

# 最大多様性問題に対する高性能な局所探索アルゴリズムの一考察

片山 謙吾・成久 洋之

岡山理科大学 工学部 情報工学科

(2002年11月1日 受理)

## 1. はじめに

工学などの分野で登場する実問題の多くは、組合せ最適化問題 (combinatorial optimization problems) としてモデル化される。これらの困難な問題の多くは NP-hard であり、大規模な問題に対する厳密解法 (exact methods) では実用的な時間内に厳密な最適解を算出することは不可能であると考えられている。従って、より効率的に最適解に近い解 (近似解) を求めようとする多種多様なアルゴリズムが試みられている。高性能かつ代表的なアルゴリズムとして、遺伝的局所探索法 (genetic local search, GLS), アニーリング法 (simulated annealing), タブー探索法 (tabu search), GRASP (greedy randomized adaptive search procedure) などが挙げられる。これらのアプローチを総称して、メタ戦略 (metaheuristics) と呼ぶ<sup>13)</sup>。メタ戦略 (メタヒューリスティックス, モダンヒューリスティックスなどとも呼ばれる) の研究は近年盛んに行われており、困難かつ大規模な最適化問題に対して高品質な近似解を実用的な時間内に算出可能とする唯一の戦略として考えられている。

メタ戦略全般における探索の基本的な考え方は実にシンプルである。その多くで採用される考え方は、集中化と多様化の2点である。これらをバランス良くアルゴリズム内で構成することが探索成功への鍵となる。集中化とは、ある解が与えられた時、その解の近くにさらに良好な解が存在することを仮定し、重点的にその解の周辺を探索する考え方である。一方、多様化とは、ある解が与えられた時、その解の周辺よりもさらに広い範囲へ探索の方向を拡げようとする考えである。多くの最適化問題では探索空間内に局所最適解が非常に多く存在し、その数は真の最適解の数よりも極めて多い。そのような観点から、探索における上述の集中化と多様化は実に自然な考え方だと言えるが、これらは相反する考え方であるため、そのバランスの決定や詳細な事項はアルゴリズム開発者に委ねられているのが現状である。

上述したメタ戦略に属する各アルゴリズムでは、集中化および多様化を目的とする操作が概念的に組み込まれている。しかしながら、高品質な解の算出が要求される場合、より高性能な集中化の操作や多様化の操作が必要になる。つまり、より高性能な集中化操作は巧みな近傍構造の導入によって良好な解を算出可能とし、より巧妙な多様化操作はより有望な未探索の空間へと探索を導くことが可能になることを意味する。加えて、各最適化問題に対する集中化や多様化操作の詳細なアルゴリズムは多くの場合に異なるため、各最適化問題専用の操作アルゴリズムの適用が必要になることが殆どである。

本論文では、最大多様性問題 (maximum diversity problem, MDP)<sup>1)</sup> に対する高性能な集中化の操作について考える。ここで言う集中化の操作とは「局所探索」の操作を指し、上述したように多くのメタ戦略アルゴリズムで必要不可欠なものである。ある最適化問題に対して局所探索 (local search) を構成するための最重要事項は、その最適化問題に対して有効に働く近傍構造 (neighborhood structure) の決定または選択である。MDP に対して知られている最もシンプルな近傍構造の一つとして 2-flip 近傍が挙げられ、この近傍を利用した局所探索法を 2-flip 局所探索法と呼ぶ。しかしながら、より巧妙なアイデアを利用することで 2-flip 局所探索法よりもさらに強力な局所探索法を開発できると考えられる。我々が採用するアイデアは、Lin と Kernighan により提唱された可変深度探索 (variable depth search, VDS) のアイデア<sup>6, 9)</sup> であり、グラフ分割問題や巡回セールスマン問題に対して適用され、極めて良好な結果をもたらしたものである。本論文では MDP に対して VDS ベースの  $k$ -flip 局所探索法を構成する際の詳細事項について記述する。

<sup>1)</sup>最大多様性問題の「多様性」と上述したメタ戦略での「多様化」は対象とする多様の意味が異なることに注意。

## 2. 最大多様化問題

本論文で対象とする最大多様性問題 (MDP) を以下に示す.  $n \times n$  の対象行列  $d_{ij}$  (ただし,  $d_{ij} = d_{ji}$ ,  $d_{ii} = 0$  である) とサイズ  $m$  ( $n > m > 1$ ) が与えられた時, 次式を最大化する解  $x$  を求める問題である.

