

メタヒューリスティックスの現状

——巡回セールスマン問題, グラフ分割問題, 二次割当問題, フローショップスケジューリング問題,
多次元ナップザック問題, 集合被覆問題, バイナリー二次計画問題を例に——

片山 謙吾・成久 洋之

岡山理科大学 工学部 情報工学科

(2000年11月1日 受理)

1. まえがき

工学またはその他の分野で登場するような, 実用上重要な問題の多くは, 組合せ最適化問題 (ここでは, 広い意味で, 単に「最適化問題」とも呼ぶ) としてモデル化される. 本論文では, 良く知られている幾つかの最適化問題を取り上げ, 近年, 各問題に対して良好な結果を得た解法について紹介する. 本論文で取り上げる最適化問題は, 巡回セールスマン問題 (traveling salesman problem, TSP), グラフ分割問題 (graph partitioning problem, GPP), 二次割当問題 (quadratic assignment problem, QAP), フローショップスケジューリング問題 (flow-shop scheduling problem, FSP), 多次元ナップザック問題 (multidimensional knapsack problem, MKP), 集合被覆問題 (set covering problem, SCP), バイナリー二次計画問題 (unconstrained binary quadratic programming problem, BQP) の七つである. これらは, 多くの応用例を有し, 全て NP-困難である. これらの NP-困難な問題に対して, 従来から多くの解法が提案されている. その代表的な解法の一つとして, 各最適化問題に対して厳密に最適解の算出を試みる厳密解法がある. しかしながら, 計算の複雑さの理論により, 多くの場合, そのような厳密解を求めることが極めて困難であることが明らかにされてきた.

本論文では, 厳密解法のように常に最適性を保証するものではなく, 最適解に近い解 (近似解) を比較的短時間に算出可能とする, “メタ戦略”, “メタヒューリスティックス” (metaheuristics) または “モダンヒューリスティックス” と呼ばれる範疇に属する解法に焦点をあてる. そのようなメタ戦略の中で利用される基本解法は, 近似解法 (approximate algorithms) またはヒューリスティック解法 (heuristic algorithms) と呼ばれ, 貪欲法や局所探索法などである. メタ戦略は, これらの基本的なアルゴリズムを有機的に結合することで実現され, 従来用いられてきた単なる局所探索法などの解法よりも更に高品質な近似解を算出可能とする枠組みとして捉えられている. この枠組みに属する代表的な解法は, 反復局所探索法 (iterate local search, ILS)^{17, 23)}, アニーリング法 (simulated annealing, SA)^{1, 5)}, タブー探索法 (tabu search, TS)^{2, 3)}, 遺伝的アルゴリズム (genetic algorithm, GA)²⁾ などがあり, これらの変形解法は, さまざま存在する^{9, 11, 16, 20, 25, 26, 27, 31, 33, 47, 56, 77)}. 以下では, 最適化問題及び局所探索について説明する. 次いで, 上述した各最適化問題を各セクションに別け, 各最適化問題に対して近年注目されているメタ戦略の解法について記述する. 最後に, これらの各サーベイを通して共通する事柄及びその展望について述べる.

2. 最適化問題と局所探索

最適化問題は一般的に次のように表される.

$$\text{maximize or minimize} \quad f(x) \quad (1)$$

$$\text{subject to} \quad x \in F. \quad (2)$$

最適化問題の制約条件を満たす解の集合 F を実行可能領域と呼び, その実行可能領域に含まれる解 x を実行可能解と呼ぶ. 最適化問題 (最大化問題) の目的は, 目的関数 f を最大化する実行可能解 $x \in F$ を求めることである. なお, 最小化問題の目的は, f を最小化する x を求めることである.

最適化問題には連続値を扱う問題と離散値 (整数, 集合, グラフなど) を扱う問題があるが, 本論文では, 離散値を扱う問題について考える. この種の最適化問題は, 組合せ最適化問題と呼ばれる. 組合せ最適化問題に対するメタ戦略の多くは, 局所探索 (local search, LS) (または, 近傍探索 (neighborhood search) と呼ばれる) をベースにし実現される. 以下では, LS について簡単に触れる.

実行可能領域に含まれる解の集合 F を与えた時, その近傍 N は以下の写像と定義される.

$$N : F \rightarrow 2^F$$

最大化問題の場合, $x \in F$ で, $f(x) \geq f(x'), \forall x' \in N(x)$ (最小化問題の場合では, $f(x) \leq f(x'), \forall x' \in N(x)$) を満足する x を局所最適解と呼ぶ. 局所探索法の戦略は, 現在の解 $x \in F$ に対してその近傍 $N(x)$ から選ばれる解 $x' \in N(x)$ を生成し, その近傍解 x' が現在解 x より良い解, すなわち, $f(x') > f(x)$, (最小化問題の場合, $f(x') < f(x)$) であれば, その解へ改善 ($x = x'$) する処理を, 近傍内に改善解が存在しなくなるまで繰り返すものである. 最終的にそこで算出される解が局所最適解である. なお多くのメタ戦略では, このような局所探索をベースにし, 常に良好な近傍解へ移動するだけでなく, 一時的には評価値を悪くするような解も探索しながら, できるだけ質の悪い局所最適解に陥らないような操作が加えられる.

