分岐特性を用いた組合せ最適化問題の近似解法
第２報：決定論的アニーリングアルゴリズムの解析

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 – Analysis of a Deterministic Annealing Algorithm –

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

Abstract: We have proposed an algorithm for a combinatorial optimization problem based on successive bifurcation characteristics of a replicator equation. A deterministic annealing algorithm, in which a control parameter in the dynamical system is varied gradually, can be applied to the system. During the annealing process, bifurcations of equilibrium solutions occur and the bifurcation structure affects the performance of the annealing algorithm. In this paper the bifurcation structure of the dynamical system proposed is analyzed. It is shown that only pitchfork bifurcations occur in the process, and therefore an approximate solution of a problem is obtained as a continuous branch connected to the uniform solution.

1 はじめに

組合せ最適化問題とは，最適化問題の中で決定変数が離散値をとるものをいう [1]．組合せ最適化問題においては，可能な解の数は有限であり，原理的にはこれらすべてについて評価指標の値を計算することで厳密な最適解を得ることができる．しかし，多くの問題においてその数は指数関数的に増大し，このような数え上げによる方法は現実には不可能である．そのため，効率的に性能の良い近似解を得るための様々な手法が研究されている．その１つとして人工ニューラルネットワークモデルと呼ばれる手法がある．その代表的なものは，ホップフィールドモデル [2] である．これらの手法においては，組合せ最適化問題の評価指標と拘束条件からポテンシャル関数を設定し，その勾配系として力学系を構成する．組合せ最適化問題の近似解は，力学系の安定平衡解として与えられる．ホップフィールドモデルにおいては，得られる近似解の性能がポテンシャル関数に含まれるパラメータの値に大きく影響されるが，その値を決定する明確な指針がない．そのため，様々な改良が試みられており，その１つとして決定論的アニーリング [3, 4] があげられる．これは，ポテンシャル関数に含まれるパラメータを変化させるもので，確率論的な手法であるシミュレーテッドアニーリングの平均場近似と等価であることから，平均場アニーリングとも呼ばれる．我々は，力学系としてレプリケータ方程式を用いた手法を提案している [5]．提案する力学系においては，組合せ最適化問題の近似解に対応した平衡解が，力学系に含まれるパラメータを制御パラメータとして，対応する評価指標の値の小さい順に逐次的に分岐し，安定化する．そのため，制御パラメータを変化させ，最初の分岐点に近付けていくことで，性能の良い近似解が得られる．決定論的な力学系に含まれるパラメータを変化させることから，この手法もホップフィールドモデルに対する手法と同様に，決定論的アニーリングと呼ぶ．決定論的アニーリングの過程においては平衡解の分岐が起こり，その分岐の構造が得られる近似解の性能に影響すると考えられる．そこで，本報告ではアニーリングの過程における分岐構造の解析を行う．従来のホップフィールドモデルにおいては，基本的にはサドルノード分岐が起こる [6] ため，分岐点において平衡解のジャンプが起こる．提案する手法においては，基本的には熊手型分岐のみが起こる．そのため，アニーリングの過程においては平衡解は状態空間を連続的に移動し，連続的につながった平衡解として，組合せ最適化問題の近似解が得られる．

本研究では組合せ最適化問題として，一般的な問題である２次割当問題 (Quadratic Assignment Problem, QAP)[7] を用いる．以下，第 2 節において QAP を導入する．そして，第 3 節において提案する力学系の分岐構造の解析を行う．第 4 節では決定論的アニーリングの適用例を示す．最後に第 5 節において，結論を述べる．

2 2 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 $X = (x_{ij})$ とすれば，QAP は次のようにも表すことができる．

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

$$L = \mathrm{trace}(A^T X^T B X) = \sum_{i,i',j,j'} a_{jj'} b_{ii'} x_{ij} x_{i'j'} \tag{4}$$

QAP ではすべての可能な解の数は順列の数 $N!$ であり，これは N が大きくなるにつれて爆発的に増加する．そのため，これらすべてについて評価指標の値を計算することは事実上不可能である．また，QAP は巡回セールスマン問題やグラフ分割問題など，他の多くの組合せ最適化問題を特別な場合として含む，非常に一般的な問題であり，問題の特殊性を生かした効率的なアルゴリズムを考えることも困難である．そのため，QAP は組合せ最適化問題の中でも特に難しいものの 1 つとされている．QAP の典型的な応用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 への物資の輸送量を表し，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 に配置したときの輸送コストは $a_{ij}b_{kl}$ となる．問題は総輸送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．