$$\begin{aligned} \text{maximize } f(x) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n d_{ij} x_i x_j, \\ \text{subject to } &\sum_{i=1}^n x_i = m, \\ &x_i \in \{0, 1\}, \forall i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (1)$$

MDP には数多くの応用例が存在する. 幾つかの例として, 移民入国政策, 委員構成問題, カリキュラム作成, マーケット計画やポートフォリオ選択, VLSI 設計, 試験スケジュールリング, 環境保護バランス問題, 医療処置問題, 分子構造設計, 宝石などのパネル配置問題など多岐にわたる<sup>2, 7, 8, 11</sup>).

MDP の最初のモデルは, Kuo ら<sup>8</sup>) によって示された. 彼らは, MDP における行列  $d_{ij}$  の幾つかの値が非負であろうがあるまいが NP 困難であることを示し, 整数計画法に基づくアプローチにより問題解決を試みた. MDP は NP 困難であるので, 厳密解法に基づくアルゴリズムでは問題サイズの大規模化に伴い膨大な計算時間を必要とする. 従って, 幾つかの近似解法が提案されている. Ghosh<sup>3</sup>) は, greedy randomized adaptive search procedure (GRASP) を提案し, 40 変数までの問題例に対して適用を行った. この GRASP の局所探索過程では 2-flip 近傍が採用され, 2-flip 局所探索法が利用されている. Glover ら<sup>2</sup>) は二つの constructive ヒューリスティックアルゴリズムと二つの destructive ヒューリスティックアルゴリズムを示し, 30 変数までの問題例に対してテストした. Kochenberger ら<sup>7</sup>) はランダムに生成した 100 変数から 1000 変数までの MDP に対して実行不可能領域空間も探索対象とするタブー探索法の適用を行った. このタブー探索法で利用される近傍は 1-flip 近傍である.

## 3. MDP に対する局所探索法の諸概要

局所探索の基本戦略は, 与えられた解  $x$  に対して, ある近傍操作を加えることでその近傍  $N(x)$  から新しい解  $x'$  を生成し, その生成された解  $x'$  が与えられていた解  $x$  よりも良い評価値を有すれば, その解  $x'$  を  $x$  とみなし, 再び近傍操作を施すことで近傍  $N(x)$  から新しい解を生成および評価する改善処理を繰り返すものである. 局所探索法 (解改善法) の終了条件は解  $x$  において  $N(x)$  の中に改善解が存在しなくなった時とされ, この  $x$  は近傍  $N$  のもとで局所的に最適な解 (局所最適解) となる. つまり, 局所探索法により得られる局所最適解の質は局所探索法で使用される近傍操作に大きく依存し, そこで使用される近傍操作のもとでこれ以上に評価値の良い解は存在しないことを意味する. 従って, 近傍操作 (近傍構造) の決定は局所探索法自体の性能に大きな影響を与えると言える.

局所探索法の開発では, 近傍構造の決定だけでなく, 解の評価値, 解の表現, 近傍解の評価値の計算などの決定も重要とされている. 以下では, MDP に対するそれらの諸概要について記述すると共に標準的な近傍構造について述べる.

### 3.1 解の評価値および解の表現

MDP に対する解の評価値は, 式 (1) によって評価する.

MDP に対する解  $x$  は長さ  $n = |N|$  (なお,  $N = \{1, 2, \dots, n\}$ ) の 0-1 表現とする. つまり,  $i$  番目のビット (要素) に 0 もしくは 1 があり, これを  $x_i = 0$  または 1 と表記する.

さらに本研究では, 次の表現法も上の 0-1 表現とあわせて利用する.  $x_i = 1$  ( $\forall i \in N$ ) の要素の集合を  $S_1$  とする. また,  $x_i = 0$  ( $\forall i \in N$ ) の要素の集合を  $S_0$  とする. この表現においては  $S_1 \cup S_0 = N$  や  $S_1 \cap S_0 = \emptyset$  の関係が成り立つ. MDP における解の実行可能性は,  $\sum x_i = m$  ( $\forall i \in N$ ), つまり解  $x$  における 1 の数の和が  $m (= |S_1| = |N| - |S_0|)$  に等しい時に成立する.

