文ゼミ　　2013/07/12(金)
#4　　M1 今泉孝章

2段階計画問題とは

2段階計画問題（BLPP: Bilevel Programming Problems）

最適化問題の制約条件に別の最適化問題が含まれている問題

例）

上位問題（main problem, outer problem など）

$$\max_{x} \quad x + 3y_1 - 2y_2 \qquad \text{制約条件} \qquad 0 \le x \le 8$$

下位問題（sub problem, inner problem など）

$$\max_{y_1, y_2} \quad y_1 \qquad \text{制約条件} \qquad \begin{aligned} 2x - y_1 - 4y_2 &\ge -16 \\ -8x - 3y_1 + 2y_2 &\ge -48 \\ 2x - y_1 + 3y_2 &\ge 12 \\ 0 \le y_1 &\le 4 \end{aligned}$$

2段階計画問題とは

2段階計画問題（BLPP: Bilevel Programming Problems）

最適化問題の制約条件に別の最適化問題が含まれている問題

一般化

上位問題（main problem, outer problem など）

$$\max_{x} \; F(x, y) \qquad \text{制約条件} \qquad \begin{aligned} G(x, y) &\le 0 \quad \text{不等式制約} \\ H(x, y) &= 0 \quad \text{等式制約} \end{aligned}$$

下位問題（sub problem, inner problem など）

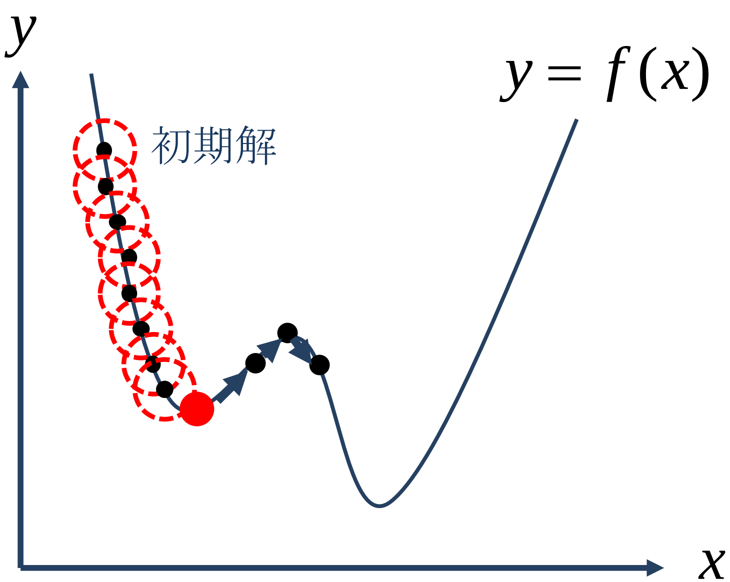
$$\max_{y} \; f(x, y) \qquad \text{制約条件} \qquad \begin{aligned} g(x, y) &\le 0 \quad \text{不等式制約} \\ h(x, y) &= 0 \quad \text{等式制約} \end{aligned}$$

NP hardの問題で現在までに様々なアプローチがなされてきたが離散、非線形
非凸な問題を扱えないなど手法ごとに扱える問題の種類に制限があった
→あらゆる種類の問題の**近似解**を得るための手法を提案

Simulated Annealing

●模擬焼きなまし法 (Simulated Annealing Method)

ランダム性を用いて局所最適解からの脱出を試みる手法



局所最適解から抜け出すために
確率的に解の改悪を許す

x： 現在の解

y： x の近傍 $y \in N(x)$

$\Delta = f(y) - f(x)$

T: 温度パラメータ

$\Delta < 0$

$\rightarrow$ 確率 $\boxed{\exp(-\Delta/T)}$ で改悪を許す

Simulated Annealing

$x_1 :=$ 適当な実行可能解
$for\ \ k=1\ to\ \infty\ do$
　y を $N(x_k)$ からランダムに選択
　確率 $\exp\{-[f(y)-f(x_k)]^+/T_k\}$ で $x_{k+1} := y$（y を受理）
　それ以外のときは $x_{k+1} := x_k$（yを棄却）

BLPPは制約条件が厳しい
→適当な実行可能解や近傍 $N(x_k)$ を選択するのが難しい
↓
制約条件を満たす集合をあらかじめ生成しておく

Dual Temperature Simulated Annealing

集合の定義

$$\theta(x) = \{y : y \in Y, g(x,y), h(x,y) = 0\}$$

下位問題の変数 $\boxed{y}$ についての実行可能領域

例） $\theta(1) \rightarrow 1 \le y \le 4$

$$\Phi(x) = \{y : y \in \theta(x), f(x,y) \le f(x,y^*) \forall y^* \in \theta(x)\}$$