3　提案する力学系と分岐特性

3.1　提案する力学系

QAP に対し，置換行列に対応した $N \times N$ の変数 u_{ij} に対する力学系を次のように構成する．

$$\dot{u}_{ij} = f_{ij}(u_{i'j'}, \alpha_0, \alpha_1) u_{ij}, \quad i,j = 1,\cdots,N \tag{5}$$

$$f_{ij} = (1 - u_{ij}^2) - \frac{\alpha_0}{2}\left[\sum_{i'\neq i} u_{i'j}^2 + \sum_{j'\neq j} u_{ij'}^2\right] - \frac{\alpha_1}{2}\sum_{i',j'}(a_{jj'}b_{ii'} + a_{j'j}b_{i'i})u_{i'j'}^2 \tag{6}$$

ここで，$\alpha_0 > 0$, $0 \le \alpha_1 \ll 1$ はパラメータである．

これは，ポテンシャル関数 V を用いると，以下のようにも表すことができる．

$$\dot{u}_{ij} = -\frac{\partial V}{\partial u_{ij}} \tag{7}$$

$$V = \frac{1}{4}\sum_{i,j}(1-u_{ij}^2)^2 + \frac{\alpha_0}{8}\sum_{i,j}\left[\sum_{i'\neq i} u_{i'j}^2 + \sum_{j'\neq j} u_{ij'}^2\right]u_{ij}^2 + \frac{\alpha_1}{4}\sum_{i,j,i',j'} a_{jj'}b_{ii'}u_{ij}^2 u_{i'j'}^2 \tag{8}$$

3.2　力学系の平衡解

力学系 (5) の平衡解 $u_{ij} = \bar{u}_{ij}$ は次式を満たす．

$$\bar{f}_{ij} = f_{ij}(\bar{u}_{i'j'}, \alpha_0, \alpha_1) = 0 \quad \text{or} \quad \bar{u}_{ij} = 0 \tag{9}$$

表記の簡単化のため，次のような添字の集合 Γ を定義する．

$$\Gamma = \{(i,j) \mid \bar{u}_{ij} \neq 0; i,j = 1,\cdots,N\} \tag{10}$$

これを用いて，(9) 式は次のように表される．

$$\begin{cases} \bar{u}_{ij} = 0 \ ((i,j) \notin \Gamma) \\ A^\Gamma \boldsymbol{x}^\Gamma = \boldsymbol{b}^\Gamma \ (\boldsymbol{x}^\Gamma > 0) \end{cases} \tag{11}$$

ここで，$\boldsymbol{x}^\Gamma$ は $\bar{u}_{ij}^2, (i,j) \in \Gamma$ を列順に縦に並べた M^Γ 次元ベクトルであり，$\boldsymbol{b}^\Gamma$ は M^Γ 次元ベクトル，A^Γ は $M^\Gamma \times M^\Gamma$ 行列である (付録 A 参照)．ここで，M^Γ は集合 Γ の要素数，すなわち $\bar{u}_{ij} \neq 0$ である要素数を表す．平衡解は Γ，すなわち $\bar{u}_{ij} \neq 0$ である要素を決めれば，線形の代数方程式によって一意に決定される．

平衡解を次のように分類する．

$$\begin{cases} \text{(A) 一様解}: \Gamma = \Gamma^0 \\ \text{(B) 遷移解}: \Gamma \neq \Gamma^0, \Gamma^p, \forall p \in \Pi_{\mathcal{N}} \\ \text{(C) 許容解}: \Gamma = \Gamma^p, p \in \Pi_{\mathcal{N}} \end{cases} \tag{12}$$

ここで，

$$\Gamma^0 = \{(i,j) \mid i,j = 1,\cdots,N\} \tag{13}$$

$$\Gamma^p = \{(i,j) \mid i = p(j); i,j = 1,\cdots,N\}, p \in \Pi_{\mathcal{N}} \tag{14}$$

すなわち，許容解は置換行列と 1 対 1 に対応する．

3.3　平衡解の安定性

平衡解 (11) の近傍で $u_{ij} = \bar{u}_{ij} + \delta u_{ij}$ として力学系 (5) を線形化する．

$$\begin{cases} \delta\dot{u}_{ij} = \bar{f}_{ij}\delta u_{ij} \ ((i,j) \notin \Gamma) \\ \delta\dot{\boldsymbol{u}}^\Gamma = -D^\Gamma \delta\boldsymbol{u}^\Gamma \end{cases} \tag{15}$$