3. 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題 (traveling salesman problem, TSP) は, 最も良く知られた組合せ最適化問題の一つであり, 数多くの解法が提案されてきた問題である. TSP とは, n 個の点 (都市) $\{c_1, c_2, \dots, c_n\}$, 及び各二都市間の距離 $d(c_i, c_j)$ が与えられた時, すべての点をただ一度経由する巡回路 π (Hamiltonian cycle) ($\pi(i) = j$ は巡回路の i 番目の都市が j であることを意味する) において, 次式を最小化する問題である¹⁸⁾.

$$f(\pi) = \sum_{i=1}^{n-1} d(c_{\pi(i)}, c_{\pi(i+1)}) + d(c_{\pi(n)}, c_{\pi(1)}) \quad (3)$$

TSP にはいろいろな変形問題が存在するが, ここでは, $1 \leq i, j \leq n$ において, 二点 c_i, c_j 間の双方向の距離が等しい ($d(c_i, c_j) = d(c_j, c_i)$) 対称巡回セールスマン問題 (symmetric TSP) を考える. なお, 実行可能解の数は $(n-1)!/2$ になる.

1973 年, Lin と Kernighan は, TSP 専用の局所探索法である 2-Opt 法, 3-Opt 法を更に拡張した局所探索法である, 可変深度近傍探索法 (variable r -Opt, または Lin-Kernighan (LK) 法と呼ぶ) を提案した²²⁾. LK 法は, TSP に対する解改善法としては最も強力な局所探索法として知られ, 現在では強力なメタ戦略をなすために必要不可欠な局所探索法であると言っても過言ではない.

TSP に対する最も有名なメタ戦略として, LK 法を繰り返し利用する, 反復局所探索法 (iterated local search, ILS) があげられる. これは, 1990 年代初期より TSP に対する最強の近似解法として知られている. Martin, Otto, Felten は, *Large-Step Markov Chain* と呼ばれる ILS を提案し, 318, 532, 783 都市問題の最適解算出に成功した²³⁾. 彼らの方法は, 局所探索法で得られた局所最適解から, ある近傍操作を用いて異なる近似解へ脱出し, その近似解から再び局所探索法を繰り返すプロセスがベースに置かれ, 更に simulated annealing の考えも導入されている²⁴⁾. また, 同時期に Johnson も同様のプロセスをとる, *Iterated Lin-Kernighan* と呼ばれる ILS を提案し, 2000 都市規模問題の最適解を得たことを報告した¹⁷⁾. 上述したこれらの ILS では, 局所最適解から脱出し, 他の近似解へ移動する技法として *double-bridge 4-change move* (double-bridge) が用いられている. この技法は, 与えられた一つの局所最適解に対して, ランダムに四つの枝を排除し, 非逐次的に他の枝と置き換えるものであるため, TSP の 2-Opt 法, 3-Opt 法, LK 法などでは, 生成できないような近傍操作として知られている. 従って, この技法によって得られた近似解から LK 法などの局所探索法を繰り返し適用することが可能となり, より優れた近似解, または最適解への接近を効率的に達成可能な解法となる. その他, この種の技法として, Condenotti らの方法¹⁰⁾ も知られている.

Merz と Freisleben²⁵⁾ は, 特別な場合に Iterated Lin-Kernighan となる遺伝的局所探索法 (多くの候補解を有する) を提案した. 彼らの方法は, その探索法内で TSP の探索空間構造^{8, 9)} を利用できる操作を持ち, 1996 年, IEEE の開催する最適化に関する TSP のコンテストでチャンピオンとなった. これに対して, Katayama と Narihisa²⁰⁾ は, 遺伝的反復局所探索法 (genetic iterated local search) と呼ばれる, 遺伝的ア

ルゴリズムと ILS の混合と解釈されるメタ戦略を提案した。このメタ戦略は、LK 法を組み込み、二つの解のみを用いることで TSP の構造化された地形を利用する方法であり、少ない候補解が用いられたにも関わらず、それまでに知られている TSP の強力なメタ戦略の性能を上回る良好な結果を得た。これにより、多くの候補解を持つ集団ベースの解法でなくとも、十分な性能が得られることが示された²¹⁾。その他、TSP に対して比較的良好な結果が得られていたメタ戦略として、Asparagos96 と呼ばれる並列処理型の GA¹⁴⁾、Guided local search³¹⁾、Edge assembly crossover を有した遺伝的アルゴリズム²⁹⁾、タブー探索法¹²⁾、蟻システム¹¹⁾や Iterative Partial Transcription²⁷⁾などがあげられる。

この種のメタ戦略では組み込む局所探索法の性能が重要であるとされる。最新の LK 法に関する研究として文献¹⁵⁾があり、TSP の解法で利用可能なデータ構造に関しては文献¹³⁾を参照されたい。更に注目すべき最新の研究報告として、Applegate, Cook, Rohe⁷⁾による、TSP に対する Chained Lin-Kernighan 法と呼ばれる ILS がある。現在、TSP のベンチマーク問題を集めた TSPLIB³⁰⁾において、最適解の保証がなされた最大規模の TSP は、13,509 都市の問題例 (usa13509.tsp)⁶⁾までであるが、LK 法を有する Applegate らの ILS は、最大 25,000,000 都市 (2500 万都市) の TSP に対しても適用可能であると共に、64 ビットの IBM RS6000 ワークステーション (300MHz Pentium II ワークステーションよりも約 1.2 倍程度高性能である) を用いて、その問題例の最適解値とされる期待値から 1%以内の解を 24CPU 時間内 (約 0.3%の解は約 8 日の CPU 時間) で求められ得ることが報告された。この結果は、長い歴史を持つ TSP の近似解法研究の中では最高峰の結果であると言える。なお、2000 年 6 月から、D.S. Johnson, L. McGeoch, F. Glover, C. Rego が組織委員となり、TSP を題材とした第 8 回 DIMACS Implementation Challenge が行われている。詳細については、¹⁹⁾を参照されたい。

