

レプリケータ方程式にもとづく組合せ最適化問題の 動的モンテカルロアルゴリズム

○西山岳宏, 土屋和雄, 辻田勝吉

京都大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻

A Dynamical Monte Carlo Algorithm for a Combinatorial Optimization Problem Based on Replicator Equations

○Takehiro Nishiyama, Kazuo Tsuchiya, Katsuyoshi tsujita

Dept. of Aeronautics and Astronautics, Graduate School of Engineering, Kyoto University

Abstract: We have proposed a model based on replicator equations for the quadratic assignment problem, which is one of the hardest combinatorial optimization problems. In this paper, we propose a new algorithm combining the proposed dynamical system with a local heuristic method similar to the simulated annealing. By using the proposed dynamical system, the solution can be searched efficiently in a relatively large neighborhood. The proposed method is applied to large scale problems, and it is shown that the method can obtain approximate solutions comparable to the best known solutions in relatively short time.

1 はじめに

本研究では、力学系にもとづく、組合せ最適化問題に対するアルゴリズムを提案する。問題としては、組合せ最適化問題の中でも、特に難しいとされる2次割当問題 (Quadratic Assignment Problem, QAP) [1] を取り扱う。

QAPの解は、問題のサイズを N とすると、 N 次元の順列、もしくはそれと同等な $N \times N$ の置換行列として表される。従来の力学系を用いたアルゴリズムにおいては、置換行列に対応した $N \times N$ の連続変数に対して、問題の評価指標と制約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導出していた。

一方、我々は、力学系としてレプリケータ方程式を用いたモデルを提案している [2]。提案力学系においては、系に含まれるパラメータの値を増加させたとき、置換行列に対応した平衡解が、その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が示されている。さらに、力学系の分岐特性にもとづいた、決定論的アニーリングアルゴリズムを提案している。決定論的アニーリングにおいては、初期値に関わらず、良い近似解がほぼ一意的に得られることが示されている [3]。しかし、これはどれほど時間をかけてアニーリングを行っても、それ以上の解の改善は見込めないということにもなる。

そこで、本研究では提案力学系に局所ヒューリスティックアルゴリズムを組み合わせる手法を提案する。多くのヒューリスティック解法は解に対する置換操作を基本操作とする。解に対する置換操作もまた、置換行列として表される。そこで、力学系の変数を解に対する置換操作に対応付けることによって、そのような局所ヒューリスティクスを力学系を用いて実現することが可能となる。近年このような考え方にもとづいて、 λ -DCN と呼ばれるモデ

ルが提案されている [4]。これは、 λ -opt と呼ばれる、順列の λ 個の要素を同時に置換する局所ヒューリスティクスを、力学系を用いて実現したものである。すなわち、置換行列であることに加えて、さらにそれが λ -置換となるような制約を与え、 λ -置換を繰り返すことによって、解を逐次更新していく手法である。しかし、導出された力学系は、 $N \times N$ の変数に対する3重のループとなっており、その収束性の保証はなく、また、計算コストもかかる。本研究では、各ステップでの探索空間を適当に選んだ M -置換の近傍に制限する。そして、 M -置換を求めるための $M \times M$ 次元の力学系を、レプリケータ方程式にもとづいて構成する。提案力学系では、系に含まれるパラメータを適切に設定することで、探索の対象を M -置換近傍の中で、十分良い近似解のみに制限することができる。そのため、より効率的な近傍探索が行われる。各ステップでは、力学系にランダムな初期値を与えて平衡解を求め、得られた解の採用は、シミュレーテッドアニーリング [5] と類似のアルゴリズムにより、確率的に行う。

以下、第2節において、QAPを導入し、第3節において、提案力学系について述べる。そして、第4節において、提案力学系を用いたアルゴリズムを提案し、第5節でその性能を検証する。最後に、第6節において結論を述べる。

2 2次割当問題 (QAP)

2次割当問題 (Quadratic Assignment Problem, QAP) [1] は組合せ最適化問題の中でも、特に難しいとされる問題の一つである。QAPは集合 $\mathcal{N} = \{1, 2, \dots, N\}$ と、 $N \times N$ 行列 $A = (a_{ij}), B = (b_{kl})$ により、次のよう

に表される .

$$\min_{p \in \Pi_N} L(p) \quad (1)$$

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

ここで, Π_N は 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 .

$$\min_{X \in \Pi_{N \times N}} L(X) \quad (3)$$

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

QAP の典型的な応用例としては施設配置問題がある; 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. 問題の目的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 提案力学系とその特性 [2]

我々は QAP に対して, 次のようなレプリケータ方程式を提案している .