ここで，$\delta\boldsymbol{u}$ は $\delta u_{ij}, (i,j) \in \Gamma$ を列順に縦に並べた M^Γ 次元ベクトルであり，

$$D^\Gamma = 2\mathrm{diag}(\sqrt{\boldsymbol{x}^\Gamma})A^\Gamma \mathrm{diag}(\sqrt{\boldsymbol{x}^\Gamma}) \tag{16}$$

である．(15) 式より，平衡解 (11) の安定条件は，次式で与えられる．

$$\begin{cases} \bar{f}_{ij} < 0 \ (\forall (i,j) \notin \Gamma) \\ D^\Gamma > 0 \end{cases} \tag{17}$$

特に，一様解，許容解に対しては，(17) 式より安定条件が以下のように求められる．

1. **一様解の安定性**

   一様解が安定であるための十分条件は次式で与えられる．

   $$0 < \alpha_0 < 1 - \frac{\alpha_1}{2} \max_{i,j} \sum_{i',j'} (a_{jj'} b_{ii'} + a_{j'j} b_{i'i}) \quad (18)$$

   条件 (18) は $\alpha_1 = 0$ のときは必要十分条件 ($\alpha_0 < 1$) である．また，一様解以外のすべての平衡解が不安定であるための十分条件が次式のように求められる．

   $$0 < \alpha_0 < \frac{1}{N-1} \left\{ 1 - \frac{\alpha_1}{2} \max_{i,j} \sum_{i',j'} (a_{jj'} b_{ii'} + a_{j'j} b_{i'i}) \right\} \quad (19)$$

   よって，α_0, α_1 の十分小さい領域では，一様解のみが安定に存在することが分かる．

2. **許容解の安定性**

   すべての許容解が安定であるための十分条件は次式で与えられる．

   $$\alpha_0 > 1 + \alpha_1 N \quad (20)$$

   これは $\alpha_1 = 0$ のときは必要十分条件 ($\alpha_0 > 1$) である．また，許容解以外のすべての平衡解が不安定であるための十分条件が，次のように求められる．

   $$\alpha_0 > 2, \quad \alpha_1 < \frac{2}{\max_{i,j} \sum_{i',j'} (a_{jj'} b_{ii'} + a_{j'j} b_{i'i})} \quad (21)$$

   すなわち，α_1 が小さく，α_0 が十分大きければ，許容解のみが安定に存在する．さらに，順列 $p \in \Pi_N$ で表される許容解が安定であるための必要条件が次のように求められる [5].

   $$\alpha_0 > 1 + \frac{\alpha_1}{N-1} (L - \bar{L}) \quad (22)$$

   $$L = \sum_{j,j'} a_{jj'} b_{p(j)p(j')} \quad (23)$$

   $$\bar{L} = \frac{1}{2N} \sum_{i,j,j'} (a_{jj'} b_{ip(j')} + a_{j'j} b_{p(j')i}) \quad (24)$$

   (22) 式において，L は許容解に対応した評価指標の値である．また，$\bar{L}$ は許容解のある種の近傍での L の平均に当たるもので，解によってあまり変化しないことが分かっている．よって，(22) 式は，許容解が対応する評価指標の値の小さいものから順に，逐次的に安定化することを示している．

以上の結果を行列 A, B の要素を $[1, 99]$ の一様乱数で与えた $N = 5$ の QAP について図示したものが，図 1 である．図 1 は，(18)-(21) 式と，(22) 式を最適解について実際に計算したもの，さらに，数値的に計算した一様解の安定領域，すべての許容解 ($5! = 120$ 通り) の安定領域，そして少なくとも 1 つの許容解が安定に存在する領域を示している．数値計算では Γ を仮定し，α_0, α_1 の様々な値に対して (11) 式を解いて平衡解を求め，D^Γ の固有値と $\bar{f}_{ij}$ ($(i,j) \notin \Gamma$) を計算し，安定条件 (17) の評価を行っている．

EPS File float/phase.eps.epsf not found

図 1: $N = 5$ の QAP に対する一様解，許容解の安定領域．a:一様解のみが安定に存在する領域 ((19) 式)，b:一様解の安定十分条件 ((18) 式)，c:一様解の安定領域 (数値計算)，d:最適解に対応した許容解の安定必要条件 ((22) 式)，e:少なくとも 1 つの許容解が安定である領域 (数値計算)，f:すべての許容解が安定である領域 (数値計算)，g:すべての許容解の安定十分条件 ((20) 式)，h:許容解のみが安定に存在する領域 ((21) 式)．

