岡山理科大学紀要 第44号 A pp. 55-62(2008)

2次割当問題に対するk-opt局所探索法の検討

北田 雅享・片山 謙吾*・南原 英生*・成久 洋之*
岡山理科大学大学院工学研究科情報工学専攻
*岡山理科大学工学部情報工学科
(2008年9月30日受付、2008年11月7日受理)

1. まえがき

2次割当問題（Quadratic Assignment Problem，QAP）は，n個の場所にn個の施設を設置した場合に，施設同士の移動コストを最小化する問題である．場所同士を結ぶ距離行列d，施設間を移動するためのフロー行列fが予め与えられる．QAPの解表現をπとすると，目的関数は式(1)のように表すことができる．

$$C(\pi) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} d_{ij} f_{\pi(i)\pi(j)} \tag{1}$$

式中のnは設置場所及び施設の数，d_{ij}は場所iと場所jの間の距離，f_{kl}は施設kと施設lのフローを表す．また，πはn個の要素からなる順列である．QAPは，この目的関数を最小化する問題である．

QAPは，施設配置問題やLSI配置問題，スケジューリング問題などの実用上重要な組合せ最適化問題として知られており，NP-困難[1]である．NP-困難な問題は，多項式時間で厳密解を求めることは困難である．従って最適性の保証はなくとも，ある程度の精度の高い解（近似解）が求まれば，十分に満足のいく場合が多い．そこで，反復局所探索法や遺伝的アルゴリズムなどのメタ戦略アルゴリズムが用いられる．QAPに対して，現在までに様々なメタ戦略アルゴリズムの適用報告がされており，それらは良好な結果を示している[2) 3)]．これらのメタ戦略アルゴリズムは基本構成として局所探索法を使用している．つまり局所探索法の改善が，そのままメタ戦略アルゴリズムの改善につながると考えられる．

そこで我々は，QAPに対して，可変深度探索（Variable Depth Search，VDS）[4)]のアイデアに基づくk-opt局所探索法（k-opt Local Search，KLS）を提案する．KLSは探索の各反復において，近傍操作を連鎖的に適用して得られる複数の近似解の集合を改めて大きな近傍と捉えることによって，比較的広い範囲の近傍を効率的に探索できるアルゴリズムである．KLSの性能を検証するために，QAPの代表的なベンチマーク問題例集であるQAPLIBの複数の問題例に対して，一般的に使用されている2-opt局所探索法との比較実験を行った．その結果をもとに，KLSが他の2-opt局所探索法よりも優れていることを示す．また，他の局所探索法との特性の違いを見るため，処理時間の経過に対する最良解の変化の様子について調査する．

2. QAPに対するk-opt局所探索法

本章では，QAPに対して我々が提案するk-opt局所探索法（KLS）について述べる．

KLSは，可変深度探索（VDS）に基づいている．VDSは，与えられた解に対して比較的小さな近傍操作を連鎖的に適用することによって到達可能な解の集合を新たに大きな近傍と捉える近傍探索のアイデアである．KLSは，各反復において現在の解に対して，2-opt近傍操作を連鎖的に適用することで得られる解集合を，改めて大きな近傍と捉えることで，局所探索を行うアルゴリズムである．また，2-opt近傍操作は図1に示すように，現在の解の2つの要素を交換して近傍解を生成する方法である．

KLSの擬似コード図2に示す．KLSは外ループ（Line2-12）と内ループ（Line4-10）の2つのループから構成されている．

まず，擬似コードで用いられている変数を説明する．πは現在保持している解である．また，π_{best}はKLSで見つかった最良解，π_{in}は内ループの探索で見つかった暫定的な最良解である．同様に，gは探索によっ