4. グラフ分割問題

上述の TSP と並び、多くの研究がなされてきた組合せ最適化問題として、グラフ分割問題 (graph partitioning problem, GPP) がある。GPP とは、無向グラフ $G = (V, E)$ ($V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$: 頂点の集合, $E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$: 枝の集合) が与えられた時、頂点集合 V を k 個からなる部分集合 $P^k = \{C_1, C_2, \dots, C_k\}$ に分割し、各部分集合に跨る枝数の和を最小にする問題である。但し、各部分集合に含まれる頂点は互いに素 ($C_1 \cup C_2 \cup \dots \cup C_k = V$, $C_1 \cap C_2 \cap \dots \cap C_k = \phi$) とすると共に、各部分集合に含まれる頂点の数 $|C_1| = |C_2| = \dots = |C_k|$ を等しく (または、ほぼ等しく) するという制約を満たさなければならない。なお、分割数 k を 2 とする分割 P^2 の問題は、グラフ 2 分割問題 (graph bi-partitioning problem, GBP) と呼ばれる。GPP 及び GBP は、VLSI レイアウト、ネットワーク分割、並列計算、プロセッサスケジューリング、画像処理やパターン認識などの多くの応用を有する³²⁾。

GBP に対する厳密解法の研究は、分枝限定法が主に行われており、約 100 個の頂点からなるグラフ程度までの報告がある⁴²⁾。また、semidefinite programming 等を組合せた cutting plane をベースにする分枝限定法では、130 頂点程度の問題例に対して報告がなされた³⁸⁾。このような状況から、更に大規模な GBP に対しては、高品質な近似解を求めるためのメタ戦略にもとづく多くの解法が提案されている。それらの多くは、TSP 同様、局所探索法を拡張したものが多く、そのような局所探索法として、Kernighan-Lin の方法 (KL 法)⁴⁰⁾や Fiduccia-Mattheyses の方法 (FM 法)³⁶⁾が良く知られている。KL 法は、ある実行可能な解が与えられた時、各部分集合に跨る枝数の和 (cut size) を最も少なくするような (または、一時的には cut size が最も増加しないような)、二つの頂点を各部分集合から一点ずつ選び、それらのスワップ操作を、タブー探索法的な探索の限定を加えると共に繰り返すものである。FM 法も類似したアイデアにもとづくが、選ばれる頂点は一つとなる。これに加えて FM 法では、効率的な探索を実現可能とするデータ構造が利用されている。KL 法では、各繰返し過程において $O(|E| \log |E|)$ 時間を費やしていたのに対して、FM 法では、それを用いることにより $O(|E|)$ 時間に短縮できることが知られている。今日の多くのメタ戦略では、そのデータ構造 (その他のものも多々提案されている) を用いてアルゴリズムの実装がなされている。

GBP に対する代表的なメタ戦略として、アニーリング法³⁷⁾、遺伝的局所探索法^{34, 42, 44, 41)}、タブー探索法^{33, 35)}、Martin らの ILS²⁴⁾などがある。Kim と Moon⁴¹⁾は、文献³⁴⁾で開発された KL 法ベースの高性能な局所探索法を組み込んだ遺伝的局所探索法により、平均的に高品質な解を比較的短時間に算出可能であることを報告した。また、分割数 k を 2 以上とする GPP に対してもそのようなメタ戦略が存在する。例えば、

文献³⁹⁾では、METIS⁴³⁾をベースにしたアルゴリズムを用いて、かなり大規模な問題例をも扱っている。

5. 二次割当問題

二次割当問題 (quadratic assignment problem, QAP) とは、 $n \times n$ の二つの行列 $\mathbf{A} = (a_{ij})$ と $\mathbf{B} = (b_{ij})$ が与えられた時、次の目的関数

$$f(\pi) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{\pi(i)\pi(j)} \quad (4)$$

を最大化する順列 π を求める問題である。なお、 n は facility 及び location の数、 a_{ij} は location i と location j の間の距離、 b_{kl} は facility k から facility l への原料の流れ、 π は長さ n の順列である。

QAP は、上述の TSP や GPP のスペシャルケースとして知られており、多くの応用を有する問題である。例えば、電気回路での backboard wiring やタイプライター等のキーボード設計、病院建築や大学等での建築場所の決定及び工学設計などが知られ、最近では生物学での QAP の応用も行われている。

QAP に対しては、数多くのメタ戦略が報告されている。これらのメタ戦略については、文献⁴⁶⁾に最新のものが参照されている。QAP も TSP 同様、QAPLIB⁴⁵⁾と呼ばれるベンチマーク問題を集めたライブラリが準備されている。Merz らは、QAPLIB から取得可能な $n=19 \sim 256$ の 16 問題例に対して今までに良好な結果を報告した 5 つの高性能な解法 (Robust Tabu Search, Reactive Tabu Search, Fast Ant Colony, Simulated Annealing, Min-Max Ant System) と Merz らの提案する Memetic Algorithm (MA, 本質的には遺伝的局所探索法と同じもの) との比較を数値実験により実施した。その結果、MA は他の解法よりも良好な解を算出できることが示された。この MA は、QAP の地形解析により、その地形を巧く利用するような交叉操作が加えられている。また、地形が構造化されていないような問題例を解く場合には、そのような交叉ベースの MA よりも突然変異ベースの MA の方が良好な結果を算出できることが報告された。