3.4 決定論的アニーリングアルゴリズム

前節の結果をもとに，性能の良い近似解を求めるための決定論的アニーリングアルゴリズムを考えることができる; α_0 を制御パラメータとし，まず，α_0 の十分小さい領域で力学系の計算を行い，唯一の安定平衡解である一様解を求める．次に α_0 を少し増加させ，前に求めた平衡解を初期値として力学系の計算を行い，そこでの安定平衡解を求める．この手続きを繰り返し，最終的には許容解を求める．決定論的アニーリングによって得られる許容解は，評価指標の値に応じた逐次的な分岐特性 (22) より，対応する評価指標の値の小さい，性能の良い解であることが期待される．アニーリングの過程においては，一様解から遷移解，許容解へと平衡解の分岐が起こる．そのため，アニーリングの過程で起こる分岐の構造が，得られる解の性能に影響を与えると考えられる．そこで，次節において力学系 (5) の分岐構造の解析を行う．

3.5 分岐構造

前節で述べたように，アニーリングの過程では平衡解の分岐が起こり，その分岐構造が得られる解の性能に影響を与えると考えられる．そこで，本節では力学系 (5) の平衡解の分岐構造の解析を行う．

力学系 (5) を分岐点において線形化したときの係数行列 ((15) 式の D^Γ および $\bar{f}_{ij}$ ($(i,j) \notin \Gamma$) を対角に並べた行列) はゼロ固有値を持つ．QAP では行列 A, B が特殊な構造をしていない限りゼロ固有値は縮退していないと考えられる．よって，ここではゼロ固有値は縮退していないと仮定する．このとき，分岐点において 1 次元の中心部分空間 (ゼロ固有値に対応した固有ベクトルの張る空間) に接する 1 次元中心多様体が存在し，力学系 (5) の分岐点近傍での振る舞いは，力学系 (5) を中心多様体上へ縮約した 1 次元力学系によって表される [8]．アニーリングの過程における分岐を考えると，一様解はすべての要素が $\bar{u}_{ij} \neq 0$ で

あるような平衡解であり，許容解は N 個の要素が $\bar{u}_{ij} \neq 0$ であるような平衡解であるから，分岐を繰り返すことによって $N^2 - N$ 個の要素が $\bar{u}_{ij} = 0$ になる．ゼロ固有値が縮退していないという仮定から，2 つ以上の要素が同時に $\bar{u}_{ij} = 0$ になることはない．つまり，アニーリングの過程においては，一様解から 1 つずつ $\bar{u}_{ij} = 0$ になる分岐を繰り返して許容解へと向かう．そこで，$\alpha_0 = \bar{\alpha}_0$ において，ある (i_0, j_0) に対して $\bar{f}_{i_0 j_0} = 0, \bar{u}_{i_0 j_0} = 0$ になったとする．中心部分空間は $u_{i_0 j_0}$ 方向である．この点における中心多様体 W^c を $\delta u_{i_0 j_0}$ の 2 次まで求めると，以下のようになる．

$$W^c : \delta u_{ij} = w_{ij} \delta u_{i_0 j_0}^2 + v_{ij} \delta \alpha_0 + O(|\delta u_{i_0 j_0}|^3) \quad ((i,j) \neq (i_0, j_0)) \tag{25}$$

ここで，$\alpha_0 = \bar{\alpha}_0 + \delta \alpha_0$ である．また，係数 w_{ij}, v_{ij} は次式を満たすものとして一意に決まる ($\boldsymbol{g}^\Gamma, \boldsymbol{h}^\Gamma$ は付録 A 参照).

$$\begin{cases} w_{ij} = v_{ij} = 0 \ ((i,j) \notin \Gamma \cup \{(i_0, j_0)\}) \\ D^\Gamma \boldsymbol{w}^\Gamma = \boldsymbol{g}^\Gamma, D^\Gamma \boldsymbol{v}^\Gamma = \boldsymbol{h}^\Gamma \end{cases} \tag{26}$$

中心多様体 W^c 上の 1 次元力学系は次のように表される (μ_1, μ_2 は付録 A 参照).

