分岐特性を用いた組合せ最適化問題の近似解法

京都大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻
土屋和雄，◯ 西山岳宏，辻田勝吉

An Algorithm for a Combinatorial Optimization Problem based on Bifurcation Characteristics

Kazuo Tsuchiya, ◯Takehiro Nishiyama, Katsuyoshi Tsujita
Dept. of Aeronautics and Astronautics, Graduate School of Engineering, Kyoto University

Abstract: This paper deals with an optimization method of a combinatorial optimization problem using a replicator equation. The model proposed shows successive bifurcation according to a performance index; by increasing the control parameter in the equation, solutions with high performance become stable earlier than solutions with low performance. Characteristics of the bifurcation are verified analytically and numerically. And then, we propose an algorithm to obtain sub optimum solutions efficiently based on characteristics of the bifurcation. The performance of the algorithm is verified numerically.

1　はじめに

最適化問題とは，ある決定変数の関数 (評価指標) をいくつかの制約条件のもとで最小化する問題であり，工学における基本的な問題の一つである．最適化問題の中で決定変数が離散値をとるものを組合せ最適化問題と呼ぶ．組合せ最適化問題の解法として，分枝限定法を始めとした陰的数え上げ法にもとづく厳密解法が広く研究されている [1]．一方，シミュレーテッドアニーリング法等，メタヒューリスティクス法と呼ばれる組合せ最適化問題に対する近似解法も広く研究されている [2]．この種の方法の中に人工ニューラルネットワークモデルと呼ばれる解法がある．人工ニューラルネットワークモデルとはその安定平衡解が組合せ最適化問題の近似解となるような力学系を構成し，それをもとに近似解を求めるものである．本研究もこの種のモデルにもとづくものである．本研究では力学系としてレプリケータ方程式を用いる．レプリケータ方程式はその増殖率の中に含まれるパラメータをコントロールパラメータとして逐次分岐を生じさせることができる [3]．ここでは評価指標の値の小さい解から逐次分岐を通して安定化させることにより，組合せ最適化問題の近似解を求める方法を提案する．

以下，組合せ最適化問題の中でも非常に難しいとされる，2 次割当問題 (Quadratic Assignment Problem, QAP) を例として用い，構成した力学系の分岐特性の解析と数値実験による検証を行なう．また，力学系の分岐特性を利用して効率的に準最適解を求めるアルゴリズムを提案し，数値実験によりその有効性を検証する．

2　二次割当問題 (Quadratic Assignment Problem, QAP)

QAP は集合 $\mathcal{N} = \{1, 2, \cdots, N\}$ と，$N \times N$ 行列 $A = (a_{ij}), B = (b_{kl})$ により，次のように表される．

$$\min_{p \in \Pi_{\mathcal{N}}} L \tag{1}$$

$$L = \sum_{i,j} a_{ij} b_{p(i)p(j)} \tag{2}$$

ここで，$\Pi_{\mathcal{N}}$ は $\mathcal{N}$ のすべての順列からなる集合であり，p はその要素を表す．$N \times N$ の置換行列の集合を $\Pi_{N \times N}$ と表し，その要素を X とすれば，QAP は次のようにも表すことができる．

$$\min_{X \in \Pi_{N \times N}} L \tag{3}$$

$$L = \mathrm{trace}(A^T X^T B X) \tag{4}$$

QAP の典型的な例としては次のようなものがある; N 個の施設を N 個の地点に配置することを考える．ここで，a_{ij} は施設 i から施設 j への物の流れを表し，b_{kl} は地点 k から地点 l への距離を表す．施設 i を地点 k に，施設 j を地点 l に配置したときのコストは $a_{ij}b_{kl}$ となる．問題は総コストを最小にするような，すべての施設のすべての地点への配置を求めることである．QAP は巡回セールスマン問題 (TSP) をはじめ，多くの問題を特別な場合として含んでいる．

3　提案する力学系とその分岐特性

3.1　提案する力学系

$N \times N$ の変数を $u_{ij}(i,j=1,\cdots,N)$ とする．変数 u_{ij} を用いて次の力学系を構成する．

$$\begin{aligned}\dot{u}_{ij} &= \Bigg\{(1-u_{ij}^2) - \frac{\alpha_0}{2}\Bigg[\sum_{i'\neq i} u_{i'j}^2 + \sum_{j'\neq j} u_{ij'}^2\Bigg] \\ &\quad -\alpha_1 \sum_{i',j'} (a_{jj'}b_{ii'} + a_{j'j}b_{i'i})u_{i'j'}^2\Bigg\}u_{ij} \qquad (5)\end{aligned}$$

ここで, $\alpha_0 > 0$, $0 \leq \alpha_1 \ll 1$.