6. フローショップスケジューリング問題

スケジューリング問題には多くの種類があるが、ここでは、総作業時間最小・順列型のフローショップスケジューリング問題 (permutation flow-shop scheduling problem, PFSP) を取り上げる。通常、PFSP は $n/m/P/C_{max}$ と表現される。ここで、 n は仕事数、 m は機械数であり、 n 個の仕事 J_1, \dots, J_n は m 台の機械 M_1, \dots, M_m 上で仕事によらず同一の順序で処理される。各仕事の各機械上での処理は作業と呼ばれ、各機械は一度に高々一つの仕事を中断することなしに、定められた処理時間をかけて処理する。記号 P は各機械が各仕事を処理する順序が機械によらないことを表し、その場合に完成されたスケジュールは n 個の仕事の順列によって一意的に表される。PFSP の目的は、すべての仕事を処理するために必要となる時間 (総作業時間, makespan) を最小化することである。これを記号 C_{max} で表す。

FSP に対しても多くのメタ戦略が報告されている。その中で最も注目すべきものは、Yamada と Reeves の遺伝的局所探索法である^{48, 47)}。彼らは、PFSP の地形を解析し、探索空間に大谷構造^{8, 9)}が発現することを明らかにした。この大谷構造を巧みに利用するための交叉法を開発し、遺伝的局所探索内に組み込んだ。それによって、効率的に良好な探索点に到達可能であることが示され、構造化された地形を利用する解法の有効性を報告した。彼らの解法の重要事項は、遺伝的局所探索法で保持される集団内の比較的良好な解の内、その二つの解の間を巧みにたどることで、その両者の間に更に良好な解が存在することを明らかにしたことと、それを PFSP に対して達成可能とする巧妙な交叉法を開発したことである。この交叉法は、Path Relinking³⁾の一種と見なすことができる。このような観点から、他の解法で利用されていた操作をそれとは異なる解法の内部で巧く利用し、良好な結果を算出できることは、各メタ戦略の枠に捕われないメタ戦略自身の柔軟な魅力の一つとも言える。

他のスケジューリング問題として、PFSP を更に難しくした、ジョブショップスケジューリング問題が良く知られており、その問題においても大谷構造が存在するかどうか非常に興味深い。

7. 多次元ナップザック問題

多次元ナップザック問題 (multidimensional knapsack problem, MKP) は、 a_{ij} , c_j と b_i ($i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$) が与えられた時、次の目的関数

$$\text{maximise} \quad \sum_{j=1}^n c_j x_j, \quad (5)$$

$$\text{subject to} \quad \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (6)$$

$$x_j \in \{0, 1\}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (7)$$

を最大化する解 x を求める問題 (0-1 整数計画問題) である。

a_{ij} , c_j と b_i は非負であり, 式 (6) の $a_{ij}x_j \leq b_i$ は “ナップザック制約” と呼ばれる. 式 (6) と式 (7) を満足する長さ n の 0-1 の解 x が実行可能解となる. MKP は, capital budgeting and resource allocation の分野における重要な応用を持つ. 例として, 分散コンピュータでのデータベースや allocating processors, project selection and cargo loading, カuttingストックなどの問題があげられる. MKP は, NP-困難であるが, $m = 1$ の問題では, n が数千変数程度の問題規模であれば, 最適解が効率的に得られることが知られている⁴⁹⁾. しかしながら, m が大きな場合では, 効率的に最適解を導き得る厳密解法は存在しない. 従って, 多くの近似解法が $m > 1$ 以上の MKP に対して提案されてきた.

MKP に対する近似解法の研究は, 1960 年代から始まっている. 今もなお良く知られる古典的な解法として, Senju と Toyoda⁶⁶⁾ や Loulou と Michaelides の貪欲的な解法⁶¹⁾ がある. 1980 年代に入り, Senju-Toyoda の解法を拡張したものとして Magazine-Oguz の近似解法⁶²⁾ も良く知られている. また, Pirkul⁶³⁾ は, w_i を制約 i に対する代理乗数 (surrogate multiplier) とし, $c_j / \sum_{i=1}^m w_i a_{ij}$ から得られる情報を用いてナップザック制約を満足する良質の実行可能解を見つける近似解法を提案した. その他の研究として文献^{53, 54, 55, 59, 67)} などがある. 1980 年代後半から, 多くのメタ戦略が提案されてきた^{52, 56, 58, 59, 60, 51, 64, 65)}. 特に注目すべき研究は, Chu と Beasley による遺伝的アルゴリズム⁵¹⁾ である. 彼らは, 古典的な MKP の問題例や 500 変数までの新しいベンチマーク問題例を ORLIB⁵⁰⁾ から取得可能とし, 500 変数規模の問題例までに対して効率的に良質な近似解が得られることを示した. なお, Glover⁵⁷⁾ によると, 彼らのグループでは $n=2500$, $m=100$ となる大規模な問題例に対してタブー探索法などのメタ戦略を検討しているようである.

8. 集合被覆問題

集合被覆問題 (set covering problem, SCP) とは, a_{ij} , c_j ($i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$) が与えられた時, 次の目的関数

$$\text{minimize} \quad \sum_{j=1}^n c_j x_j, \quad (8)$$

$$\text{subject to} \quad \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \geq 1, \quad i = 1, \dots, m, \quad (9)$$

$$x_j \in \{0, 1\}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (10)$$

を最小化する解 x を求める問題である。

この SCP の目的関数式や制約式を変更することにより他の最適化問題となる. 例えば, 式 (8) の c_j を取り除くことで, Unicost の SCP となり, 式 (9) の制約を更に強めた $\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = 1$ とすることで, SCP は集合分割問題 (set partitioning problem) となる. この種の変形問題も含め, SCP は上述の MKP と同様に, さまざまな応用例が存在するが, 最も良く知られたものとして, 飛行機や電車などの Crew Scheduling があげられる. そのため, 多くの厳密解法^{68, 69)} や近似解法^{70, 74)}, 遺伝的アルゴリズム⁷²⁾ などが提案されてきた. 最近, 特に注目された近似解法として, Caprara, Fischetti and Toth による Lagrangian-based 解法⁷³⁾ があり, $m=5,000$, $n=1,000,000$ までの問題例までに対して極めて良好な結果が報告された. なお, Unicost の SCP に対しては, Grossman ら⁷⁵⁾ による幾つかの近似解法の比較研究がある. また, Marchiori ら⁷⁶⁾ は貪欲法をベースにした反復解法を提案し, 文献⁷⁵⁾ で報告された既知の最良解を上回る良好な結果を得た. SCP に対しては, メタ戦略に属する解法の報告は比較的少なく, 今後, より大規模な問題例に対するメタ戦略に関して検討する余地が残る最適化問題の一つであると考えられる.