下位問題の任意の x についての解の集合→下位問題の解の候補

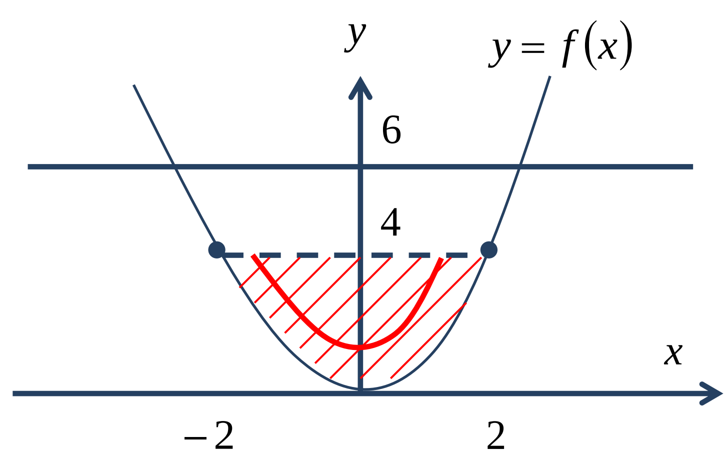
$-2 \le x \le 2$

$0 \le y \le 6$

$y \ge f(x)$

例） $\Phi(1) \rightarrow 1$

$\Phi(x) \rightarrow y = f(x)\ (-2 \le x \le 2)$



$$\Phi'(x, T_{in})$$

$\Phi(x)$ をパラメータ T_{in} を使って緩和した集合

Dual Temperature Simulated Annealing

集合の定義

$$\Gamma = \{(x, y):\ G(x, y), H(x, y) = 0\}$$

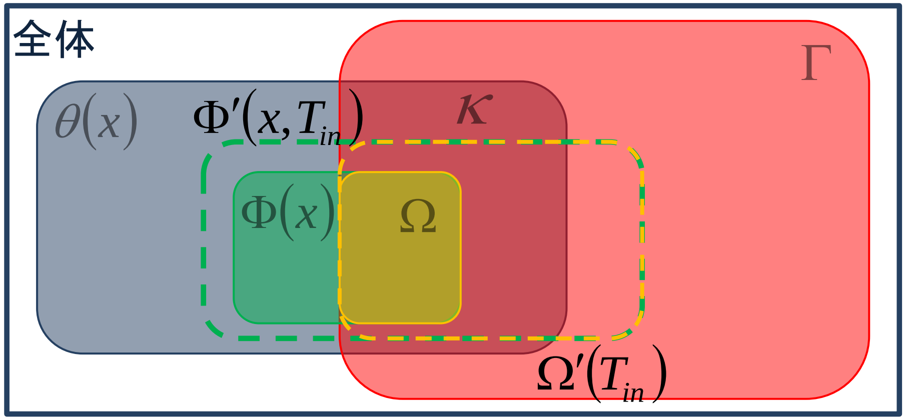
上位問題の実行可能領域

$$\kappa = \Gamma \cap \theta$$

上位問題と下位問題の両方共通の実行可能領域→BLPP全体の実行可能領域

$$\Omega = \Gamma \cap \Phi(x) \qquad \Omega'(T_{in}) = \Gamma \cap \Phi'(x, T_{in})$$

BLPP全体の解実行可能解 (上位、下位問題の両方の制約を満たす解)の領域



$\theta(x)$、Γ を次々とつくりだし探索を行う

→近傍を実行制約範囲内につくりだして
解の検証を行う

Dual Temperature Simulated Annealing

初期実行可能解の生成($\in \kappa$)

$$\min \quad \sum \left(\underline{r_i + s_j + t_j + u_k + \upsilon_m + w_m} \right)$$

制約条件に対応するスラック変数

制約条件

$$G_i(x,y) \le r_i$$

$$H_j(x,y) + s_j - t_j = 0$$

$$g_k(x,y) \le u_k$$

$$h_m(x,y) + \upsilon_m - w_m = 0$$

$$r_i, s_j, t_j, u_k, \upsilon_m, w_m \ge 0$$

この問題の解が

$$r_i = s_j = t_j = u_k = \upsilon_m = w_m = 0$$

のとき元の制約条件と同じ→実行可能解が存在
それ以外のとき →実行可能解はない

※結局適当な初期値を与えてそれが
実行可能解かどうか確かめている?