力学系 (5) の第 1 項は，力学系を構成する各要素を一様に発火状態 ($u_{ij}^2 = 1$) へと向かわせる．第 2 項は同一の添字 $i(j)$ をもつ要素間の競合効果を表す．第 3 項は次のようにして構成される; QAP の評価指標 L から次のような関数 J を考える．

$$J = \sum_{i,i',j,j'} a_{jj'}b_{ii'}u_{ij}^2 u_{i'j'}^2 \qquad (6)$$

J の u_{ij} に対する勾配

$$\frac{\partial J}{\partial u_{ij}} = 2\sum_{i',j'}(a_{jj'}b_{ii'} + a_{j'j}b_{i'i})u_{i'j'}^2 u_{ij} \qquad (7)$$

から，第 3 項が導かれる．第 3 項は評価指標の大きい解の出現を抑制する効果を表す．

以下，力学系 (5) の分岐特性を解析し，力学系 (5) がパラメータ α_0 をコントロールパラメータとして，評価指標の値の小さいものから逐次分岐を介して安定化することを示す．

3.2　分岐特性

3.2.1　分岐特性 ($\alpha_1 = 0$)

この場合，力学系 (5) は次の 2 つの解をもつ．

$$\begin{cases} \text{(A)}: u_{ij}^2 = u_0^2 \ (i,j=1,\cdots,N) \\ \text{(B)}: u_{ij}^2 = \begin{cases} 1 & (i = p(j)) \\ 0 & (i \neq p(j)) \end{cases} \end{cases} \qquad (8)$$

ここで,

$$u_0^2 = \frac{1}{1+\alpha_0(N-1)} \qquad (9)$$

である．(A) を一様解と呼び，(B) を許容解と呼ぶ．許容解は問題の拘束条件を満たす．

これらの解の安定条件は次のように求められる (付録 I).

$$\begin{cases} \text{(A)}: 0 < \alpha_0 < 1 \\ \text{(B)}: \alpha_0 > 1 \end{cases} \qquad (10)$$

よって，α_0 を増加させると $\alpha_0 = 1$ において，一斉に一様解から許容解へ解の分岐が起こることがわかる．

3.2.2　分岐特性 ($\alpha_1 \neq 0$)

この場合，許容解は次のように与えられる．

$$u_{ij}^2 = \begin{cases} 1 + \Delta u_{ij} & (i = p(j)) \\ 0 & (i \neq p(j)) \end{cases} \qquad (11)$$

$$\Delta u_{ij} = -\alpha_1 \sum_{j'} (a_{jj'}b_{p(j)p(j')} + a_{j'j}b_{p(j')p(j)}) \qquad (12)$$

許容解が安定であるための必要条件は次のように求められる (付録 II).

$$\alpha_0 > 1 + \frac{2\alpha_1}{N-1}(L - \bar{L}) \qquad (13)$$

$$\begin{aligned} L &= \sum_{j,j'} a_{jj'}b_{p(j)p(j')} \qquad (14) \\ \bar{L} &= \frac{1}{2N}\sum_{i,j,j'}(a_{jj'}b_{ip(j')} + a_{j'j}b_{p(j')i}) \qquad (15) \end{aligned}$$

ここで，L は得られた許容解に対応した評価指標の大きさを表す．一方，$\bar{L}$ は得られた許容解の近傍での評価指標の平均に対応する．後の数値実験において得られた様々な解について，$\bar{L}$ の値を計算した結果を図 1 に示す．それによると，$\bar{L}$ の値は L に比べあまり変化せず，ほぼ一定値をとる．よって (13) 式は，許容解が L の小さいものから順に逐次的に分岐し，安定化していくことを示している．