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

$$f_{ij} = (1 - u_{ij}^2) - \frac{\alpha_0}{2} \left(\sum_{i' \neq i} u_{i'j}^2 + \sum_{j' \neq j} u_{ij'}^2 \right) - \frac{\alpha_1}{2} \sum_{i',j'} (a_{jj'} b_{ii'} + a_{j'j} b_{i'i}) u_{i'j'}^2 \quad (5b)$$

$(i, j = 1, \dots, N)$

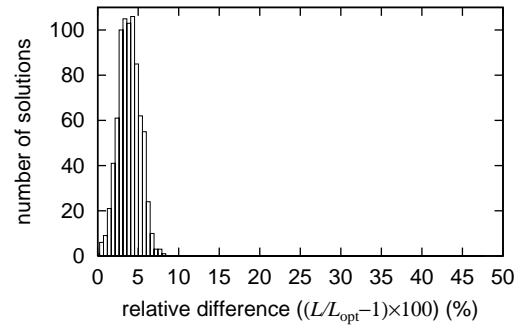
ここで, f_{ij} は成長率と呼ばれる. また, $\alpha_0 > 0$, $0 \leq \alpha_1 \ll 1$ はパラメータである. 成長率 f_{ij} の第 1 項は全ての要素を $u_{ij}^2 = 1$ へと向かわせる効果を表す. また, 第 2 項は同じ添え字 i (j) を持つ要素間の競合の効果を表し, パラメータ α_0 が競合の強さを決める. そして, 第 3 項は評価指標の勾配

$$\frac{1}{2} \frac{\partial L(U)}{\partial u_{ij}} = \sum_{i',j'} (a_{jj'} b_{ii'} + a_{j'j} b_{i'i}) u_{i'j'}^2 u_{ij} \quad (6)$$

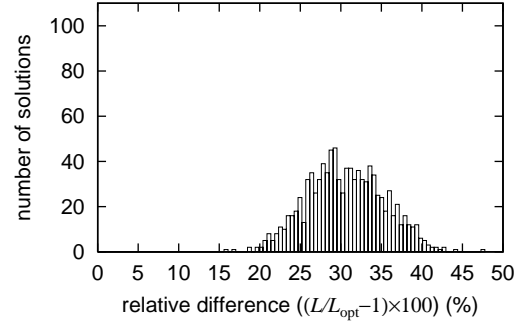
から導かれており, 評価指標の値の大きい解の出現を抑制する効果を表す. ただし, $U = (u_{ij}^2)$ である.

力学系 (5) は, 次のような, 置換行列に対応した平衡解 $\bar{u}_{ij}^{(p)}$ ($p \in \Pi_N$) を持つ .

$$\bar{u}_{ij}^{(p)} \begin{cases} \neq 0 & (i = p(j)) \\ = 0 & (i \neq p(j)) \end{cases} \quad (\forall i) \quad (7)$$



(a) $\alpha_0 = 1.01$



(b) $\alpha_0 = 3.0$

Fig. 1 Distribution of the feasible solutions

平衡解 (7) を許容解と呼ぶ. 許容解においては, $U = X$ ($X \in \Pi_{N \times N}$) とみなせる.

置換行列 X に対応した許容解の安定条件は, 近似的に次のように与えられる.

$$\alpha_0 > 1 + \frac{\alpha_1}{N-1} (L(X) - \bar{L}) \quad (8)$$

\bar{L} : constant

安定条件 (8) は, $\alpha_0 = 1$ 付近では, $L(X)$ の値の小さい, 良い近似解のみが安定に存在し得ることを示している.

安定条件 (8) を検証するため, QAPLIB [6] に含まれる $N = 20$ の問題 “Nug20” を用い, α_0 の異なる値に対して, 力学系にランダムな初期値を与えて計算を行った. Fig. 1 (a),(b) はそれぞれ $\alpha_0 = 1.01, 3.0$ の場合の結果である. $\alpha_0 = 1.01$ では $\alpha_0 = 3.0$ に比べて, L の小さい良い近似解が得られていることが分かる.

4 最適化アルゴリズム

QAP に対するヒューリスティック解法の多くは, 順列に対する置換操作を基本とする. すなわち, 順列のいくつかの要素を入れ替えて, 現在の解から新たな解を生成する. 入れ替える要素数が M 個の場合, その解の集合を現在の解に対する M -opt 近傍と呼ぶ. 近傍探索の過程を置換行列を用いて表すと, 現在の置換行列 X に別の置換行列 Y をかけて, 新しい解 $X' = YX$ を逐次的に生成