Dual Temperature Simulated Annealing

$\theta(x)$ と Γ の要素の生成(実行可能解の生成)

$y = \underline{y_I} + \underline{y_D}$ と分解して考える

y_I : 独立変数 $y_I' = \underline{y_I^0} + \underline{ar}$

y_I^0 : 現在の独立変数

a : 初期値1のスカラー変数

r : -1 から1の値をとるランダム変数

y_D : 従属変数: 等式制約 $h(x, y') = h(x, y_I', y_D') = 0$ を解くことで得る

※このとき x はどうしているのか?具体的に与えているのか?

If $g(x, y) = g(x, y'\{y_I', y_D'\}) \leq 0$ が満たされている→ y' を $\theta(x)$ に入れる

else a を1/2する. 5回 a を更新したら r をランダムに生成し同じ試行を繰り返す

Γ における x' も同じ手順で生成する

Dual Temperature Simulated Annealing

$\Phi'(x, T_{in})$の要素の生成(下位問題の解の生成)

$\theta(x)$ 中の要素 y' を用いる.

if $f(x, y') \leq f(x, y)$

or $f(x, y') \geq f(x, y)$ and $\left[f(x, y') - f(x, y)\right]/T_{in} \leq \zeta$

→マルコフ連鎖に追加する(解を受理する)

ξ : 0から1の値をとる乱数

※このとき x はどうしているのか?具体的に与えているのか?

Dual Temperature Simulated Annealing

$\Omega'(T_{in})$の要素の生成（BLPPの解の生成）

Γ 中の要素 x' を用いる

$\Phi'(x, T_{in})$ 中の要素 y' と x' を合わせると $\Omega'(T_{in})$

各 x' について長さ M のマルコフ連鎖の要素 y' を用いて

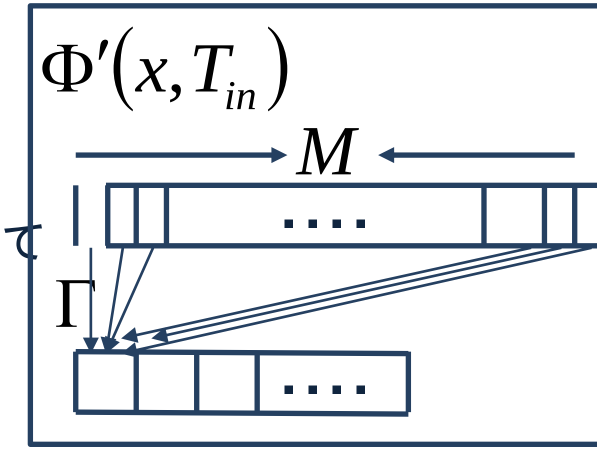
$f(x', y')$ を計算し最小値をとる y' を y^* とし、

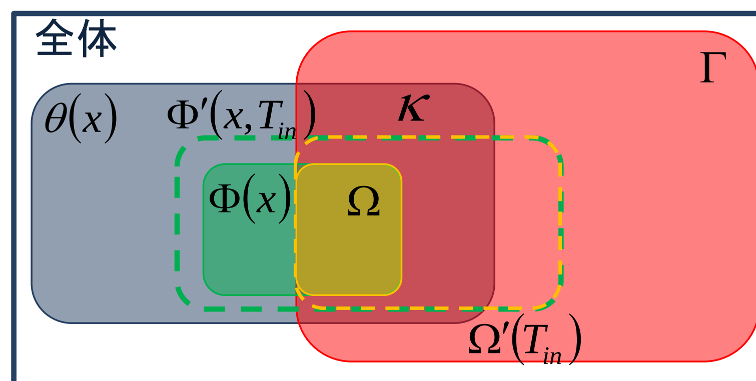
if $F(x', y^*) \leq F(x, y)$

or $F(x', y^*) \geq F(x, y)$ and $\left[F(x', y^*) - F(x, y)\right] / T_{out} \leq \zeta$

→マルコフ連鎖に追加する(解を受理する)