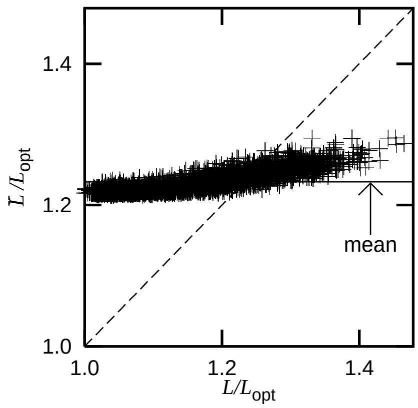

Fig. 1: $L/L_{\rm opt}$-$\bar{L}/L_{\rm opt}$

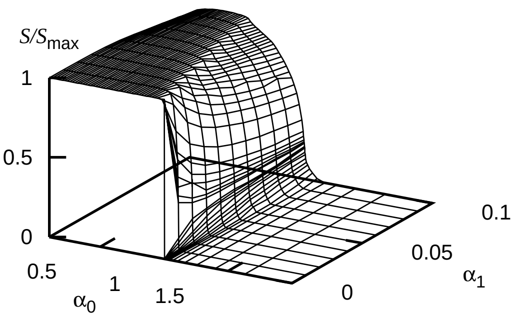

Fig. 2: $S/S_{\rm max}$

3.3 数値実験による検証

計算機による数値実験を行ない，力学系 (5) の持つ分岐特性 (13) を検証する．ここでは，ネットワーク上のQAP のライブラリ QAPLIB の中の，最適値の知られている $N = 20$ の問題 (Nug20) を用いる．計算機は DEC 製 Alpha Station model 500/333 を用いた．

はじめに，パラメータ S(付録 III) を α_0-α_1 平面の各点で計算した結果を図 2,3 に示す．それによると，$\alpha_0 = 1$ の付近でパラメータ S が大きく変化しており，解が一様解から許容解へ遷移していることを示唆している．また，理論的に求めた最適解の安定条件はほぼ $S/S_{\rm max} = 0.5$ の位置に存在している．

また，α_0, α_1 に対する評価指標 L の値を図 4,5 に示す．($L_{\rm opt}$ は L の最適値である．) ここで，図 5 は α_0-α_1 平面上に $L/L_{\rm opt} = 1.05, 1.1, 1.2$ の等高線を引いたもので，いずれもほぼ直線的であり，また，L の小さいものから順にならんでいる．これは力学系 (5) において，評価指標 L の小さい解から順に逐次的に分岐し，$\alpha_0 = 1$ の付近では最適解に十分近い解のみが安定に存在していることを示しており，理論解析の結果 (13) と定性的に一致する．しかし，理論直線 (13) は，数値実験によって得られた直線に対して左に傾いたものとなっている．これは (13) 式が必要条件であることによる．