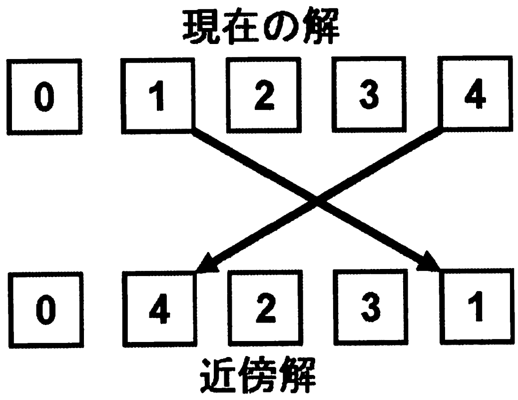


図 1　2-opt 近傍操作

```
   procedure k-opt LocalSearch(π)
   begin
1      π_best := π, g_best := ∞;
2      repeat
3          π := π_best, g := 0, g_in := ∞, P := {1, ..., n};
4          repeat
5              find a pair of element i and j
                   with min_{i,j∈P_in} δ_{i,j} := SwapGain(i, j, π);
6              π := SwapMove(i, j, π);
7              g = g + δ_{i,j};
8              if g < g_in then g_in := g, π_in := π; endif
9              P := P\{i, j};
10         until P = ∅;
11         if g_in < g_best then g_best := g_in, π_best := π_in; endif
12     until g_in > g_best ;
13     return π_best;
   end;
```

図 2　QAP に対する k-opt 局所探索法

て得られた解と探索を開始する前の解の評価値の改善幅（ゲイン値）を表す．KLS の内ループでは，現在の解に対して任意の要素 i, j を交換し，そのゲイン値を求める（Line5-7）．そして，ゲイン値が改善ならば現在の解 π を π_{in} に，ゲイン値 g を g_{in} に保存する（Line8）．一度交換した要素は，内ループの処理が終わるまで交換禁止とする（Line9）．交換できる要素がなくなれば，内ループは終了する（Line10）．次に外ループでは，内ループで発見された最良解 π_{in} のゲイン値と現在保持している最良解 π_{best} のゲイン値を比較して，π_{in} のほうが良好であれば，π_{best} を更新する．この処理を，解の改善がなくなるまで繰り返す．

3. QAP に対する 2-opt 局所探索法

本章では，一般的に用いられる QAP に対する 2-opt 局所探索法について述べる．

3.1 2-opt 局所探索法

以下に 2-opt 局所探索法の流れを示す．

*Step*1 初期解 π を生成する

*Step*2 解 π に対して 2-opt 近傍操作を適用し近傍解 π' を得る

*Step*3 解 π と解 π' の評価値を比較し，π' の評価値が π よりも良好であれば $\pi := \pi'$ とする

*Step*4 終了判定を行う

*Step*1 では，ランダムな初期解 π を生成する．次に，その解に対して 2-opt 近傍操作を適用し近傍解 π' を得る．ここで，現在の解 π の評価値と近傍解 π' の評価値を比較して，$\pi := \pi'$ とするかどうかを判定する．この操作を移動戦略という．終了判定では，現在の解から生成可能な近傍解の中に，現在の解の評価値よりも，評価値が良好な解がなければ終了となる．

3.2 移動戦略[5)]

ここで，2-opt 局所探索法に組み込まれている移動戦略（最良移動戦略，即時移動戦略，Don't Look Bit）について説明する．

3.2.1 最良移動戦略（Best Improvement）

最良移動戦略は，現在の解から生成可能な近傍解を全て生成し，その中で最も良好な評価値を持つ近傍解を現在の解に更新する方法である．

3.2.2 即時移動戦略（First Improvement）

即時移動戦略は，現在の解から近傍解を生成する過程の中で，最初に見つかった評価値が良好な近傍解に現在の解を更新する方法である．

3.2.3 Don't Look Bit（DLB）

Don't Look Bit は即時移動戦略を高速化する手法の一つである．即時移動戦略と同様に，最初に見つかった評価値が良好な近傍解に現在の解を移動するが，ある要素から生成される近傍解の中に現在の解より評価値が良好な近傍解が存在しなければ，次回の探索において，その要素からの近傍生成を禁止するというものである．