ここでもし受理された解が κ に含まれていなければ a を2倍し、5回 a を更新したら r をランダムに発生させ同じ試行を繰り返す

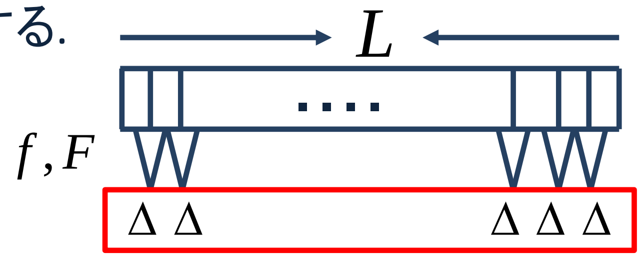




Dual Temperature Simulated Annealing

初期温度 T_{in} と T_{out} の生成

$\theta(x)$ 、 $\Omega'(T_{in})$ について長さ L のマルコフ連鎖を生成し連続する2点の関数の差の最大値を $\Delta_{\max}$ とする.



受理確率が95%程度になるように初期解を設定する $T = \ln(0.95) * \Delta_{\max}$

得られた初期解によって下位問題1回につき何回上位問題を解くのか決定する

$$K = \max\left(2, \log\left(T_{out}/T_{new}\right)\right)$$

下位問題一回につき $K-1$ 回上位問題を解く(上位問題→下位問題).

T_{out}/T_{new} が大きければ下位問題が局所最適解のところで停滞するのを.避けることができる

Dual Temperature Simulated Annealing

冷却スケジュールと終了判定

上位下位のそれぞれの最適化において L のマルコフ連鎖がつくられたら温度を更新

$$T^{new} = T^{old}\left(1 + \frac{\ln(1+\delta)T^{old}}{3\sigma}\right)^{-1}$$

δ : パラメータ

σ : マルコフ連鎖における目的関数の標準偏差

終了判定

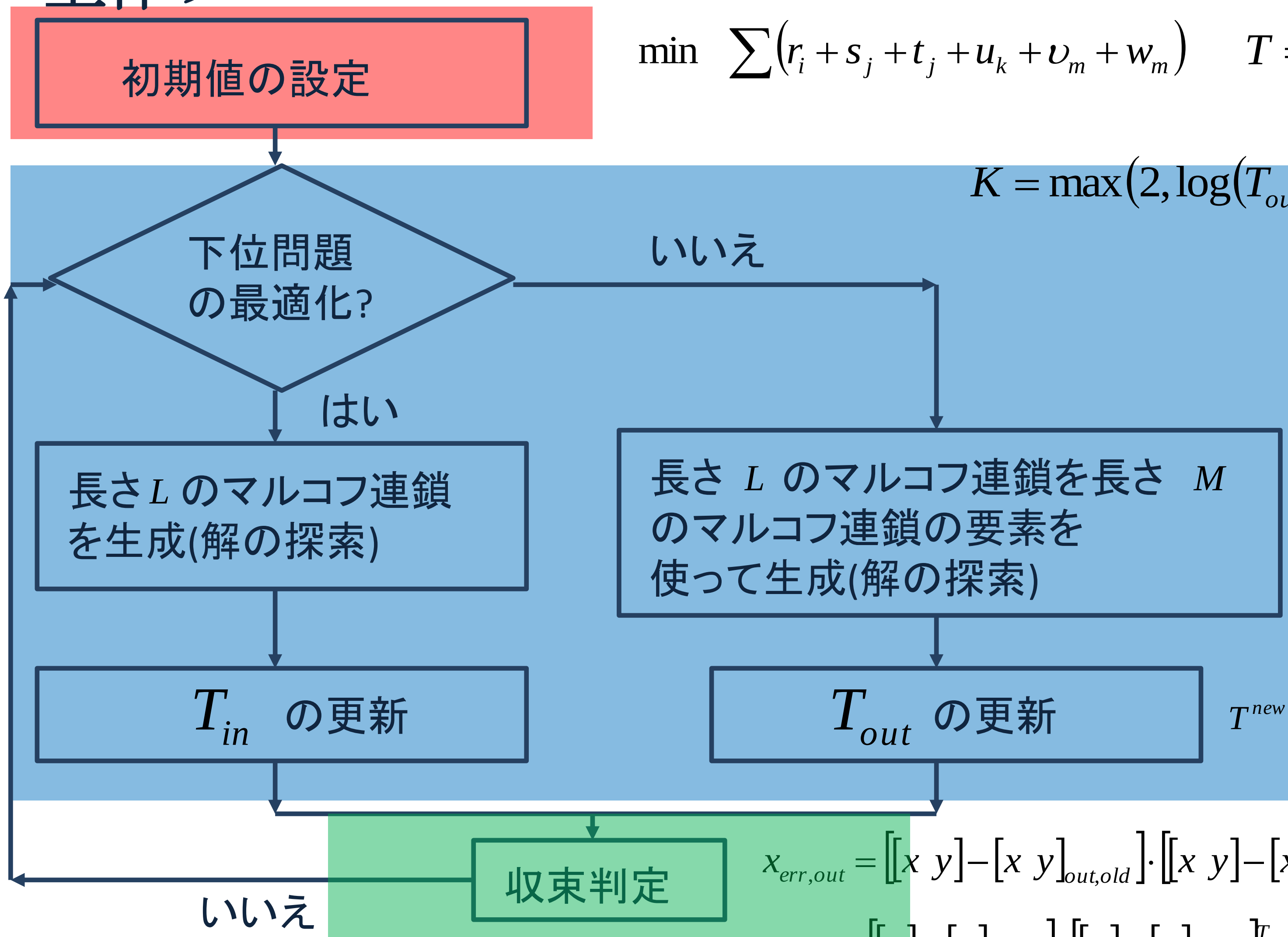
上位下位それぞれにおいて得られた解と前の解のユークリッドノルムが ε より小さくなる