4 最適化アルゴリズム

前節において，力学系 (5) が評価指標に応じた逐次的な分岐特性 (13) を持つことを，解析，及び数値実験に

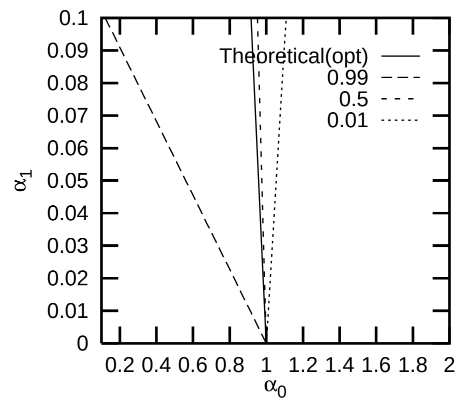

Fig. 3: $S/S_{\rm max}$ on α_0-α_1 plane

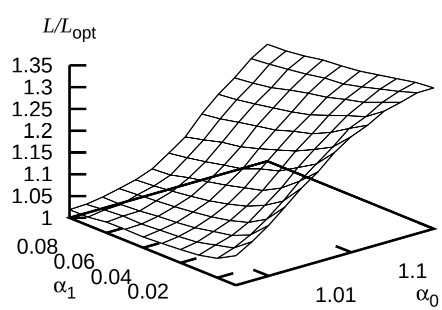

Fig. 4: $L/L_{\rm opt}$

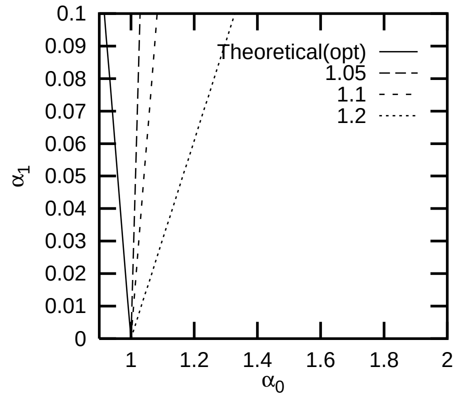

Fig. 5: L/L_{opt} on α_0-α_1 plane

より検証した．これにより，α_0 をコントロールパラメータとし，解が得られる範囲でできるだけ小さく設定することにより，準最適解が得られることになる．しかし，(13) 式は必要条件であり，最適解 (または準最適解) のみが安定に存在する領域にパラメータ α_0 を配置することは困難である．そこで，パラメータ α_0 を変化させることを考える．一様解の状態から出発して，平衡状態を実現しながら α_0 を少しずつ増加させる．解が L の小さいものから逐次的に分岐していることから，α_0 を十分ゆっくり増加させれば，最初に得られる解として良好な準最適解が得られると考えられる．熱力学とのアナロジーから，ここで提案するアルゴリズムをアニーリングアルゴリズムと呼ぶ．

ここでは，α_0 の増分 $\delta\alpha_0$ を一定とし，各パラメータ領域での平衡状態への収束判定には，パラメータ S を用いる．QAPLIB の中から $N = 24$ の問題 (Nug24) を用いて計算を行なう．$\delta\alpha_0$ を変えて計算し，得られた解の評価指標 L の平均値，及び CPU Time を図 6,**??**に示す．ここで，図 6 の各点で上下に伸びた直線はその点での最大値と最小値を表す．$\delta\alpha_0$ を小さくすると L の小さい値が得られるが，あるところからはすべて同じ解に収束していき ($L/L_{\mathrm{opt}} = 1.00057$)，最適解までは得られなかった．これは，このアルゴリズムがランダムな初期値から出発しても，一度，一様解に収束し，その後分岐させることによると考えられる．

最後に QAPLIB の中の問題に対して行なった一連の計算をまとめて表**??**に示す．表**??**は，提案したアルゴリズムが準最適解を得るためのアルゴリズムとして，十分有効なものであるであることを示している．

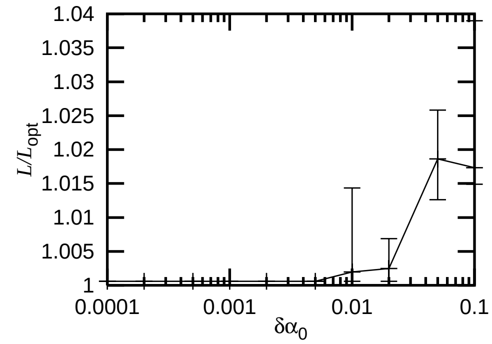

Fig. 6: $\delta\alpha_0$-$L/L_{\mathrm{opt}}(N = 24)$

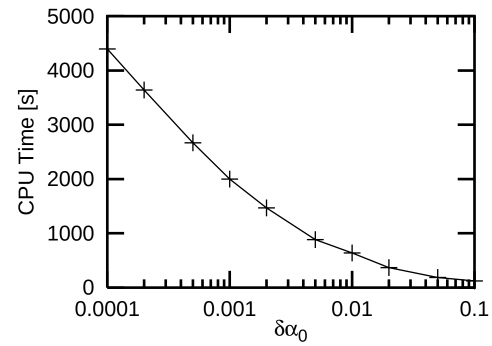

Fig. 7: $\delta\alpha_0$-CPU Time$(N = 24)$

5　まとめ

本研究では，力学系を用いた組合せ最適化問題の近似解法を取り扱った．力学系の分岐現象に着目し，最適化問題の解の選択性を力学系の解の分岐ととらえ，分岐特性を持つ力学系を構成した．提案された力学系は，解析と数値実験により，コントロールパラメータに対し評価指標に応じた逐次的な分岐特性を示すことが示された．これは，より良い準最適解を得るためのパラメータの設定基準となる．次に，これらの結果をもとに分岐特性を利用した，準最適解を効率良く求めるためのアルゴリズム (アニーリングアルゴリズム) を提案し，数値実験によりそのパフォーマンスを検証した．