4. 評価関数の処理時間削減

文献[2)] をもとに最良移動戦略の評価値の処理時間短縮方法を示す．

QAP の全体のコストを求めるために与えられる異なる 2 つのコストは，2 次元の行列である．以下に示す式 (2) は，与えられるコスト行列がどのような場合でも $O(n)$ の時間で，現在の解のコスト（$C(\pi)$）と i と j を入れ替えて生成される近傍解のコスト（$C(\pi')$）の差を求めることが可能である．また，式 (2) に使われている n は問題サイズ（全要素，及び全頂点の数），d_{ij} は，要素 i と要素 j の間の距離，$f_{\pi(i)\pi(j)}$ は頂点 i に割当てられている要素から頂点 j に割当てられている要素間のコストを表している．

$$\begin{aligned}\Delta C(\pi,i,j) &= C(\pi) - C(\pi') \\ &= (d_{jj}-d_{ii})(f_{\pi(i)\pi(i)} - f_{\pi(j)\pi(j)}) + (d_{ji}-d_{ij})(f_{\pi(i)\pi(j)} - f_{\pi(j)\pi(i)}) \\ &+ \sum_{k=1,k\neq i,j}^{n} (d_{jk}-d_{ik})(f_{\pi(i)\pi(k)} - f_{\pi(j)\pi(k)}) + (d_{kj}-d_{ki})(f_{\pi(k)\pi(i)} - f_{\pi(k)\pi(j)})\end{aligned} \tag{2}$$

コスト行列 w，f それぞれの要素が対称で，w，または f の対角成分の要素が 0 であるとき，式 (2) は，式 (3) に書き換えることができる．

$$\Delta C(\pi,i,j) = 2\sum_{k=1,k\neq i,j}^{n} (d_{jk}-d_{ik})(f_{\pi(i)\pi(k)} - f_{\pi(j)\pi(k)}) \tag{3}$$

また，最良移動戦略を用いるとき，コスト行列 ΔC を維持し，随時更新していくことで，定数オーダーの時間によって近傍解の評価値を計算することができる（式 (4)）．

$$\begin{aligned}\Delta C(\pi', i, j) &= \Delta C(\pi, i, j) \\ &+ (a_{ki} - a_{kj} + a_{lj} - a_{li})(b_{\pi(l)\pi(i)} - b_{\pi(l)\pi(j)} + b_{\pi(k)\pi(j)} - b_{\pi(k)\pi(i)}) \\ &+ (a_{ik} - a_{jk} + a_{jl} - a_{il})(b_{\pi(i)\pi(l)} - b_{\pi(j)\pi(l)} + b_{\pi(j)\pi(k)} - b_{\pi(i)\pi(k)})\end{aligned} \tag{4}$$

式 (4) では，i，j を現在の 2-opt 近傍で交換する要素，k，l を一つ前の 2-opt 近傍で交換した要素となっている．また，この式は i，$j \notin \{ k, l \}$ の場合しか使用することができず，この条件を満たさない場合は式 (2) によって，評価値の差を求めなければならない．

5. k-opt 局所探索法の性能評価

本章では，2. 章と 3. 章で示した 4 種類の局所探索法を QAP のベンチマーク問題例に適用することによって，KLS の性能評価を行う．また，処理時間の経過に対する，最良解の変化の様子を調べ，それぞれの局所探索法の特徴を検討する．

5.1 実験 I の詳細

KLS の探索性能を評価するために，KLS を含む 4 種類の局所探索法を組み込んだ多スタート局所探索法 (Multi Start Local Search，MLS) を設計し，それぞれの局所探索法の処理結果を比較検討する．多スタート局所探索法は，局所探索法の性能評価によく用いられる単純なメタ戦略手法の一つで，複数の初期解に対して局所探索法を適用し，その中から最も良好な改善解を出力するという手法である．使用するベンチマーク問題例は，QAP のベンチマーク問題例集である QAPLIB より，文献[2] で使用されている els19，chr25a，bur26a，nug30，kra30a，ste36a，tai60a，tai80a，tai100a，sko100a，tai60b，tai80b，tai100b，tai150b，tho150，tai256c の 16 例題を用いる．また QAPLIB では，tai256c が最大の問題サイズとなっている．実験は，各問題サイズごとに計算打ち切り時間を設定し 10 回試行する．また，最適解（既知の最良解）が出力された場合もその試行は打ち切りとする．性能評価は，計算打ち切り時間内に得られた最良解の評価値の精度及び，得られた解の評価値の平均精度を用いて行う．解の評価値の精度は，式 (5) によって求める．

$$\text{解の評価値の精度 } (\%) = \frac{\text{改善解の評価値} - \text{最適解 (既知の最良解) の評価値}}{\text{最適解 (既知の最良解) の評価値}} \times 100 \tag{5}$$