$$x_{err,out} = \left[[x\ y] - [x\ y]_{out,old}\right] \cdot \left[[x\ y] - [x\ y]_{out,old}\right]^T$$

$$x_{err,in} = \left[[y] - [y]_{in,old}\right] \cdot \left[[y] - [y]_{in,old}\right]^T$$

Dual Temperature Simulated Annealing

全体フロー



初期化

$$\min \quad \sum \left(r_i + s_j + t_j + u_k + \upsilon_m + w_m\right) \qquad T = \ln(0.9) * \Delta_{\max}$$

最適化

$$K = \max\left(2, \log\left(T_{out} / T_{new}\right)\right)$$

$$T^{new} = T^{old}\left(1 + \frac{\ln(1+\delta)T^{old}}{3\sigma}\right)^{-1}$$

収束判定

$$x_{err,out} = \left[[x \ y] - [x \ y]_{out,old}\right] \cdot \left[[x \ y] - [x \ y]_{out,old}\right]^T$$

$$x_{err,in} = \left[[y] - [y]_{in,old}\right] \cdot \left[[y] - [y]_{in,old}\right]^T$$

Dual Temperature Simulated Annealing

初期化フェイズアルゴリズム

ステップ1: スタートポイント生成

$\min \sum \left(r_i + s_j + t_j + u_k + \upsilon_m + w_m\right)$ からスタートポイント (x, y) を生成

ステップ2: 温度の初期化

(a)パラメータ ε、δ を決定し $count = 1$

(b) $For \quad i = 1 \ldots L \quad do\ the \quad following$

(i) delmax $= -\infty$

(ii) $\theta(x)$ 生成手順により (x_t, y_t) を生成

(iii) $f_i = f(x_t, y_t)$

(iv) delmax$= \max($ delmax, $f_i - f(x, y))$

(c) $T_{in} = \ln(0.95) \cdot$ delmax

(d) (x, y) を最適化ステップの初期値として保持

$\rightarrow (x, y)$ を $(x_{out,old}, y_{out,old})$ 、$(x_{in,old}, y_{in,old})$ とする

※(x, y) は初期値?最後の?上位問題にも同じのを与えていいのか?

(e) $For \quad i = 1 \ldots L \quad do\ the \quad following$

(i) delmax $= -\infty$

(ii) $\Omega'(T_{in})$ 生成手順により (x_t, y_t) を生成

(iii) $F_i = F(x_t, y_t)$

(iv) delmax $= \max($ delmax $, F_i - F(x, y))$

(f) $T_{out} = \ln(0.95) \cdot$ delmax

(g) $K = \max\left(2, \log\left(T_{out} / T_{in}\right)\right)$

Dual Temperature Simulated Annealing

最適化フェイズアルゴリズム

ステップ3: 温度Tでの最適化

(a) $if\ \ (count\ \bmod K) \neq 0$ (b)へ $else$ (c)へ

(b)上位問題最適化

(ⅰ) $For\ \ i = 1 \ldots L\ \ do\ the\ \ following$

(A) $\Omega'(T_{in})$ 生成手順により (x_t, y_t) を生成

(B) $If\ \ F_i \leq F(x, y)\ or$

$ran\# > (F_i - F(x, y)/T)$

$\rightarrow (x, y) = (x_t, y_{t, in, opt})$ とし

$F_i = F(x_t, y_{t, in, opt})$

受理されなければ $F_i = 0$

(ⅱ)0でないF_i の分散 σ_{out}^2 を求める

(ⅲ) $T_{out}^{new} = T_{out}^{old}\left(1 + \dfrac{\ln(1+\delta)T^{old}}{3\sigma}\right)^{-1}$ を計算する