していくことに対応する．新しい解 X' に対する評価指標の値は次のようになる．

$$L(X') = \text{trace}(A^T X'^T B X') \quad (9)$$

$$= \text{trace}(A^T X^T Y^T B Y X) \quad (10)$$

$$= \text{trace}(X A^T X^T Y^T B Y) \quad (11)$$

すなわち，現在の解に対する近傍探索は，行列 A が現在の解によって $X^T A X$ と変換された新たな問題に対する解 Y を求めることに対応する．そこで，提案力学系を用いて Y を求めることを考える．これは，式 (5) において， $A \rightarrow X^T A X$ と置き換えることで容易に計算される．さらに，効率的に探索するために，近傍の大きさを制限することを考える． $N \times N$ の力学系 (5) を用いて Y を求めることは，現在の解にほぼ関係なく，大域的な近似解を求めることに対応する．今の場合，逐次的に解を更新していくためには，ある程度の大きさの近傍を探索することで十分であり，1回の更新ごとに大域探索を行うことは効率的ではない．そこで，置換を行う要素を適当に M 個選び，探索を行う空間を k -opt 近傍 ($0 \leq k \leq M$) に制限する．これは，力学系において，選ばれた $M \times M$ の要素以外を現在の解 ($U = X$) に固定し，残りの $M \times M$ の要素に対する力学系を計算することに対応する．このとき，力学系の安定条件 (8) より， α_0 を 1 に近い適当な値に設定することで，効率的に現在の解を改善する置換行列 Y を求めることができると考えられる．

さらに，より効率的に探索を行うために，解の更新アルゴリズムとして，シミュレーテッドアニーリング [5] と類似の手法を導入する．すなわち，評価指標の値が増加する場合にも，現在の解 X と，新たに求められた解 $X' = YX$ との評価指標値の差に応じて，確率

$$\exp(-(L(X') - L(X))/T) \quad (12)$$

で解 X' を採用する．ここで， T は温度と呼ばれるパラメータであり，アルゴリズムの過程において徐々に減少させていくものとする．

具体的なアルゴリズムを Fig. 2 に示す．ここで，力学系により解を求めた後，大域的に 2-opt 近傍に対する局所探索法 (2-opt 法) を適用し，解の微調整を行っている．また，温度 T の更新は，各ステップごとに T に適当な定数 b ($b < 1$) をかけることにより行っている．

提案アルゴリズムにおいては，生成されるマルコフ鎖が定常分布を持つとは限らないため，本来のシミュレーテッドアニーリングとはいえないが， L の増加を確率的に許して局所解から抜け出すための手法として，そのアルゴリズムを導入した．また，本アルゴリズムは，巡回セールスマン問題に対する Martin らの手法 [7] に類似

1. $\alpha_0 := 1 + \epsilon$
2. $T := \text{some initial value}$
3. $X := \text{some initial permutation matrix}$
4. $i := 0$ (iteration)
5. **while** $i < i_{\max}$ **do**
- 5.1. Choose M indices randomly from \mathcal{N}
- 5.2. Calculate corresponding $M \times M$ dynamical system with random initial values and obtain a k -permutation matrix Y ($0 \leq k \leq M$)
- 5.3. $X' := YX$
- 5.4. Apply 2-opt method to X'
- 5.5. $X := X'$ with probability $e^{-[L(X') - L(X)]^+ / T}$, where $[a]^+ = \max\{a, 0\}$
- 5.6. $T := b \cdot T$ ($b < 1$)
- 5.7. $i := i + 1$

Fig. 2 Algorithm

の方法であるとも言える．Martin らは，シミュレーテッドアニーリングの各ステップにおいて，現在の解のある近傍において，“double-bridge” と呼ばれる操作によりランダムに解に変更を加え，その後，2-opt のような局所ヒューリスティクスを適用している．一方，本手法においては，近傍における解の探索は力学系を用いて行われるため，より効率的に探索が進むものと思われる．

5 数値実験

本節では，QAPLIB に含まれる，比較的大規模な問題例を用いて数値実験を行う．

まず，近傍の大きさ M の影響について実験を行った．問題例 “Wil100” ($N = 100$) を用い， $M = 5, 10, 15$ として，それぞれ 10 回の試行を行った．ここで， $\alpha_0 = 1.01$ ， $\alpha_1 = 0.003$ ， $b = 0.99995$ ， $i_{\max} = 50000$ とし， T の初期値は 300.0 とした．それぞれの M の値における平均値，標準偏差，最小値を Table 1 に示す．ただし，これらの値は，現在知られている最小解 L_{opt} からの相対的な誤差 $100(L - L_{\text{opt}})/L_{\text{opt}}$ (%) を表す． M の値が大きいくほど性能が良いわけではなく， $M = 15$ では $M = 10$ よりも平均的な性能が劣っている．これは，近傍が大きすぎると，現在の解の良い部分まで壊してしまうためであると考えられる．しかし， M の最適な値については，さらなる検討が必要であると思われる．