全ての MLS は C 言語によってコード化し，使用コンパイラは，gcc で最適化オプション-O3 を付加した．全ての実験は，Hewlett-Packard 社の計算機 HP xw4300 Workstation CPU:Pentium4 3.4GHz，4GB RAM，OS:Fedora Core 5 上で行う．

5.2 実験 I の結果

結果を表 1 に示す．Instance の欄には問題例名，opt には既知の最良解値（太字は最適解値），計算時間にはそれぞれの問題例の計算打ち切り時間 (s) を示した．また，Best は 10 回試行で得られた最良解の精度 (%)，Avg は各試行で得られた解の平均精度 (%)，Time は局所探索 1 回あたりの平均処理時間 (s) を表している．

表 1 の結果より，KLS が Best，Avg で他の解法に比べて良好な結果を示している．しかし，与えられたコスト行列の対角成分が 1 の問題例（tai60b，tai80b，tai100b）では，他の解法よりも劣る結果となっている．また，Time では最良移動戦略，DLB が同程度，次に即時移動戦略が良好な結果を示し，KLS は最も劣る結果となっている．

以上より，KLS は解の精度は良いが処理に時間がかかるということを示した．そこで，処理時間の経過に対する最良解の変化を見ることで，それぞれの局所探索法の収束性を調査し次節で考察する．

5.3 実験 II の詳細

QAP は問題の複雑さから，多スタート局所探索法を適用した際に，解が早期に収束し，その後改善が見られない状態となっている可能性がある．そこで，上述した 4 種類の局所探索法における解の収束性を調

表 1　QAP のベンチマーク問題に対する局所探索法の結果

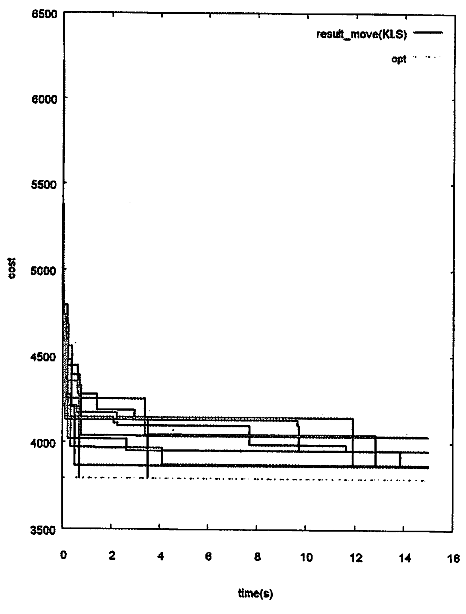
Instance			KLS			最良移動戦略			即時移動戦略			DLB		
Name	opt	計算時間 (s)	Best(%)	Avg(%)	Time(s)	Best(%)	Avg(%)	Time(s)	Best(%)	Avg(%)	Time(s)	Best(%)	Avg(%)	Time(s)
els19	**17212548**	5	0.000	0.000	< 0.001	0.000	0.000	< 0.001	0.000	0.000	< 0.001	0.000	0.000	< 0.001
chr25a	**3796**	15	0.000	2.434	< 0.001	0.000	4.895	< 0.001	1.844	4.110	< 0.001	0.000	3.446	< 0.001
bur26a	**5426670**	20	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	< 0.001	0.000	0.000	< 0.001
nug30	**6124**	20	0.000	0.000	0.001	0.000	0.056	0.001	0.000	0.033	< 0.001	0.000	0.101	< 0.001
kra30a	**88900**	20	0.000	0.000	0.001	0.000	0.101	0.001	0.000	0.000	< 0.001	0.000	0.000	< 0.001
ste36a	**9526**	30	0.105	0.304	0.002	0.252	0.529	0.002	0.294	0.638	0.001	0.252	0.535	< 0.001
tai60a	7208572	90	1.782	2.144	0.009	2.112	2.423	0.005	2.167	2.491	0.006	2.442	2.647	0.003
tai80a	13557864	180	1.603	1.825	0.023	2.055	2.151	0.011	1.858	2.034	0.015	2.285	2.418	0.006
tai100a	21125314	300	1.528	1.695	0.046	1.942	2.061	0.022	1.783	1.960	0.032	2.140	2.312	0.011
sko100a	152002	300	0.342	0.476	0.069	0.517	0.655	0.039	0.470	0.541	0.037	0.626	0.695	0.017
tai60b	608215054	90	0.079	0.167	0.021	0.058	0.198	0.013	0.020	0.121	0.014	0.052	0.144	0.008
tai80b	818415043	180	0.166	0.589	0.054	0.234	0.616	0.032	0.089	0.504	0.035	0.264	0.525	0.019
tai100b	1185996137	300	0.504	0.628	0.117	0.534	0.729	0.067	0.440	0.629	0.076	0.259	0.620	0.037
tai150b	498896643	600	1.040	1.325	0.478	1.050	1.278	0.268	0.796	1.257	0.390	1.086	1.243	0.162
tho150	8133484	600	0.658	0.753	0.279	0.679	0.882	0.160	0.583	0.794	0.151	0.868	0.955	0.060
tai256c	44759294	1200	0.178	0.204	0.668	0.169	0.197	0.312	0.118	0.201	0.837	0.217	0.239	0.381