### 3.2 近傍構造

近傍構造は局所探索法の性能を決定する最も重要な事項である。MDP に対しては 1-flip 近傍と 2-flip 近傍がある。

1-flip 近傍とは、解  $x$  が与えられた時、 $i$  番目の要素を 0 から 1 または 1 から 0 へ反転した際に生成可能な解集合と定義される ( $S_1$  の 1 要素を  $S_1$  から除き  $S_0$  に加えるか、またはその逆の操作によって生成可能な解の集合とも記述できる)。よって、実行可能解  $x$  が与えられた時、ある一つのビットの反転つまり 1-flip 近傍を一回施した場合に生じる解の実行可能性は保証されない。

2-flip 近傍とは、解  $x$  が与えられた時、 $S_1$  の 1 要素と  $S_0$  の 1 要素との交換によって生成可能な解集合と定義される。よって、実行可能解  $x$  が与えられた時、2-flip 近傍によって生成される近傍解も実行可能解となる。

### 3.3 1-flip 近傍解の評価値高速計算

局所探索法における近傍解の評価値の計算は、近傍解を生成する毎にその計算が必要となるため、局所探索自体の効率に大きく影響する。従って、近傍解の評価は効率的に高速に行うことが極めて重要になる。

特に、本研究で扱うような MDP は解の評価関数が 2 次形式であるため、一つの近傍解を生成・評価する毎に、式 (1) を用いて素直に計算したのでは毎回  $O(n^2)$  の計算時間量が必要となる。MDP に対して 1-flip 近傍を考える場合、現在解  $x$  と 1-flip 近傍解  $x'$  のハミング距離  $d_H$  は常に 1 ( $d_H(x, x') = 1$ ) である。従って、現在解から一度に生成可能な 1-flip 近傍解は  $n$  個となり、一つの近傍解生成に必要な手間が定数時間  $O(1)$  とすると、 $n$  個の近傍解の候補から最良の近傍解へ移動する一過程を考慮する場合、 $n$  回の近傍解評価が必要となる。素朴に  $O(n^2)$  時間の評価関数を利用するとすれば、 $n$  個の近傍解の全てを評価するためだけで  $O(n^3)$  時間を要する。

これを回避するために、現在解  $x$  と近傍解  $x'$  のそれぞれの評価値の差  $g (= f(x') - f(x))$  (ゲインと呼ぶ) を取る方法が有効であると考えられる。現在解  $x$  の  $j$  番目のビットを反転する 1-flip 近傍によって生成可能な 1-flip 近傍解のゲインは次の式により  $O(n)$  時間で計算可能である。

$$g_j = d_{jj}(\bar{x}_j - x_j) + 2 \sum_{i=1, i \neq j}^n d_{ij} x_i (\bar{x}_j - x_j), \quad (2)$$

ここで、 $\bar{x}_j$  は  $1 - x_j$  である。従って、 $n$  個の 1-flip 近傍解のゲインを計算するためには全体で  $O(n^2)$  となり、上述の  $O(n^3)$  時間よりも短縮できる。

さらにゲイン計算の効率化のために、現在ある  $n$  個の 1-flip 近傍解のそれぞれ  $n$  個のゲインと次の近傍解のためのゲインの差  $\Delta g_i$  ( $\forall i \in N$ ) の計算に基づいて、 $n$  個の全ゲインを線形時間で算出することが可能である。仮に  $j$  番目のビットの反転が行われるとすると、

$$g'_i = \begin{cases} -g_i & \text{if } i = j \\ g_i + \Delta g_i(j) & \text{otherwise} \end{cases} \quad \text{with} \quad \Delta g_i(j) = 2 d_{ij} (\bar{x}_i - x_i) (x_j - \bar{x}_j) \quad (3)$$

を用いて計算することにより、新たな  $n$  個の 1-flip 近傍解の全ゲインが  $O(n)$  時間で再計算できる<sup>10)</sup>。基本的に本論文での局所探索法では、上述した方法により、与えられた解 (現在解)  $x$  から 1-flip 近傍解のそれぞれのゲイン  $g_i$  を算出し、良好な近傍解  $x'$  へ移動を行うことでその解を再び現在解 ( $x = x'$ ) と置く。次の 1-flip 近傍解を評価するために、式 (3) によって以前の全ゲインから新しい全ゲインを再計算するプロセスを繰り返す。従って、一回のビット反転を施す度にゲインの再計算を行う必要がある。