9. バイナリー二次計画問題

バイナリー二次計画問題 (unconstrained binary quadratic programming problem, BQP) とは, $n \times n$ の対称行列 $Q = (q_{ij})$ が与えられた時, 次の目的関数

$$f(x) = x^t Q x = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n q_{ij} x_i x_j, \quad x_i \in \{0, 1\} \forall i = 1, \dots, n \quad (11)$$

を最大化する解 x を求める問題である.

BQP は, CAD 問題, マシンスケジューリング問題, capital budgeting and financial analysis 問題, traffic message management 問題, 分子構造問題などの多くの応用例を有し, 更にさまざまな組合せ最適化問題と同等であることが知られている. そのような組合せ最適化問題として, 最大カット問題, 最大クリーク問題, 最大頂点パッキング問題, 最小頂点被覆問題, 最大独立集合問題などがある⁷⁸⁾.

1998 年の F. Glover らが行った BQP に対するタブー探索法⁷⁹⁾の発表以来, BQP に対するメタ戦略の研究が盛んになってきた^{78, 82, 77)}. 従って, BQP に対するメタ戦略の研究は比較的浅く, まだ始まったばかりである. しかしながら, Merz らの研究グループや Katayama らのグループによって, BQP に対するメタ戦略の急速な発展が見られた. 以下では, 主にそれらの発展事項について述べる.

Merz らは, 1999 年の遺伝的・進化的計算に関する国際会議 (GECCO) で, BQP に対する遺伝的アルゴリズムの発表⁸³⁾を行った. そこでは, 2500 変数の問題例までの大規模な BQP を対象に新しい最良解の算出に成功した. その後, Katayama らは, 高性能なアニーリング法⁸⁰⁾を開発し, Merz らの得た最良解値を更に上回る解が極めて短時間に算出可能であることを報告した. 更に Katayama, Tani, Narihisa⁸¹⁾は, 2000 年の GECCO で, BQP に対して過去に報告されたメタ戦略を大幅に上回る極めて高性能な遺伝的局所探索法 (GLS) を発表した. その GLS は, 局所探索の過程で, TSP や GBP に対して提案されていた LK 法または KL 法のアイデアを用いており, Merz らの開発したもの⁸⁴⁾よりもかなり強力である. これに加えてその GLS では, BQP の地形及びその特徴を考慮に入れており, Katayama らのアニーリング法により既に得られていた, 既知の最良解を高い頻度で算出可能とするものであった. BQP に対する以上の高性能なメタ戦略の開発は, 今後の BQP に対する研究及び BQP に強く関連する多くの組合せ最適化問題に対して重要な指針を与えたと考えられる.

10. 考 察

メタ戦略は, さまざまな最適化問題に適用可能な枠組みとして捉えることができる. 無論, メタ戦略の多くは, さまざまな探索操作の融合によって成り立つので, 各最適化問題に対してうまく働くような工夫を各操作に対して巧みに加えることはメタ戦略開発者の自由とされている. 以上を踏まえ, 上述の各サーベイを通し, メタ戦略の範疇に属する解法に共通する事項について考える.

その共通事項として重要なことは, 問題固有の特徴を利用する探索操作をメタ戦略内に取り入れることである. その一つとして, 問題の探索空間内の地形を利用することがあげられる. このような ad-hoc アルゴリズムこそが, 各最適化問題に対して良好な結果をもたらすメタ戦略となり得ると考えられ, 今後, 高性能なメタ戦略開発の主要な一テーマとして興味深い. 最後に, Wolpert と Macready⁸⁵⁾は, 「No Free Lunch Theorems for Optimization」という論文を発表し, 注目された. この論文から言えることは, 対象とする最適化問題のその特徴をうまく利用する解法がその問題に対して最も適した解法であることを指している.

11. むすび

本論文では, さまざまな最適化問題を取り上げ, 近年良好な結果を示したメタ戦略の範疇に属する解法についてサーベイした. これらのメタ戦略に共通する事項は, 問題の特徴を利用する探索操作を有することであると考えられ, その一つとして問題の探索空間内の地形を利用することがあげられる. このような ad-hoc アルゴリズムは, 現在のところ, 良く知られた幾つかの最適化問題に対して良好な結果をもたらす解法となっている. しかしながら, そのような特徴を考慮に入れたメタ戦略は, 数多く存在する困難な最適化問題のごく一部に対してでしか検討されていないのが現状である. このような状況を考慮すると, 今後,