(ⅳ) $count = count + 1$

(b)下位問題最適化

(ⅰ) $For\ \ i = 1 \ldots L\ \ do\ the\ \ following$

(A) $\theta(x)$ 生成手順により (x_t, y_t) を生成

(B) $If\ \ f_i \leq f(x, y)\ or$

$ran\# > (f_i - f(x, y)/T)$

$\rightarrow (x, y) = (x_t, y_{t, in, opt})$ とし

$f_i = f(x_t, y_{t, in, opt})$

受理されなければ $f_i = 0$

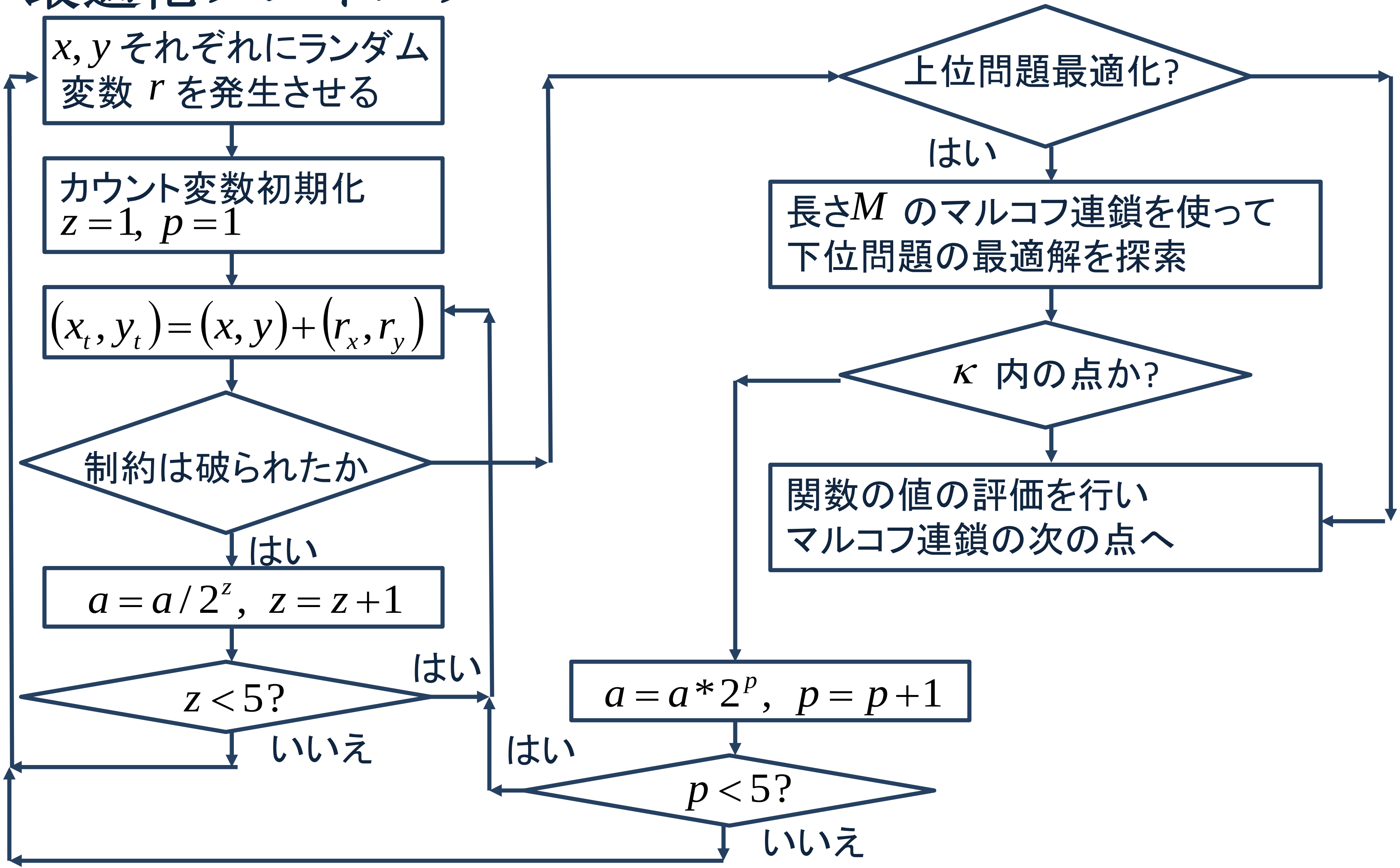
(ⅱ)0でない f_i の分散 σ_{in}^2 を求める

(ⅲ) $T_{in}^{new} = T_{in}^{old}\left(1 + \dfrac{\ln(1+\delta)T^{old}}{3\sigma_{in}}\right)^{-1}$ を計算する

(ⅳ) $count = count + 1$

Dual Temperature Simulated Annealing

最適化フェイズフロー



Dual Temperature Simulated Annealing

収束判定フェイズアルゴリズム

ステップ4: 収束判定

(a) $if\ \left(\underline{(count-1)}\ \mathrm{mod}\ K\right)\neq 0$ (b)へ $else$ (c)へ