### 3.4 $k$ -flip 近傍解の評価値計算

$k$  個のビットを一度に反転するような、一般化された、より大きなサイズの近傍を考える場合には、上述の 1-flip 近傍解の評価値の計算だけでは不十分である。ここでは  $k$ -flip 近傍のためのゲイン計算について示す。

仮に、1-flip 近傍解の全ゲインが既に計算され、かつ幾つかの異なる  $k$  個のビットを反転する場合 (配列  $\text{flip}[]$  に  $k$  個のビット番号があるとすると)、その  $k$ -flip 近傍解の評価値は次式により計算可能である。

$$\begin{aligned}
G &= g_\alpha && (1\text{-flip}) \\
&+ g_\beta + 2d_{\alpha\beta}(1-2x_\alpha)(1-2x_\beta) && (2\text{-flip}) \\
&+ g_\gamma + 2d_{\beta\gamma}(1-2x_\beta)(1-2x_\gamma) + 2d_{\gamma\alpha}(1-2x_\gamma)(1-2x_\alpha) && (3\text{-flip}) \\
&+ g_\delta + 2d_{\gamma\delta}(1-2x_\gamma)(1-2x_\delta) + 2d_{\delta\alpha}(1-2x_\delta)(1-2x_\alpha) + 2d_{\delta\beta}(1-2x_\delta)(1-2x_\beta) && (4\text{-flip}) \\
&\vdots && \vdots \\
&= \sum_{i=1}^k g_{\text{flip}[i]} + 2 \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i+1}^k d_{\text{flip}[i]\text{flip}[j]}(1-2x_{\text{flip}[i]})(1-2x_{\text{flip}[j]}) && (k\text{-flip}) \\
&\quad (1 < k \leq n, \text{flip}[ ] = \{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \dots\}).
\end{aligned}
\tag{4}$$

例えば、現在解  $x$  における  $\alpha$  番目と  $\beta$  番目のビットが一度に反転される場合 (2-flip 近傍を仮定している) のゲイン  $G$  は、 $g_\alpha$ 、 $g_\beta$  と  $2d_{\alpha\beta}(1-2x_\alpha)(1-2x_\beta)$  の和により計算可能である。

これ以降、このような  $k$ -flip 近傍解の評価値計算を「一般化ゲイン計算」と呼ぶ。一般化ゲイン計算の使用に際しては、1-flip 近傍解のゲインの再計算を使用するため、一回のビット反転が行われる毎にゲインの再計算を行う必要がある。

#### 4. MDP に対する $k$ -flip 局所探索法

一般的に、大きなサイズの近傍を有する局所探索法は、小さなサイズの近傍構造を有するものよりも優れた局所最適解を算出できる場合が多い。しかしながら、大きなサイズの近傍を採用する場合には一般的に近傍解の数も多くなる。従って、大きなサイズの近傍を有する局所探索法の計算時間量は、小さなサイズの近傍を有する局所探索法よりも大きい。

例えば、組合せ最適化問題の代表例である、巡回セールスマン問題<sup>4)</sup>において、三つの枝を入れ替える 3-opt 局所探索法は、二つの枝を入れ替える 2-opt 局所探索法よりも、最終的に得られる局所最適解の質が優れていることがよく知られている。 $n$  を都市の数とすると、それらの計算量は一般的に 2-opt 局所探索法の場合で  $O(n^2)$ 、3-opt 局所探索法で  $O(n^3)$  となる。更に、Lin と Kernighan によって提案された局所探索法 (LK 法または  $k$ -opt 局所探索法と呼ばれる)<sup>9)</sup> は、より多くの枝の交換を巧妙に行なうことから、2-opt や 3-opt 局所探索法よりも更に良好な解を算出可能であるが、2-opt や 3-opt 局所探索法の時間量よりも一般的に大きくなる。また、グラフ分割問題においても、類似のアイデアを導入した局所探索法が Kernighan と Lin により提案されている<sup>6)</sup>。彼らによるこれら二つの局所探索法は可変深度探索 (variable depth search, VDS) と呼ばれ、両最適化問題において最も強力な解改善法として名高い。