$$\delta \dot{u}_{i_0 j_0} = \mu_1 (\delta \alpha_0 + \frac{\mu_2}{\mu_1} \delta u_{i_0 j_0}^2) \delta u_{i_0 j_0} + O(|\delta u_{i_0 j_0}|^4) \tag{27}$$

式 (27) は，熊手型分岐の標準形となっており，力学系 (5) においては原則として熊手型分岐のみが起こることが分かる．熊手型分岐には図 2 の 4 つの場合が存在し，それぞれ μ_1, μ_2 の符号と対応している．

$$\begin{cases} \text{(a)} : \mu_1 < 0, \mu_2 < 0 \\ \text{(b)} : \mu_1 > 0, \mu_2 < 0 \\ \text{(c)} : \mu_1 > 0, \mu_2 > 0 \\ \text{(d)} : \mu_1 < 0, \mu_2 > 0 \end{cases} \tag{28}$$

力学系 (5) において，一様解から許容解へのアニーリングの過程は大きく 2 つに分類できる．1 つは一様解から超臨界熊手型分岐のみによって連続的に許容解につながっていく場合であり，他方は途中で遷臨界熊手型分岐が起こり，不連続が生じる場合である．図 3 は第 3.3 節で用いた $N = 5$ の QAP について，安定平衡解を数値的にたどったグラフであり，一様解から許容解まですべて超臨界熊手型分岐により，連続的につながった例である; 力学系 (5) は Γ すなわち，$\bar{u}_{ij} \neq 0$ である要素を決めれば (11) 式によりその平衡解は一意に求めることができ，その安定性は (17) 式により決定できる．そこで $\Gamma = \Gamma^0$ (一様解) から出発し，(11) 式と (17) 式の計算を行いながら α_0 を少しずつ増加させ，ある $(i_0, j_0) \in \Gamma$ に対して $\bar{u}_{i_0 j_0} = 0$ となったら (i_0, j_0) を Γ から除いていくことで，分岐する平衡解の枝を代数的に追うことができる．この手続きは分岐が超臨界熊手型分岐である限り続けることができる．しかし，得られた許容解は最適解ではなかった ($L/L_{\mathrm{opt}} = 1.02$，$L_{\mathrm{opt}}$ は最適解に対する L の値)．このことはアニーリングによって得られる解 (アニーリング解) が，必ずしも最適解ではないことを示している．これは，最適解から出発し，α_0 を少しずつ減少させていくと，平衡解に対するポテンシャル関数 V の値は，はじめはアニーリング解よりも小さいが，あるところで V の値の大小が入れ替わり，その後，遷臨界熊手型分岐を起こしていることによる (図 4)．このように，アニーリング解以外の許容解へつながる平衡解は，すべて遷臨界熊手型分岐によって出現することになるが，その時点では V の値はアニーリング解よりも大きい．すなわち，力学系 (5) は各分岐点ではある種の選択を行って，V のより小さい方を選択しているが，このように途中で V の値の入れ替わりが起こって，最終的な解は最適解ではない．一方，途中で遷臨界熊手型分岐が起こり，一様解から許容解まで完全に連続的にはつながっていない場合は，ここで行ったように完全に代数的に安定平衡解の枝をたどることはできない．しかし，不連続点においても，局所的には V のより小さい解を選択しているから，アニーリングにおいて十分ゆっくりと α_0 を増加させ，平衡解をたどれば，ほぼ同程度の性能の解が得られることが期待される．

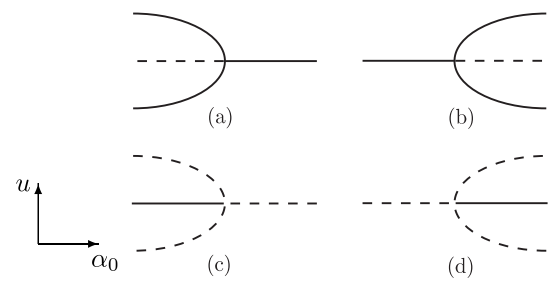

図 2: 熊手型分岐の分岐図．実線は安定平衡解，破線は不安定平衡解を表す．(a),(b)：超臨界熊手型分岐，(c),(d)：遷臨界熊手型分岐．

4　決定論的アニーリングアルゴリズムの適用例

ここでは QAPLIB[9] の中の様々な問題例に対して，実際に決定論的アニーリングアルゴリズムを適用した結果を示す．アニーリングの方法は，基本的には平衡解をたどるように十分ゆっくりとパラメータ α_0 を動かしさえすれば良いが，ここでは効率化のため力学系の平衡状態を表すパラメータであるパラメータ S (付録 B) を用い，その変化量が一定となるように次のようなスケジューリングを行う．