(b) 上位問題

（ i ） $x_{err,out}=\left[[x\ y]-[x\ y]_{out,old}\right]\cdot\left[[x\ y]-[x\ y]_{out,old}\right]^{T}$ とする

（ ii ） $\left(x,y_{out,old}\right)=(x,y)$ (最新の最良解に更新)

（ iii ） $If\quad x_{err,out}\leq\varepsilon$

$\rightarrow outcheck=true,\quad incheck=false,\quad \underline{minin=f(x,y)}$

(c) 下位問題

（ i ） $x_{err,in}=\left[[y]-[y]_{in,old}\right]\cdot\left[[y]-[y]_{in,old}\right]^{T}$

（ ii ） $\left(x,y_{,in,old}\right)=(x,y)$ (最新の最良解に更新)

（ iii ） $If\quad x_{err,in}\leq\varepsilon\quad or\quad f(x,y)=minin$

$\rightarrow incheck=true$

(下位問題の値が十分小さくなるか上位問題における下位問題最適化の結果と一致すれば)

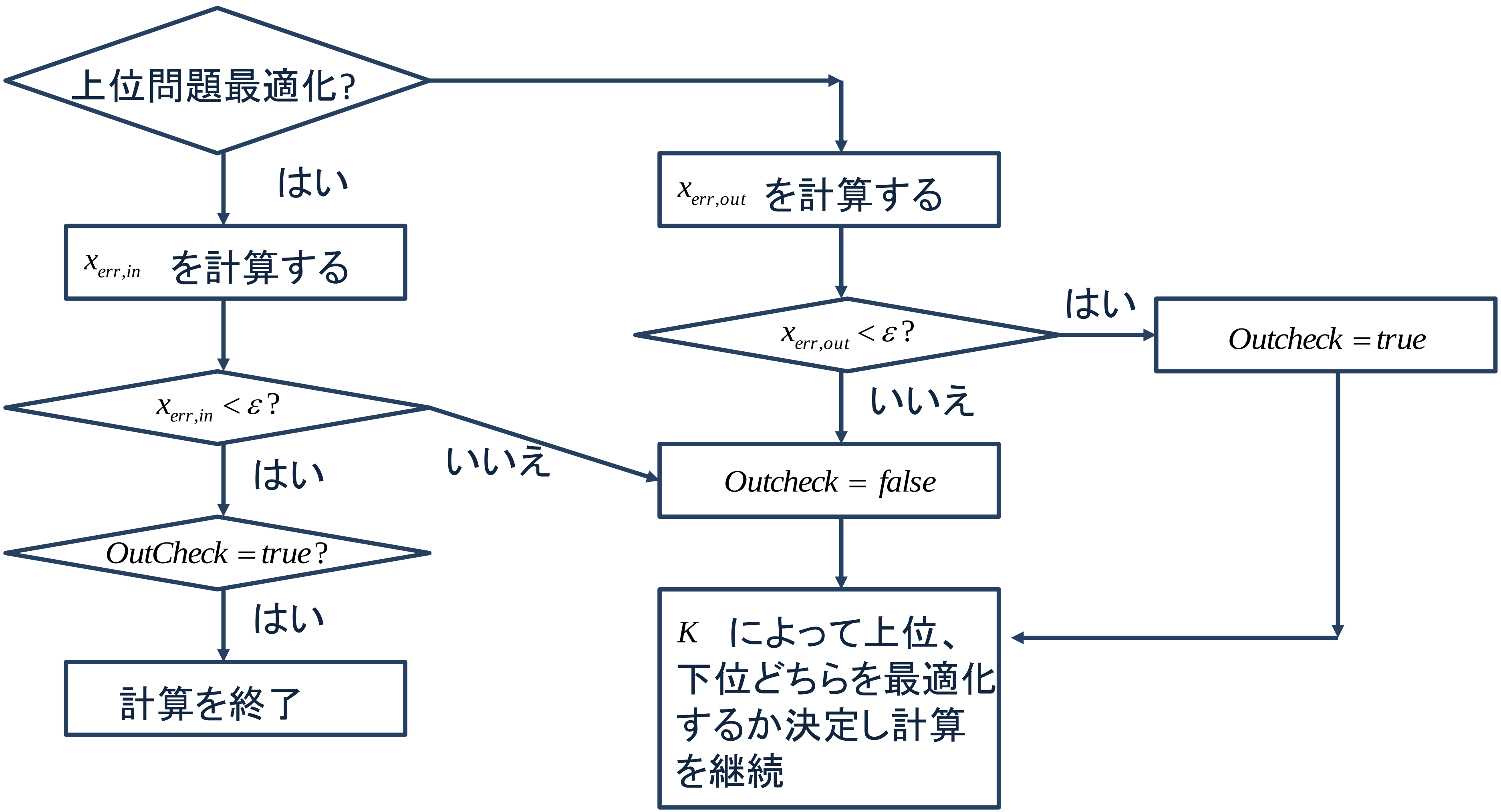
(d) $If\quad checkin=true\quad and\quad outcheck=true$