多く存在する他の最適化問題の個々に適した解法が開発され、更に高性能なメタ戦略が誕生する可能性は決して低くないと考えられる。

参考文献

- 1) V. Černý, "Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm," *Journal of Optimization Theory and Applications*, vol.45, pp.41–51, 1985.
- 2) F. Glover, "Tabu search – part I," *ORSA Journal on Computing*, vol.1, no.3, pp.190–206, 1989.
- 3) F. Glover and M. Laguna, "Tabu search," Kluwer Academic Publishers, 1997.
- 4) D.E. Goldberg, "Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning," Addison-Wesley Publishing Company Inc., 1989.
- 5) S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt Jr, and M.P. Vecchi, "Optimization by simulated annealing," *Science*, vol.220, pp.671–680, 1983.
- 6) D. Applegate, R. Bixby, V. Chvatal, and W. Cook, and, "On the solution of traveling salesman problems," *Documenta Mathematica Journal DMV Extra Volume ICM III*, pp.645–656, 1998.
- 7) D. Applegate, W. Cook, and A. Rohe, "Chained Lin-Kernighan for large traveling salesman problems," taken from http://www.caam.rice.edu/~keck/reports/chained_lk.ps, Jul. 2000.
- 8) K.D. Boese, "Cost versus Distance in the traveling salesman problem," Technical Report TR-950018, UCLA CS Department, 1995.
- 9) K.D. Boese, A.B. Kahng, and S. Muddu, "A new adaptive multi-start technique for combinatorial global optimizations," *Operations Research Letters*, vol.16, pp.101–113, 1994.
- 10) B. Codenotti, G. Manzini, L. Margara, and G. Resta, "Perturbation: An efficient technique for the solution of very large instances of the Euclidean TSP," *INFORMS Journal on Computing*, vol.8, pp.125–133, 1996.
- 11) M. Dorigo and L. M. Gambardella, "Ant Colony System: A cooperative learning approach to the traveling salesman problem," *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, vol.1, no.1, 1997.
- 12) C.-N. Fiechter, "A parallel tabu search algorithm for large traveling salesman problems," *Discrete Applied Mathematics*, vol.51, pp.243–267, 1994.
- 13) M.L. Fredman, D.S. Johnson, L.A. McGeoch, and G. Ostheimer, "Data structures for traveling salesmen," *Journal of Algorithms*, vol.18, pp.432–479, 1995.
- 14) M. Gorges-Schleuter, "Asparagos96 and the traveling salesman problem," *Proc. of the 1997 IEEE International Conference on Evolutionary Computation*, pp.171–174, 1997.
- 15) K. Helsgaun, "An effective implementation of the Lin-Kernighan traveling salesman heuristic," *European Journal of Operational Research*, vol.126, pp.106–130, 2000.
- 16) I. Hong, A.B. Kahng, and B.-R. Moon, "Improved large-step Markov chain variants for the symmetric TSP," *Journal of Heuristics*, vol.3, no.1, pp.63–81, 1997.
- 17) D.S. Johnson, "Local optimization and the traveling salesman problem," *Proc. 17th. Colloquium on Automata, Lang., and Prog.*, pp.446–461, 1990.
- 18) D.S. Johnson and L.A. McGeoch, "The traveling salesman problem: A case study," *Local Search in Combinatorial Optimization*, John Wiley & Sons, pp.215–310, 1997.
- 19) D.S. Johnson, "8th DIMACS Implementation Challenge: The Traveling Salesman Problem," <http://www.research.att.com/~dsj/chtsp/>, Jun. 2000.
- 20) K. Katayama and H. Narihisa, "Iterated local search approach using genetic transformation to the traveling salesman problem," *Proc. of the 1999 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO-99)*, Orlando, Florida, USA, Jul.13–17, vol.1, pp.321–328, 1999.
- 21) K. Katayama and H. Narihisa, "Performance of genetic approach using only two individuals," *Proc. of the 1999 IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics (SMC-99)*, Tokyo, Japan, Oct.12–15, vol.1, pp.I-677–I-682, 1999.
- 22) S. Lin and B.W. Kernighan, "An effective heuristic algorithm for the traveling salesman problem," *Operations Research*, vol.21, pp.498–516, 1973.
- 23) O. Martin, S.W. Otto, and W. Felten, "Large-step Markov chains for the TSP incorporating local search heuristics," *Operations Research Letters*, vol.11, pp.219–224, 1992.