べるため，各局所探索法を QAP のベンチマーク問題例に適用した際の処理時間の経過に対する最良解の変化を調査する．対象問題例は実験 I と同様で試行回数は各問題例に対して 10 回とする．その他実験設定および実験環境は実験 I と同様である．

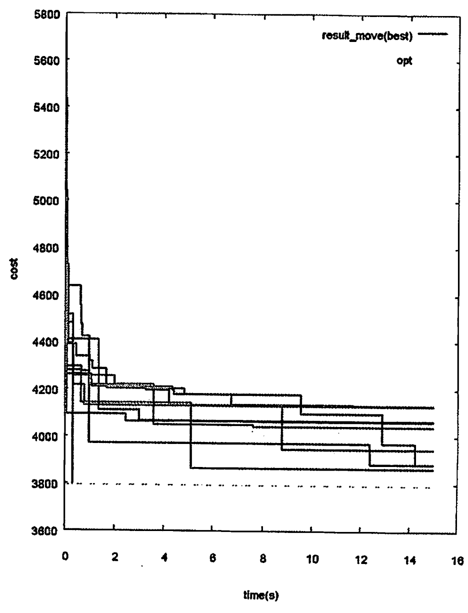
5.4 実験 II の結果

図 3 と図 4 に chr25a 及び，tai256c に対する各局所探索法の処理時間の経過に対する最良解の変化を示す．赤い線は各試行ごとの結果，緑の線は最適解（または既知の最良解）である．

図 3，図 4 共に，KLS は他の手法に比べて早い段階で収束し，探索の後半ではほとんど解が改善されていないことが観測できた．このことから，KLS は非常に効率的に解を探索しているといえる．また，即時移動戦略や DLB は探索の後半にも解が改善されている傾向が観測できた．