→終了

$else\quad optcheck=false$ →ステップ3へ

Dual Temperature Simulated Annealing

収束判定フェイズフロー



Dual Temperature Simulated Annealing

イメージ

上位問題

下位問題の最適解である可能性のある点についてSAを行っている

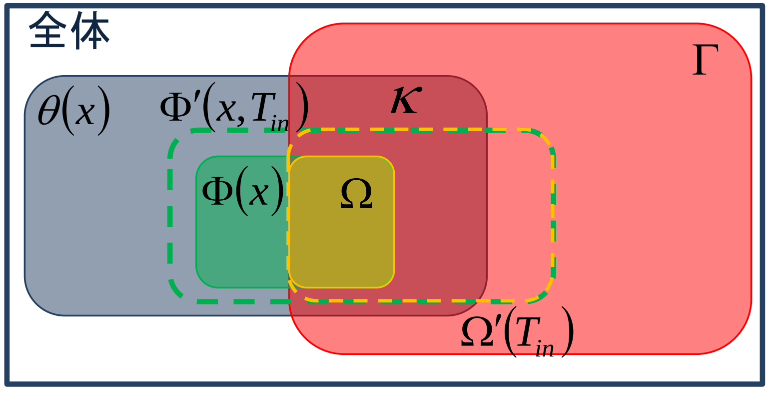
$$\Phi'(x, T_{in})$$

下位問題

下位問題の実行可能領域の点についてSAを行っている

$$\theta(x)$$

十分な回数探索を行えば<u>上位問題における</u>下位問題の解と下位問題の解が近づいていき近似解に辿りつく



DTSAの検証

上位問題 $\max_{x} \left(-\frac{2}{5}x_1^2 x_2 + 4x_2^2\right)(y_1)(y_2) + \left(-x_2^3 + 3x_1^2 x_2\right)(1-y_1)y_2 + \left(2x_2^2 - x_1\right)(1-y_2)$

制約条件 $0 \le x_1 \le 10 \quad 0 \le x_2 \le 10$

下位問題 $\left(x_1^2 x_2^3 + 8x_2^3 - 14x_1^2 - 5x_1\right)y_1 y_2 + \left(-x_1 x_2^2 + 5x_1 x_2 + 4x_2\right)(1-y_1)y_2 + 8x_1 y_1 (1-y_2)$

制約条件 $y_1 + y_2 \ge 1 \quad y_1, y_2 \in \{0,1\}$

初期解	大域解への収束率(%)	平均CPU(s)	大域解への平均距離
(1.0,1.0,1.1)	80	0.75	0.14
(5.0,5.0,5.0)	80	0.75	0.04
(9.0,9.0,1.0)	80	0.89	0.09