今後は，方程式に揺らぎの影響を与え，確率論的なダイナミクスにすることや，また，$\delta\alpha_0$ を可変にするようなスケジューリングを行ない，さらに効率良く準最適解が得られるようアルゴリズムを改良していくことを考えている．

最後に，有益なコメントをいただいた喜多一助教授 (東工大，総合理工学) に感謝致します．

表 1: The Performance of the algorithm

問題	N	最適解[a] L_{opt}	提案アルゴリズムによる解 L	L/L_{opt}
Had20	20	6922	6970	1.006934
Lipa40b	40	476581	476581	1
Lipa50b	50	1210224	1210224	1
Lipa60b	60	2520135	2520135	1
Nug20	20	2570	2596	1.010117
Nug21	21	2438	2464	1.010664
Nug22	22	3596	3602	1.001669
Nug24	24	3488	3490	1.000573
Nug25	25	(3744)	3750	1.001603
Nug30	30	(6124)	6128	1.000653
Rou20	20	725522	737376	1.016339
Scr20	20	110030	110978	1.008616
Sko42	42	(15812)	15878	1.004174
Tai20a	20	703482	732178	1.040791
Tai20b	20	122455319	123738773	1.010481
Tai25a	25	(1167256)	1197945	1.026292
Tai25b	25	344355646	344810540	1.001321
Tai30a	30	(1818146)	1861180	1.023669
Tai30b	30	(637117113)	654528887	1.027329
Tho30	30	(149936)	151256	1.008804

[a] 注:$(\cdot)$ は現在得られている最小値

参考文献

[1] 茨木俊秀，福島雅夫: 最適化の手法, 共立出版 (1993)

[2] C. R. Reeves: モダンヒューリスティクス，日刊工業新聞社 (1997)

[3] A. S. Mikhailov: Foundations of Synergetics I Ch.7, Springer (1994)

付録 I　分岐特性 ($\alpha_1 = 0$)

一様解の安定性

一様解 $u_{ij}^2 = u_0^2$ からの摂動を δu_{ij} として線形化すると線形化方程式は

$$\delta\dot{\boldsymbol{u}} = -u_0^2 A \delta\boldsymbol{u} \tag{16}$$

$$\delta\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} \delta\boldsymbol{u}_1^T & \cdots & \delta\boldsymbol{u}_N^T \end{bmatrix}^T, \quad \delta\boldsymbol{u}_j = \begin{bmatrix} \delta u_{1j} & \cdots & \delta u_{Nj} \end{bmatrix}^T \tag{17}$$

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 & \cdots & A_2 \\ A_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & A_2 \\ A_2 & \cdots & A_2 & A_1 \end{bmatrix}$$

$$A_1 = \begin{bmatrix} 2 & \alpha_0 & \cdots & \alpha_0 \\ \alpha_0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \alpha_0 \\ \alpha_0 & \cdots & \alpha_0 & 2 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} \alpha_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \alpha_0 \end{bmatrix} \tag{18}$$

となる．

固有値問題

$$A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x} \tag{19}$$

に対し，N^2 次元固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ を次のように置く．

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} e^{ik}\boldsymbol{x}_0^T & \cdots & e^{ikN}\boldsymbol{x}_0^T \end{bmatrix}^T \tag{20}$$

$$k = 2\pi\frac{n}{N}, \quad n = 0, 1, \cdots, N-1$$

$$\boldsymbol{x}_0 = \begin{bmatrix} e^{ik'} & \cdots & e^{ik'N} \end{bmatrix}^T \tag{21}$$

$$k' = 2\pi\frac{n'}{N}, \quad n' = 0, 1, \cdots, N-1$$

(20) を (19) に代入して

$$\lambda = 2 + \alpha_0\left(\sum_{m=1}^{N-1} e^{ikm} + \sum_{m=1}^{N-1} e^{ik'm}\right) \tag{22}$$

$$= \begin{cases} 2 + 2\alpha_0(N-1) & : k, k' = 0 \\ 2 + \alpha_0(N-2) & : k = 0, k' \neq 0 \text{ または } \\ & \quad k \neq 0, k = 0 \\ 2(1-\alpha_0) & : k, k' \neq 0 \end{cases} \tag{23}$$

を得る．よって一様解は $\alpha_1 = 0$ のとき $\alpha_0 < 1$ で安定である．

許容解の安定性

$\alpha_1 = 0$ のとき，許容解

$$u_{ij}^2 = \begin{cases} 1 : i = p(j) \\ 0 : i \neq p(j) \end{cases} \tag{24}$$