$$\Delta \alpha_0 = \frac{\Delta S^{\mathrm{d}}}{|S - S^{\mathrm{old}}|} \Delta \alpha_0^{\mathrm{old}} \tag{29}$$

$$\alpha_0 = \alpha_0^{\mathrm{old}} + \Delta \alpha_0 \tag{30}$$

ここで，ΔS^{d} はパラメータ S の設定変化量 (定数として与える) であり，$\cdot^{\mathrm{old}}$ はそのパラメータの前の値を表す．

様々な問題例に対してアニーリングを適用し，得られた近似解に対する評価指標の値を表 1 に示す．いずれの問題例においても ΔS^{d} を小さくしていくと一定，あるいは

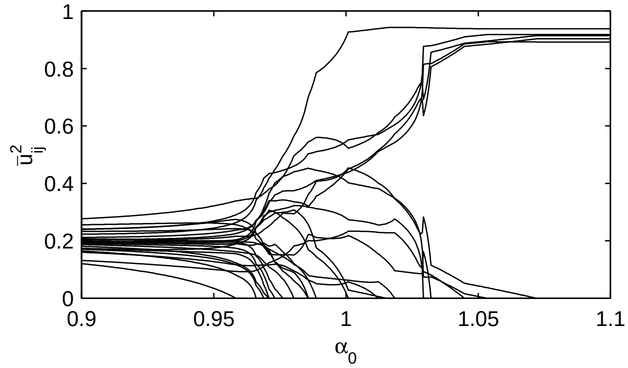

図 3: $N = 5$ の QAP で平衡解の枝を代数的に追ったグラフ ($\alpha_1 = 0.1$)．各分岐点では超臨界熊手型分岐により 1 つずつ $\bar{u}_{ij} = 0$ となっている．得られた許容解に対する評価指標の値は $L/L_{\mathrm{opt}} = 1.02$.

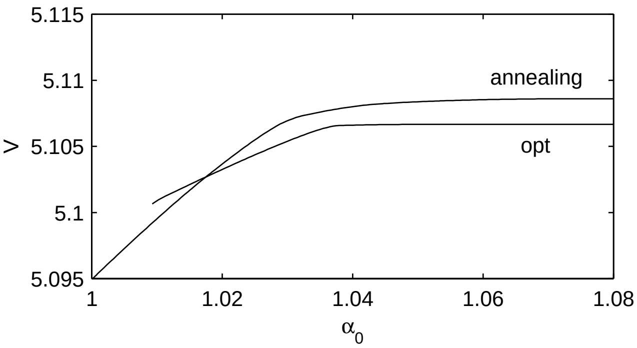

図 4: $N = 5$ の QAP におけるアニーリング解 (“annealing”) と最適解に連続的につながる平衡解 (“opt”) に対するポテンシャル関数 V の値．最適解につながる平衡解は $\alpha_0 \simeq 1.01$ において遷臨界熊手型分岐を起こしている．

ほぼ一定の性能の解が得られており，表 1 にはその値を示している．表 1 によると，多くの問題例で評価指標の最適値からのずれが 1% を下回る良好な近似解が得られ，その他についても最大でも数%のずれに収まっており，アニーリングによって性能の良い近似解が得られているといえる．また，計算のステップ数は N によらず，ほぼ 1 万から 10 万ステップの間にばらついている．ここでの 1 ステップとは時間積分の 1 ステップを意味し，1 ステップ当たりの計算時間は，ほぼ N^4 に比例する．DEC 製ワークステーション Alpha Station 500/333 (CPU:Alpha21164, クロック速度 333MHz) を用いて計算した場合，$N = 20$ で約 0.005 秒である．すなわち，例えば $N = 20$ では数分で 1 つの許容解が得られることになり，計算時間に関しても，十分効率的であるといえる．