ここでは、Lin と Kernighan のアイデア VDS を利用した  $k$ -flip 局所探索法を MDP に対して示す。

##### 4.1 $k$ -flip 局所探索法の基本戦略

MDP に対する  $k$ -flip 局所探索法の基本戦略は次のようになる。

局所探索を開始するための初期解として実行可能解  $x$  が与えられたとする。各繰り返しにおいて、2-flip 近傍的な操作 (これを 2-flip move と呼ぶ) を連続的に行うことで、 $k$ -flip 近傍解となり得る異なる  $m$  個の候補解  $x'$  を生成する。その候補解の中から最良の評価値を有する解を  $k$ -flip 近傍解として採用し、その近傍解  $x'$  を次の繰り返しのための初期解  $x$  にする。この一連の処理を  $k$ -flip 近傍解のゲイン値が 0 以下になるまで繰り返すものである。

連続的な  $m$  個の  $k$ -flip 近傍候補解を生成するために、初期解  $x$  の各ビットは一回以上反転させないことを条件にする。従って、 $m$  個の候補解  $x'$  は全て異なる解となり、個々のハミング距離  $d_H$  は初期解  $x$  との関係から、 $d_H(x, x') = k$  ( $k = \{2, 4, \dots, 2m-2, 2m\}$ ) となる。

各繰り返しの処理において、 $k$  は 2 から  $2m$  の範囲で変動する近傍解を扱うので、可変的なサイズの近傍を結果的に探索することになり、固定された  $k$ -flip 近傍 ( $k$  を例えば 4 や 6 などと固定する近傍) とは異なる、特殊な近傍構造として解釈できる。

##### 4.2 $k$ -flip 局所探索アルゴリズム

上述の基本戦略をベースにした我々の  $k$ -flip 局所探索アルゴリズムを図 1 に示す。

この図 1 においては、局所探索の初期解として実行可能解  $x$  と共に、 $x$  に対応する 1-flip 近傍解の  $n$  個のゲイン値を有するベクトル  $g$  を与える。ゲイン  $g$  は式 (2) より算出可能である。加えて、局所探索の途

```

procedure k-Flip-Local-Search( $x, g$ )
begin
1  repeat
2     $x_{prev} := x, G_{max} := 0, G := 0, C1 := S_1, C0 := S_0;$ 
3    repeat
4      find  $j$  with  $g_j = \max_{j \in C1} g_j;$ 
5      find  $k$  with  $gain = \max_{k \in C0} (g_k + g_j + 2d_{jk}(1 - 2x_k)(1 - 2x_j));$ 
6       $G := G + gain;$ 
7       $x_j := 1 - x_j, x_k := 1 - x_k,$  and update gains  $g$  for each flipping;
8       $C1 := C1 \setminus \{j\}, C0 := C0 \setminus \{k\};$ 
9      if  $G > G_{max}$  then  $G_{max} := G, x_{best} := x;$ 
10     until new  $x_{best}$  is not found for several repeats or  $C1 = \emptyset;$ 
11     if  $G_{max} > 0$  then  $x := x_{best}$  else  $x := x_{prev};$ 
12   until  $G_{max} \leq 0;$ 
13   return  $x;$ 
end;

```

図1 MDP に対する  $k$ -flip 局所探索法

中の全過程で、0-1 表現の解  $x$  は常に  $S_1$  と  $S_0$  による表現と一致するものとする。

この  $k$ -flip 局所探索法では、主に内ループと外ループの二つのループにより構成される。内ループは、 $m$  個の  $k$ -flip 近傍解の候補を生成する操作とその候補中にある最良解を  $k$ -flip 近傍解として選び出す処理である。外ループは、内ループで得られた  $k$ -flip 近傍解を評価し、 $k$ -flip 局所探索法の終了条件の判定を主に行う。

内ループにおいて、異なる  $m$  個の候補解を算出する際に使用する、二つの集合  $C1$  と  $C0$  を準備する。 $C1$  には  $x_i = 1$  となる要素番号を保持し、 $C0$  には  $x_i = 0$  となる要素番号を保持する。これら集合の利用により、与えられた解  $x$  の各ビットを一回以上反転させないことを保証することができる。従って、基本戦略における内ループは、 $C1 = \emptyset$  の条件を満足するまで繰り返されることになる。しかしながら、多くの場合、 $m$  個全ての候補解を生成する必要はないと考えられる。なぜなら、候補解の生成途中で、最良解として選ぶべき最良ゲイン値を持つ  $k$ -flip 近傍解には明らかになり得ないような候補解をも生成する可能性が高いからである。そのような可能性が高くなるのは  $m$  個の候補解生成過程の中盤から終盤にかけてであると予測される。従って、ステップ9にあるような判定処理を加え、さらに内ループの幾つかの繰り返し中に暫定的な最良解  $x_{best}$  の更新がなければ、内ループ処理を強制的に終了する（ステップ10）。これにより、 $m$  個全ての候補解を生成せずとも、その  $x_{best}$  を  $k$ -flip 近傍解として選出できることが多くの場合可能になり、 $m$  個全ての候補解を生成する（上述の）基本戦略よりも処理時間の点で大幅な効率化が期待できる。