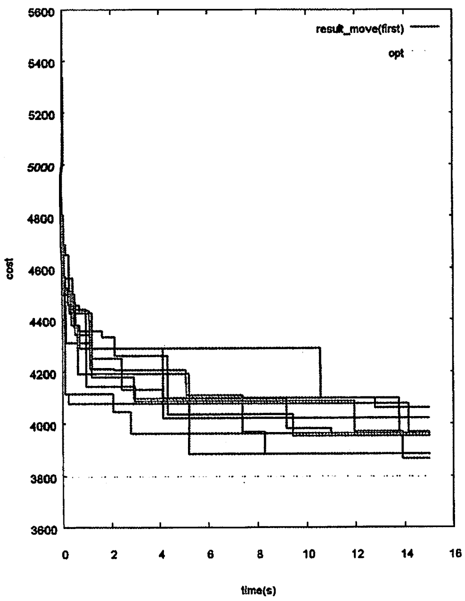
(a) KLS



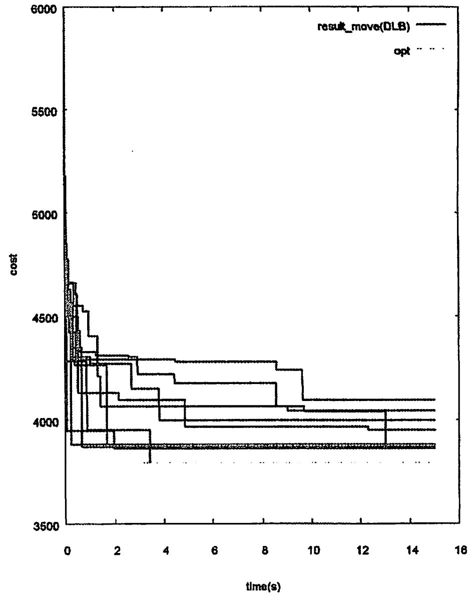
(b) 最良移動戦略

6. むすび

本論文では，QAP に対する k-opt 局所探索法を提案し，一般的に使用される 2-opt 局所探索法（最良移動戦略，即時移動戦略，DLB）との比較実験を行った．4 種類の局所探索法の比較実験の結果，解の精度については KLS が，処理時間については最良移動戦略，DLB が良好な結果を示した．また，各局所探索法の解の収束性を調査するために，処理時間に対する最良解の変化を調査した．その結果，すべての局所探索法で早期に収束する傾向があることが観測できた．