次に，各ステップでの解の探索を，力学系を用いず，ランダムに行った場合との比較を行った．ランダムに行う場合は，前節で述べた Martin らの手法に類似なアルゴリズムとなる．再び，“Wil100” を用い， $M = 10$ としてそれぞれ 10 回の試行を行った．ただし，他のパラメータについては，上述の計算と同じ値を用いた．結果を Table 2

Table 1 Solutions of the proposed algorithm (%)

M	mean	standard deviation	minimum
5	0.014	0.022	0
10	0.0021	0.0019	0
15	0.015	0.027	0

Table 2 Solutions of the proposed algorithm with dynamics and without dynamics (random) (%)

	mean	standard deviation	minimum
dynamics	0.0021	0.0019	0
random	0.015	0.017	0

に示す．力学系を用いる場合は、用いない場合に比べて誤差の平均値で一桁良い性能を示している．すなわち、本アルゴリズムにおいては、力学系を用いることで $M = 10$ 程度の比較的広い近傍であっても、効率的に探索することができているといえる．

次に、“Wil100”に加えて、QAPLIBに含まれる他のいくつかの問題例 (“Sko100a”, “Sko100f”, “Tai100a” (以上 $N = 100$), “Tho150” ($N = 150$)) に対しても提案アルゴリズムを適用し、その性能について検証した．Table 3 に結果を示す．ここで、 L_{opt} は QAPLIB に掲載されている、現在知られている最小解であり、括弧内にその解を与えたアルゴリズム (Genetic Hybrids (GEN), Reactive Tabu Search (Re-TS), Simulated Jumping (SIMJ)) が示されている．表の 4 列目 (L) が提案手法による解であり、最後の列 (diff.) が L_{opt} からの相対的な誤差である．これら 5 つの問題例の内、2 つの問題例においては、現在までの最小解と全く同じ評価指標値を持つ解が得られており¹、また、その他の問題例についても、それとほぼ同等な解が得られている．

最後に、計算時間について述べる．本手法においては、問題のサイズが $N(\sim 100)$ であっても、近傍の大きさを $M(\sim 10)$ と設定すると $M \times M$ 次元の力学系を計算することになる．そのため、各ステップでは非常に高速に計算することができる．ワークステーション COMPAQ AlphaStation XP900 上での実計算時間は、アルゴリズムの 50000 ステップに対して、約 1~2 時間程度であり、提案アルゴリズムは短い時間で性能の良い解を得ることができるといえる．

6 まとめ

本研究では、局所ヒューリスティクスに力学系を組み合わせた手法を提案した．提案力学系においては、系に

¹得られた置換行列は、QAPLIB に掲載されているものとは異なるものであった．

Table 3 Performance

name	N	L_{opt} (algorithm)	L	diff.(%)
Sko100a	100	152002 (GEN)	152002	0
Sko100f	100	149036 (GEN)	149044	0.0053
Tai100a	100	21125314 (Re-TS)	21161510	0.17
wil100	100	273038 (GEN)	273038	0
Tho150	150	8133484 (SIMJ)	8139894	0.079

含まれるパラメータの値を適切に設定することで、性能の良い近似解のみが得られる．そのため、近傍探索の過程で提案力学系を用いることで、比較的広い近傍においても、効率的に解を探索することができる．提案手法を 2 次割当問題の大規模なベンチマーク問題に適用した結果、現在得られている最小解と同等な解を、短い時間で求めうることが示された．

参考文献

- [1] Pardalos, P. M., Rendl, F. and Wolkowicz, H.: The Quadratic Assignment Problem: A Survey and Recent Developments, in Pardalos, P. and Wolkowicz, H. eds., *Quadratic Assignment and Related Problems*, Vol. 16 of *DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science*, 1/42, American Mathematical Society (1994).
- [2] 土屋和雄, 西山岳宏, 辻田勝吉: 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, 235/238 (1998).
- [3] 土屋和雄, 西山岳宏, 辻田勝吉: 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, 第 11 回自律分散システムシンポジウム資料, 181/186 (1999).
- [4] Ishii, S. and Niitsuma, H.: λ -opt Neural Approaches to Quadratic Assignment Problems, *Neural Computation*, Vol. 12, 2209/2225 (2000).
- [5] Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D., Jr. and Vecchi, M. P.: Optimization by Simulated Annealing, *Science*, Vol. 220, 671/680 (1983).
- [6] Burkard, R. E., Karisch, S. and Rendl, F.: QAPLIB – A Quadratic Assignment Problem Library, *Journal of Global Optimization*, Vol. 10, 391/403 (1997).
- [7] Martin, O., Otto, S. W. and Felten, E. W.: Large-step Markov chains for the TSP incorporating local search heuristics, *Operations Research Letters*, Vol. 11, 219/224 (1992).