次に、候補解を生成・評価するプロセス（ステップ4～ステップ8）について記述する。本局所探索法では2-flip moveを採用することで各候補解の生成を行う。この2-flip moveは2-flip近傍に類似しているが、与えられた初期解  $x$  の各ビットは一回以上反転することがないという点で2-flip近傍の定義からは異なる。これをなすために、二つの集合  $C1$  と  $C0$  を用いている。ステップ4では  $C1$  に含まれるビットを対象にして、最大のゲイン値を持つビット  $j$  を見つける。ステップ5では  $C0$  に含まれるビットを対象にして、式(4)の2-flip近傍までの一般ゲイン計算によりビット  $k$  を見つける処理になっている。見つけた二つのビット  $j$  と  $k$  はそれぞれ  $C1$  と  $C0$  に含まれていたため、ビット  $j$  と  $k$  のそれぞれを反転したとしても実行可能解が常に生成可能である。ステップ6で、そのビット  $j$  と  $k$  を暫定的に反転した解のゲインを算出し、ステップ7で実際に反転を行うと共に、次の候補解探索のために、各ビットの反転処理後、式(3)を用いてゲインの再計算を行う。さらに、ステップ8では反転に使用した二つのビット番号のそれぞれを対応する集合  $C1$  と  $C0$  から削除する。

以上の処理を先ほど述べたステップ10の条件を満たすまで繰り返すことで、内ループを終了する。その後、内ループ中で見つけた  $k$ -flip 近傍解  $x_{best}$  をステップ11およびステップ12の条件式に従って評価し、 $k$ -flip 局所探索の処理を繰り返すか否かを決定する。

本  $k$ -flip 局所探索法の内ループの各繰り返しにおける時間量は、候補解の探索において  $O(|S_1| + |S_0|)$ 、二つのビットのゲイン再計算において  $O(2n)$  である。

## 5. 考 察

ここでは、MDP に対する  $k$ -flip 局所探索法をメタ戦略のアルゴリズムに導入する際の探索性能に関する可能性について考察する。

集中化（局所探索）の操作はメタ戦略に属する多くのアルゴリズムで採用され、組合せ最適化問題のような困難な問題に対しては不可欠な操作である。従って、高性能な局所探索に関する研究が盛んに行われている。その代表となる局所探索法は、Lin と Kernighan による、巡回セールスマン問題 (traveling salesman problem, TSP) に対しての LK 法やグラフ分割問題 (graph partitioning problem, GPP) に対しての KL 法であり、いずれも可変深度探索 (VDS) である。

LK 法や KL 法は、集中化の操作としてメタ戦略アルゴリズム内部に導入されることがよくある。現在のところ TSP に対して最も優れた解法の一つは、Applegate ら<sup>1)</sup> による Chained Lin-Kernighan 法と呼ばれる反復局所探索法 (iterated local search, ILS) で、より精密化された LK 法が導入されている。また、GPP に対しても KL 法を導入したメタ戦略アルゴリズムは他の局所探索法を有したアルゴリズムよりも多くの場合高品質な解を算出可能である。

TSP や GPP 以外の NP-困難の最適化問題に対しても、VDS ベースの局所探索法が提案されている。例えば、一般化割当問題 (generalized assignment problem) に対して提案された Yagiura ら<sup>12)</sup> によるものや、バイナリー 2 次計画問題 (binary quadratic programming problem) に対して提案された Katayama ら<sup>5, 10)</sup> によるアルゴリズムである。いずれも各最適化問題に対して最強のアプローチの一つとされている。