表 1: 決定論的アニーリングアルゴリズムの性能

問題	N	最適解[a] L_{opt}	アニーリングによる解 L	L/L_{opt}
bur26a	26	(5426670)	5439285	1.00232
Had20	20	6922	6970	1.00693
Nug20	20	2570	2588	1.007
Nug24	24	3488	3490	1.00057
Rou20	20	725522	730710	1.00715
Sko56	56	(34458)	34502	1.00128
Sko100a	100	(152002)	152502	1.00329
Tai50a	50	(4941410)	5051386	1.02226
Tai50b	50	(458821517)	459975270	1.00251
Tai80a	80	(13557864)	13733524	1.01296
Tai80b	80	(818415043)	821025553	1.00319
Tai100a	100	(21125314)	21557766	1.02047
Tai100b	100	(1185996137)	1193847431	1.00662
Tho30	30	(149936)	151256	1.0088
Tho40	40	(240516)	241192	1.00281
Tho150	150	(8133484)	8158137	1.00303
wil50	50	(48816)	48892	1.00156
wil100	100	(273038)	273294	1.00094

[a] 注:(·) は現在知られている最小値

5　まとめ

我々は，レプリケータ方程式の逐次分岐特性を利用した，組合せ最適化問題の近似解法を提案しており，本報告では提案する力学系の分岐の解析を行った．提案する力学系においては，組合せ最適化問題の評価指標の値に応じて，対応する平衡解 (許容解) が逐次的に安定化する．そこで，その特性を利用して，決定論的アニーリングアルゴリズムと呼ばれる，力学系に含まれるパラメータを変化させる手法を考えることができる．アニーリングの過程においては，力学系の平衡解の分岐が起こるが，解析の結果，基本的にそれは熊手型分岐であり，各分岐点では変数の値が 1 つずつ連続的に 0 になっていく．それにより，一様解から連続的につながる平衡解として，組合せ最適化問題の近似解が得られる．そして，アニーリングを様々な問題例に実際に適用した結果，十分に性能の良い近似解が得られることが示された．しかし，アニーリングによってどの程度の近似解が得られるのかは明らかではなく，また，得られる解はほとんどの場合最適解ではない．そのため，最適解を得るためには，連続的につながる平衡解の枝を入れ替える必要がある．実際，もう 1 つのパラメータである α_1 を変化させることにより，分岐の順序が入れ替わる可能性のあることが，予備的な実験により観測されている．よって，α_1 をより適切に設定する，あるいはアニーリングの過程において α_1 を変化させることにより，性能の改善が見込まれる．これについては今後の課題である．

参考文献

[1] 茨木, 福島: 最適化の手法, 共立出版, (1993).

[2] J. J. Hopfield and D. W. Tank: "Neural" Computation of Decisions in Optimization Problems, *Biological Cybernetics*, **52**, 141 (1985).

[3] C. Peterson and B. Söderberg: A New Method for Mapping Optimization Problems onto Neural Networks, *International Journal of Neural Systems*, **1**, 3 (1989).

[4] G. Bilbro, R. Mann, T. K. Miller, W. E. Snyder, D. D. Van den Bout, and M. White: Optimization by Mean Field Annealing, In *Advances in Neural Information Processing Systems I*, 91, Morgan Kaufmann (1989).

[5] 土屋, 西山, 辻田: 分岐特性を用いた組合せ最適化問題の近似解法, 第10回自律分散システムシンポジウム資料 (1998).

[6] M. Sato and S. Ishii: Bifurcations in Mean Field Theory Annealing, *Physical Review E*, **53**, 5153 (1996)

[7] P. M. Pardalos, F. Rendl, and H. Wolkowicz: The Quadratic Assignment Problem: A Survey and Recent Developments, In P. Pardalos and H. Wolkowicz, editors, *Quadratic Assignment and Related Problems*, **16**, 1, DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science (1994).

[8] J. Guckenheimer and P. Holmes: *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*, Springer-Verlag, New York (1983).

[9] R. E. Burkard, S. Karisch, and F. Rendl: QAPLIB - A Quadratic Assignment Problem Library, *European Journal of Operational Research*, **55**, 115, (1991).