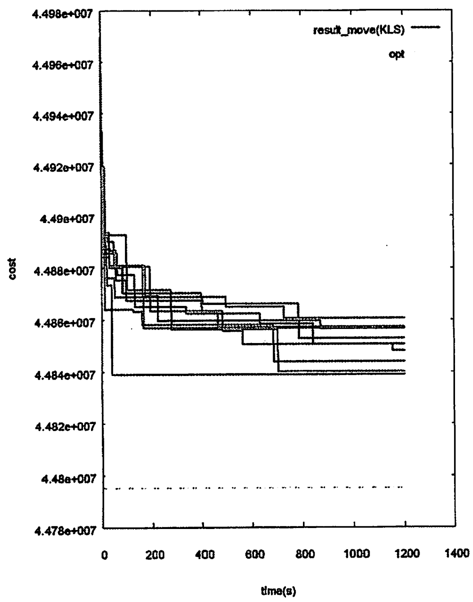


(c) 即時移動戦略

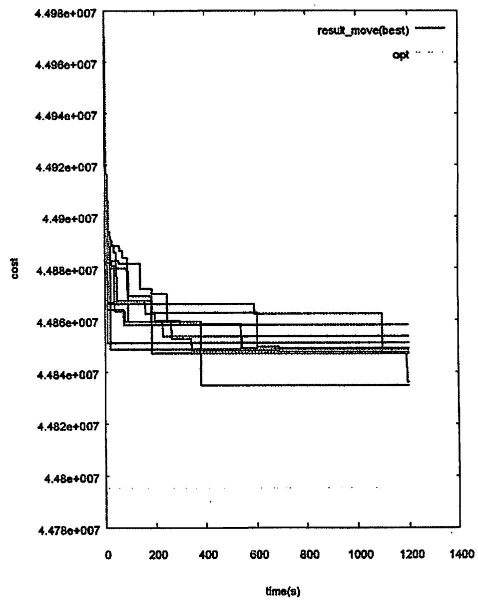


(d) DLB

図 3 chr25a に対する各手法の処理時間に対する最良解の変化



(a) KLS



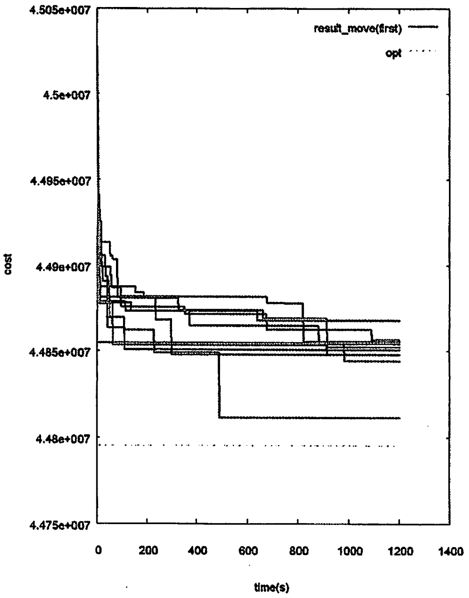
(b) 最良移動戦略

以下では，今後の課題・検討事項について記述する．

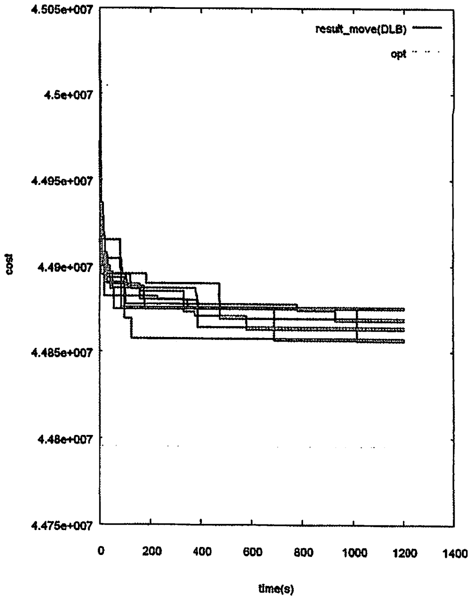
(1) 実験 I の結果より，KLS が 1 回あたりの局所探索に長い時間を要しているため，KLS の高速化を行う必要がある．

(2) 実験 I・II の結果より，良好な解を得た後に探索が長期停滞しているため，計算の打ち切り処理を検討する必要がある．

(3) 本論文では，単純な多スタート局所探索法によって結果を得たが，今後はより高性能なメタ戦略への導入を検討する余地がある．



(c) 即時移動戦略



(d) DLB

図 4　　tai256c に対する各手法の処理時間に対する最良解の変化

参考文献

1) M. Garey, and D. Johnson, “Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness, ” Freeman, New York, 1979.

2) Merz, P., Freisleben, B., “Fitness Landscape Analysis and Memetic Algorithms for the Quadratic Assignment Problem,” IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol. 4, No. 4, pp.337–352, 2000.

3) T. Stutzle, “Iterated local search for the quadratic assignment problem,” Technical Report AIDA-99-03, FG Intellektik, FB Informatik, TU Darmstadt, Darmstadt, Germany, 1999.

4) S. Lin and B. Kernighan, “An effective heuristic algorithm for the traveling salesman problem,” Operations Research, vol.21, pp.498–516, 1973.

5) 柳浦睦憲，茨木俊秀, “組合せ最適化 –メタ戦略を中心として–,” 朝倉書店,2001.

Analysis of k-opt Local Search for Quadratic Assignment Problem

Masataka KITADA, Kengo KATAYAMA*, Hideo MINAMIHARA*
and Hiroyuki NARIHISA*

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

(Received September 30, 2008; accepted November 7, 2008)

Many metaheuristic algorithms are based on local search. One of the most effective local search algorithms is known to be variable depth search(VDS) for combinatorial optimization problems. In this paper we present a VDS based local search, called k-opt local search (KLS), for the quadratic assignment problem (QAP). To show the effectiveness of KLS, we compare the performance of KLS with those of standard local search algorithms based on 2-opt neighborhood on the benchmark instances of the QAPLIB. The results indicated that the performance of KLS is superior to those of the standard ones in many cases.

Keywords: combinatorial optimization; quadratic assignment problem; local search.