MDP に対する本  $k$ -flip 局所探索法は VDS に基づき開発しており、巧妙な集中化の操作を可能にしている。以上の観点から、こうした高性能な集中化の操作をメタ戦略のアルゴリズムに導入した場合にも有効に働くことが期待される。さらに、従来から知られるような他の局所探索を有したメタ戦略アルゴリズムよりも優れた探索性能を有する可能性が非常に高いと考察できる。

## 6. 結 論

本論文では、最大多様性問題 (MDP) に対する可変深度探索 (VDS) をベースにした  $k$ -flip 局所探索法を示した。Lin と Kernighan による VDS のアイデアを持つ局所探索法は、巡回セールスマン問題やグラフ分割問題を始め、一般化割当問題やバイナリー 2 次計画問題にも適用され、大きな成果を収めている。この種の高性能な局所探索（集中化操作）のプロセスを有するメタ戦略に属するアルゴリズムは、多くの場合、極めて高品質な解を算出可能としている。今後は、MDP に対する本  $k$ -flip 局所探索法をメタ戦略に属するアルゴリズムへ導入すると共に、他の強力なアルゴリズムとの比較を通して、その有効性を検証する必要がある。

## 参考文献

- 1) Applegate, D., Cook, W., Rohe, A.: Chained Lin-Kernighan for Large Traveling Salesman Problems. available from [http://www.caam.rice.edu/~keck/reports/chained\\_lk.ps](http://www.caam.rice.edu/~keck/reports/chained_lk.ps) (2000)
- 2) Glover, F., Kuo, C.-C., Dhir, K.S.: Heuristic Algorithms for the Maximum Diversity Problem. *Journal of Information and Optimization Sciences* **19** (1998) 109–132
- 3) Ghosh, J.B.: Computational Aspects of the Maximum Diversity Problem. *Operations Research Letters* **19** (1996) 175–181
- 4) Johnson, D.S., McGeoch, L.A.: The Traveling Salesman Problem: A Case Study. In *Local Search in Combinatorial Optimization*. John Wiley & Sons. (1997) 215–310
- 5) Katayama, K., Tani, M., Narihisa, H.: Solving Large Binary Quadratic Programming Problems by Effective Genetic Local Search Algorithm. In: *Proceedings of the 2000 Genetic and Evolutionary Computation Conference* (2000) 643–650
- 6) Kernighan, B.W., Lin, S.: An Efficient Heuristic Procedure for Partitioning Graphs. *Bell System Technical Journal* **49** (1970) 291–307

- 7) Kochenberger, G., Glover, F.: Diversity Data Mining. Technical Report HCES-03-99, Hearin Center for Enterprise Science College of Business Administration (1999)
- 8) Kuo, C.-C., Glover, F., Dhir, K.S.: Analyzing and Modeling the Maximum Diversity Problem by Zero-One Programming. *Decision Sciences* **24** (1993) 1171–1185
- 9) Lin, S., Kernighan, B.W.: An Effective Heuristic Algorithm for the Traveling Salesman Problem. *Operations Research* **21** (1973) 498–516
- 10) Merz, P., Katayama, K.: Memetic Algorithms for the Unconstrained Binary Quadratic Programming Problem. *BioSystems* (2002) (submitted for publication)
- 11) Weitz, R.R., Lakshminarayanan, S.: An Empirical Comparison of Heuristic and Graph Theoretic Methods for Creating Maximally Diverse Groups, VLSI Design, and Exam Scheduling. *Omega* **25** (1997) 473–482
- 12) Yagiura, M., Yamaguchi, T., Ibaraki, T.: A Variable Depth Search Algorithm for the Generalized Assignment Problem. In Voss, S., Martello, S., Osman, I.H., Roucairol, C., eds.: *Meta-Heuristics: Advances and Trends in Local Search Paradigms for Optimization*. Kluwer Academic Publishers (1999) 459–471
- 13) 片山謙吾, 成久洋之: 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—. *岡山理科大学紀要*, 第 36 号 A, (2000) 119–128

# Development of High-Performance Local Search Algorithm for the Maximum Diversity Problem

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, 2002)

Local search is a generally applicable approach that can be used to find approximate solutions to hard optimization problems. One of the most powerful local search algorithms is one based on ideas of Lin and Kernighan who have proposed the variable depth search for the traveling salesman problem and the graph bi-partitioning problem. In this paper, we give a detailed description of an effective local search based on their ideas for the maximum diversity problem.