- 24) O.C. Martin, S.W. Otto, and E.W. Felten, "Combining simulated annealing with local search heuristic," *Annals of Operations Research*, vol.63, pp.57-75, 1996.
- 25) P. Merz and B. Freisleben, "Genetic local search for the TSP: New results," *Proc. of the 1997 IEEE International Conference on Evolutionary Computation*, pp.159-164, 1997.
- 26) P. Merz and B. Freisleben, "Fitness landscapes and memetic algorithm design," *New Ideas in Optimization*, (D. Corne, M. Dorigo, and F. Glover, eds.), McGraw-Hill, 1999. (to appear)
- 27) A. Möbius, B. Freisleben, P. Merz, and M. Schreiber, "Combinatorial optimization by iterative partial transcription," *Physical Review E*, vol.59, no.4, pp.4667-4674, 1999.
- 28) H. Mühlenbein, "Evolution in time and space - the parallel genetic algorithm," *Foundations of Genetic Algorithms*, (G. Rawlins, ed.), Morgan-Kaufmann, pp.316-337, 1991.
- 29) Y. Nagata and S. Kobayashi, "Edge assembly crossover : A high-power genetic algorithm for the traveling salesman problem," *Proc. 7th International Conference on Genetic Algorithms*, pp.450-457, 1997.
- 30) G. Reinelt, <http://www.iwr.uni-heidelberg.de/iwr/comopt/soft/TSPLIB95/TSPLIB.html>
- 31) C. Voudouris and E. Tsang, "Guided local search and its application to the traveling salesman problem," *European Journal of Operational Research*, vol.113, pp.469-499, 1999.
- 32) C.J. Alpert, "Multi-way graph and hypergraph partitioning," Ph. D. Thesis, University of California at Los Angeles (UCLA), taken from <http://nexus6.cs.ucla.edu/~cheese/papers/thesis.ps> , 1996.
- 33) R. Battiti and A. Bertossi, "Greedy, prohibition, and reactive heuristics for graph-partitioning," *IEEE Transactions on Computers*, vol.48, no.4, pp.361-385, 1999.
- 34) T.N. Bui and B.-R. Moon, "Genetic Algorithms and Graph Partitioning," *IEEE Transactions on Computers*, vol.45, no.7, pp.841-855, 1996.
- 35) M. Dell'Amico and M. Trubian, "Solution of large weighted equicut problems," *European Journal of Operational Research*, vol.106, pp.500-521, 1998.
- 36) C.M. Fiduccia and R.M. Mattheyses, "An linear-time heuristic for improving network partitions," *Proc. of the 19th ACM/IEEE Design Automation Conference*, pp.175-181, 1982.
- 37) D.S. Johnson, C.R. Aragon, L.A. McGeoch, and C. Schevon, "Optimization by simulated annealing: An Experimental Evaluation; Part I, graph partitioning," *Operations Research*, vol.37, no.6, pp.865-892, 1989.
- 38) S.E. Karisch, F. Rendl, and J. Clausen, "Solving graph bisection problems with semidefinite programming," Technical Report DIKU-TR-97/9, Department of Computer Science, University of Copenhagen, 1997.
- 39) G. Karypis and V. Kumar, "A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs," *SIAM Journal on Scientific Computing*. (to appear)
- 40) B.W. Kernighan and S. Lin, "An efficient heuristic procedure for partitioning graphs," *Bell System Technical Journal*, vol.49, pp.291-307, 1970.
- 41) Y.-H. Kim and B.-R. Moon, "A hybrid genetic search for graph partitioning based on lock gain," *Proc. of the Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO-2000)*, pp.167-174, 2000.
- 42) P. Merz and B. Freisleben, "Fitness landscapes, memetic algorithms and greedy operators for graph bipartitioning," *Evolutionary Computation*, vol.8, no.1, pp.61-91, 2000.
- 43) METIS, <http://www-users.cs.umn.edu/~karypis/metis/> .
- 44) A.G. Steenbeek, E. Marchiori, and A.E. Eiben, "Finding balanced graph bi-partitions using a hybrid genetic algorithm," *Proc. of the IEEE International Conference on Evolutionary Computation (ICEC-98)*, pp.90-95, 1998.
- 45) QAPLIB, <http://www.opt.math.tu-graz.ac.at/~karisch/qaplib/> .
- 46) P. Merz and B. Freisleben, "Fitness landscape analysis and memetic algorithms for the quadratic assignment problem," *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* (to appear), a preprint can be taken from the web page of P. Merz <http://www.informatik.uni-siegen.de/~pmerz/publications.html> .
- 47) C.R. Reeves and T. Yamada, "Genetic algorithms, path relinking and the flowshop sequencing problem," *Evolutionary Computation*, vol.6 no.1, Spring 1998.
- 48) T. Yamada and C.R. Reeves, "Permutation flowshop scheduling by genetic local search," *Proc. of the 2nd IEEE/IEEE International Conference on Genetic Algorithms in Engineering Systems (GALESIA-97)*, pp. 232-238, 1997.

- 49) E. Balas and E. Zemel, "Solving large zero-one knapsack problems," *Operations Research*, vol.28, pp.1130–1154, 1980.
- 50) J.E. Beasley, "OR-Library: distributing test problems by electronic mail," *Journal of the Operational Research Society*, vol.41, no.11, pp.1069–1072, 1990.
- 51) P.C. Chu and J.E. Beasley, "A genetic algorithm for the multidimensional knapsack problem," *Journal of Heuristics*, vol.4, pp.63–86, 1998.
- 52) A. Drexler, "A simulated annealing approach for the multiconstraint zero-one knapsack problem," *Computing*, vol.40, pp.1–8, 1988.
- 53) A. Freville and G. Plateau, "Heuristics and reduction methods for multiple constraints 0-1 linear programming problems," *European Journal of Operational Research*, vol.24, pp.206–215, 1986.
- 54) A. Freville and G. Plateau, "An efficient preprocessing procedure for the multidimensional 0-1 knapsack problem," *Discrete Applied Mathematics*, vol.49, pp.189–212, 1994.
- 55) B. Gavish and H. Pirkul, "Efficient algorithms for solving multiconstraint zero-one knapsack problems to optimality," *Mathematical Programming*, vol.31, pp.78–105, 1985.
- 56) F. Glover, and G.A. Kochenberger, "Critical event tabu search for multidimensional knapsack problems," *Metaheuristics: Theory and Applications*, Kluwer Academic Pub., pp.407–428, 1995.
- 57) F. Glover, Personal Communication, Feb. 2000.
- 58) S. Hanafi, A. Freville, A. El Abdellaoui, "Comparison of heuristics for the 0-1 multidimensional knapsack problem," *Metaheuristics: Theory and Applications*, Kluwer Academic Pub., pp.449–466, 1995.
- 59) S. Hanafi and A. Freville, "An efficient tabu search approach for the 0-1 multidimensional knapsack problem," *European Journal of Operational Research*, vol.106, pp.659–675, 1998.
- 60) S. Khuri and T. Bäck, and J. Heitkötter, "The zero-one multiple knapsack problem and genetic algorithms," *Proc. of the 1994 ACM Symposium on Applied Computing*, pp.188–193, 1994.
- 61) R. Loulou and E. Michaelides, "New greedy-like heuristics for the multidimensional 0-1 knapsack problem," *Operations Research*, vol.27, pp.1101–1114, 1979.
- 62) M.J. Magazine and O. Oguz, "A heuristic algorithm for the multidimensional zero-one knapsack problem," *European Journal of Operational Research*, vol.16, pp.319–326, 1984.
- 63) H. Pirkul, "A heuristic solution procedure for the multiconstraint zero-one knapsack problem," *Naval Research Logistics*, vol.34, pp.161–172, 1987.
- 64) G.R. Raidl, "An improved genetic algorithm for the multiconstrained 0-1 knapsack problem," *Proc. of the 5th IEEE Conference on Evolutionary Computation*, pp.207–211, 1998.
- 65) G.R. Raidl, "Weight-Codings in a genetic algorithm for the multiconstraint knapsack problem," *Proc. of the 1999 IEEE Congress on Evolutionary Computation*, pp.596–603, 1999.
- 66) S. Senju and Y. Toyoda, "An approach to linear programming with 0-1 variables," *Management Science*, vol.15, pp.196–207, 1968.
- 67) A. Volgenant and J.A. Zoon, "An improved heuristic for multidimensional 0-1 knapsack problems," *Journal of Operational Research Society*, vol.41, no.10, pp.963–970, 1990.
- 68) E. Balas and A. Ho, "Set covering algorithms using cutting planes, heuristics, and subgradient optimization: A computational study," *Mathematical Programming*, vol.12, pp.37–60, 1980.
- 69) J.E. Beasley, "An algorithm for set covering problem," *European Journal of Operational Research*, vol.31, pp.85–93, 1987.
- 70) J.E. Beasley, "A lagrangian heuristic for set-covering problems," *Naval Research Logistics*, vol.37, pp.151–164, 1990.
- 71) J.E. Beasley and K. Jørnsten, "Enhancing an algorithm for set covering problems," *European Journal of Operational Research*, vol.58, pp.293–300, 1992.
- 72) J.E. Beasley and P.C. Chu, "A genetic algorithm for the set covering problem," *European Journal of Operational Research*, vol.94, pp.392–404, 1996.
- 73) A. Caprara, M. Fischetti and P. Toth, "A heuristic method for the set covering problem," *Operations Research*, vol.47, no.5, pp.730–743, 1999.
- 74) V. Chvatal, "A greedy heuristic for the set covering problem," *Mathematics of Operations Research*, vol.4, pp.233–235, 1979.