からの摂動を δu_{ij} として線形化すると，

$$\delta \dot{u}_{ij} = \begin{cases} -2\delta u_{ij} & : i = p(j) \\ (1-\alpha_0)\delta u_{ij} & : i \neq p(j) \end{cases} \tag{25}$$

となる．よって，許容解は $\alpha_1 = 0$ のとき $\alpha_0 > 1$ で安定である．

付録 II　分岐特性 $(\alpha_1 \neq 0)$

$\alpha_1 \neq 0$ のとき，許容解は次のようになる．

$$u_{ij}^2 = \begin{cases} \bar{u}_{ij}^2 & i = p(j) \\ 0 & i \neq p(j) \end{cases} \tag{26}$$

ここで，$\bar{u}_{ij}$ は次式を満たす．

$$1 - \bar{u}_{ij}^2 - \alpha_1 \sum_{j'} c_{ijj'} \bar{u}_{p(j')j'}^2 = 0 \tag{27}$$

$$c_{ijj'} = a_{jj'} b_{ip(j')} + a_{j'j} b_{p(j')i} \tag{28}$$

ここで, $\bar{u}_{ij}^2 = 1 + \Delta u_{ij}$ とおき, 高次の微小項を無視すると

$$\Delta u_{ij} = -\alpha_1 \sum_{j'} c_{ijj'} = -\alpha_1 \sum_{j'} (a_{jj'} b_{ip(j')} + a_{j'j} b_{p(j')i}) \tag{29}$$

を得る．

$(\alpha_0 - 1) \ll 1$ とし，平衡解からの摂動を δu_{ij} として，線形化すると，

- $u_{ij}^2 = \bar{u}_{ij}^2$ の場合 $(i = p(j))$

$$\begin{aligned} \delta \dot{u}_{ij} &= -2\left\{ \bar{u}_{ij}\delta u_{ij} + \alpha_1 \sum_{j'} c_{ijj'} \bar{u}_{p(j')j'} \delta u_{p(j')j'} \right\} \bar{u}_{ij} \\ &= -2\delta u_{ij} \end{aligned} \tag{30}$$

- $u_{ij}^2 = 0$ の場合 $(i \neq p(j))$

$$\delta \dot{u}_{ij} = -k_{ij} \delta u_{ij} \tag{31}$$

ここで,

$$k_{ij} = \alpha_0 - 1 + \frac{1}{2}\left[\Delta u_{p(j)j} + \Delta u_{ip^{-1}(i)}\right] + \alpha_1 \sum_{j'} c_{ijj'} \tag{32}$$

$$= \alpha_0 - 1 - \frac{\alpha_1}{2}\left[\sum_{j'} c_{p(j)jj'} + \sum_{j'} c_{ip^{-1}(i)j'}\right] + \alpha_1 \sum_{j'} c_{ijj'} \tag{33}$$

安定であるためには

$$k_{ij} > 0 \tag{34}$$

であることが必要である．(34) が成立しているとして, i を固定し j について和をとり $(j \neq p^{-1}(i))$, さらに i について和をとり，$N(N-1)$ で割ると，安定であるための必要条件

$$\begin{aligned} \alpha_0 &> 1 + \frac{2\alpha_1}{N-1}(L - \bar{L}) \\ \bar{L} &= \frac{1}{2N} \sum_{i,j,j'} c_{ijj'} \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{i,j,j'} (a_{jj'} b_{ip(j')} + a_{j'j} b_{p(j')i}) \end{aligned} \tag{35}$$

を得る．

付録 III　パラメータ S

次のようなパラメータ S を定義する．

$$S = \frac{1}{N}\sum_i S_i, \quad S_i = -\sum_j p_{ij}\log p_{ij} \quad p_{ij} = \frac{u_{ij}^2}{\sum_{j'} u_{ij'}^2} \tag{36}$$

ここで，p_{ij} は j 方向について和が 1 になるように規格化してあり，S は p_{ij} を用いて構成したエントロピー S_i の平均である．S は，一様解で最大値 $S_{\max} = \log N$ をとり，許容解で最小値 $S_{\min} = 0$ をとる．よって，S は力学系 (5) の分岐特性を表すパラメータであると考えられる．