付録

A 定数

(11) 式に用いられている $A^\varGamma, \boldsymbol{b}^\varGamma$ は，以下のように与えられる; $\boldsymbol{b}^\varGamma$ はすべての要素が 1 である $M^\varGamma$ 次元ベクトルであり，$A^\varGamma$ は次の行列 A から $(i,j) \notin \varGamma$ に対応する行および列を除いた $M^\varGamma \times M^\varGamma$ 行列である．

$$A = A_0 + A_1 \tag{31}$$

$$A_0 = \begin{bmatrix} A_0^{(1)} & A_0^{(2)} & \cdots & A_0^{(2)} \\ A_0^{(2)} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & A_0^{(2)} \\ A_0^{(2)} & \cdots & A_0^{(2)} & A_0^{(1)} \end{bmatrix} \tag{32}$$

$$A_0^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{\alpha_0}{2} & \cdots & \frac{\alpha_0}{2} \\ \frac{\alpha_0}{2} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \frac{\alpha_0}{2} \\ \frac{\alpha_0}{2} & \cdots & \frac{\alpha_0}{2} & 1 \end{bmatrix}, \quad A_0^{(2)} = \frac{\alpha_0}{2} I_N \tag{33}$$

$$A_1 = \begin{bmatrix} A_1^{(11)} & \cdots & A_1^{(1N)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_1^{(N1)} & \cdots & A_1^{(NN)} \end{bmatrix} \tag{34}$$

$$(A_1^{(jj')})_{ii'} = \frac{\alpha_1}{2}(a_{jj'}b_{ii'} + a_{j'j}b_{i'i}) \tag{35}$$

(26) 式に用いられている $\boldsymbol{g}^\varGamma, \boldsymbol{h}^\varGamma$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} g_{ij} = & -\frac{\bar{\alpha}_0}{2}\bar{u}_{ij}(\delta_{ii_0} + \delta_{jj_0}) \\ & -\frac{\alpha_1}{2}(a_{jj_0}b_{ii_0} + a_{j_0j}b_{i_0i})\bar{u}_{ij}, \ (i,j) \in \varGamma \end{aligned} \tag{36}$$

$$h_{ij} = -\frac{1}{2}\Bigg[\sum_{\substack{i'\neq i \\ (i',j)\in\varGamma}} \bar{u}_{i'j}^2 + \sum_{\substack{j'\neq j \\ (i,j')\in\varGamma}} \bar{u}_{ij'}^2\Bigg]\bar{u}_{ij}, \ (i,j) \in \varGamma \tag{37}$$

を列順に並べた $M^\varGamma$ 次元ベクトルである．ただし，$\delta_{ii_0}, \delta_{jj_0}$ はクロネッカーのデルタである．また，(27) 式の μ_1, μ_2 は次のように与えられる．

$$\begin{aligned} \mu_1 = & -\bar{\alpha}_0\Bigg[\sum_{\substack{i'\neq i_0 \\ (i',j_0)\in\varGamma}} \bar{u}_{i'j_0}v_{i'j_0} + \sum_{\substack{j'\neq j_0 \\ (i_0,j')\in\varGamma}} \bar{u}_{i_0j'}v_{i_0j'}\Bigg] \\ & -\alpha_1 \sum_{\substack{i',j' \\ (i',j')\in\varGamma}} (a_{j_0j'}b_{i_0i'} + a_{j'j_0}b_{i'i_0})\bar{u}_{i'j'}v_{i'j'} \\ & -\frac{1}{2}\Bigg[\sum_{\substack{i'\neq i_0 \\ (i',j_0)\in\varGamma}} \bar{u}_{i'j_0}^2 + \sum_{\substack{j'\neq j_0 \\ (i_0,j')\in\varGamma}} \bar{u}_{i_0j'}^2\Bigg] \end{aligned} \tag{38}$$

$$\begin{aligned} \mu_2 = & -\bar{\alpha}_0\Bigg[\sum_{\substack{i'\neq i_0 \\ (i',j_0)\in\varGamma}} \bar{u}_{i'j_0}w_{i'j_0} + \sum_{\substack{j'\neq j_0 \\ (i_0,j')\in\varGamma}} \bar{u}_{i_0j'}w_{i_0j'}\Bigg] \\ & -\alpha_1 \sum_{\substack{i',j' \\ (i',j')\in\varGamma}} (a_{j_0j'}b_{i_0i'} + a_{j'j_0}b_{i'i_0})\bar{u}_{i'j'}w_{i'j'} \\ & -(1 + \alpha_1 a_{j_0j_0}b_{i_0i_0}) \end{aligned} \tag{39}$$

B パラメータ S

次のようなパラメータ S を定義する．

$$S = \frac{1}{N}\sum_i S_i, \quad S_i = -\sum_j p_{ij}\log p_{ij}, \quad p_{ij} = \frac{u_{ij}^2}{\sum_{j'} u_{ij'}^2} \tag{40}$$

S は，一様解でほぼ最大値 $S_{\max} = \log N$ 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) の平衡状態を特徴付けるパラメータであると考えられる．