- 75) T. Grossman and A. Wool, "Computational experience with approximation algorithms for the set covering problem," *European Journal of Operational Research*, vol.101, pp.81–92, 1997.
- 76) E. Marchiori and A.G. Steenbeek, "An iterated heuristic algorithm for the set covering problem," *Proc. of the 2nd Workshop on Algorithm Engineering (WAE-98)*, pp.155–166, 1998.
- 77) M.M. Amini and B. Alidaee, and G.A. Kochenberger, "A scatter search approach to unconstrained quadratic binary programs," *New Ideas in Optimization* (eds, D. Corne, M. Dorigo and F. Glover), McGraw-Hill, pp.317–329, 1999.
- 78) J.E. Beasley, "Heuristic algorithms for the unconstrained binary quadratic programming problem," *Technical Report, Management School, Imperial College, UK*, 1998.
- 79) F. Glover, G.A. Kochenberger, and B. Alidaee, "Adaptive memory tabu search for binary quadratic programs," *Management Science*, vol.44, no.3, pp.336–345, 1998.
- 80) K. Katayama and H. Narihisa, "Performance of simulated annealing-based heuristic for the unconstrained binary quadratic programming problem," *Preprint, 1999. (accepted for publication in European Journal of Operational Research)*
- 81) K. Katayama, M. Tani, and H. Narihisa, "Solving large binary quadratic programming problems by effective genetic local search algorithm," *Proc. of the 2000 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO-2000)*, Jul.8–12, Las Vegas, USA, pp.643–650, 2000.
- 82) A. Lodi, K. Allemand, and T.M. Liebling, "An evolutionary heuristic for quadratic 0-1 programming," *European Journal of Operational Research*, vol.119, pp.662–670, 1999.
- 83) P. Merz and B. Freisleben, "Genetic algorithms for binary quadratic programming," *Proc. of the 1999 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO-99)*, pp.417–424, 1999.
- 84) P. Merz and B. Freisleben, "Greedy and local search heuristics for unconstrained binary quadratic programming," *Technical Report No.99-01, Informatik-Berichte, 1999. (to appear in Journal of Heuristics)*
- 85) D.H. Wolpert and W.G. Macready, "No free lunch theorems for optimization," *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, vol.1, no.1, pp.67–82, 1997.

On Recent Metaheuristics

— Traveling Salesman, Graph Partitioning, Quadratic Assignment, Flow-shop Scheduling,
Multidimensional Knapsack, Set Covering, and Binary Quadratic Programming Problems —

Kengo KATAYAMA and Hiroyuki NARIHISA

*Department of Information and Computer Engineering,
Faculty of Engineering,
Okayama University of Science.
1 - 1 Ridai-cho, Okayama, 700-0005, Japan.*

(Received November 1, 2000)

Metaheuristics are considered to be a new algorithmic paradigm to obtain very good solutions within reasonable computation times for difficult optimization problems. In this survey, we briefly review recent metaheuristics for seven optimization problems: the Traveling Salesman, Graph Partitioning, Quadratic Assignment, Flow-shop Scheduling, Multidimensional Knapsack, Set Covering, and Binary Quadratic Programming problems, which are known to be NP-hard problems. For each problem, the most effective metaheuristics that obtained very good results are introduced. We also describe common features of the metaheuristics and promising perspectives on a design of high performance metaheuristics for future research.