2次割当て問題への適用における Integral Basis Method の改良の提案

鴻 池 祐 輔† 品 野 勇 治†† 藤 江 哲 也†††

Integral Basis Method は Haus，Köppe，Weismantel によって提案された，整数線形計画問題に対する新たな厳密解法である．本稿では 2 次割当て問題への適用を通して，Integral Basis Method の性質を調べて，その効率を改良する方法を提案する．提案する改良は，QAP の制約式の持つ特徴を緩和に利用することである．17 問のベンチマーク問題に対する実験の結果，すべての問題で反復回数が大きく減少し，11 問の問題で計算時間を短縮した．これらの技法は，QAP に限らず，一般の整数線形計画問題にも応用可能であると考えられる．

Improving the Integral Basis Method in Application to the Quadratic Assignment Problem

Yuusuke Kounoike,† Yuji Shinano† and Tetsuya Fujie†††

The Integral Basis Method is a new exact method for solving the integer linear programming problem (ILP), which is proposed by Haus, Köppe and Weismantel. In this paper, we propose some improving techniques for the Integral Basis Method, and show their appication to the Quadratic Assignment Problem (QAP). The constraints of QAP have several remarkable characteristics. One of our proposals is to use these characteristics for relaxation. Our computational experiments show that these improvement techniques work quite effectively in reducing the number of iterations for all of the 17 instances and in reducing the computation time for 11 instances. These techniques could be effectively applicable also in general ILP.

1. はじめに

整数線形計画問題[9),14)]は，多くの組合せ最適化問題を表現することができ，商用ソルバの進歩などにより大きな問題についても最適解を求めることが可能になったことから，企業などの生産の現場などでも活用されてきている．整数線形計画問題の厳密解法としては分枝限定法が有名であるが，近年 Haus，Köppe，Weismantel が新たな手法として Integral Basis Method を提案している[5),6)]．この手法は今のところ小規模の問題しか解くことができないが，まだ提案されて間もなく，十分に改良の余地があると考えられる．

分枝限定法の発展は，一般の整数線形計画問題に関する研究だけでなく，個別の問題に対する研究の成果によるところも多い．そこで，本稿では問題を 2 次割当て問題（QAP）に限定したうえで，Integral Basis Method の持つ性質を調べて改良の糸口を探り，実際に改良した結果について報告する．QAP は組合せ最適化問題の中でも特に難しい部類に入る問題として知られており，近似解法，厳密解法ともによく研究されている．この研究は QAP に対する新たな厳密解法の実装としても意味があるといえる．

2. Integral Basis Method

Integral Basis Method は最適性の検証と解の改善の 2 つの部分からなる．最適性の検証は，与えられた実行可能解が最適でない場合は，より良い目的関数値を持つ別の実行可能解を 1 つ見つける．そのような解がないことを保証することで最適性の保証とする．解の改善では，新たに見つけた解が基底解となるよう基底の入替えを行い，その解について再び最適性の検証を行うことにより最終的に最適解を発見し，その最適性を保証する．

† 東京農工大学工学府・工学部
Faculty of Engineering, Tokyo University of Agriculture and Technology
†† 東京農工大学工学部情報工学科
Department of Computer and Information Sciences, University of Agriculture and Technology
††† 兵庫県立大学経営学部組織経営学科
School of Business Administration, University of Hyogo

まず，線形計画問題 (LP)$\min\{\mathbf{c}^\top\mathbf{x} : A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}$ の基底形式 $\min\{\overline{c}_0 + \overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{x}_N : \mathbf{x}_B + \overline{A}_N\mathbf{x}_N = \overline{\mathbf{b}}, \mathbf{x}_B \geq \mathbf{0}, \mathbf{x}_N \geq \mathbf{0}\}$ と，その基底解 $(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N) = (\overline{\mathbf{b}}, \mathbf{0})$ について考える．後の整数線形計画問題での議論を簡単にするため，本稿では $\overline{A}_N \in \mathbf{Z}^{m\times n}$，$\overline{\mathbf{b}} \in \mathbf{Z}^m$ とする．$\overline{\mathbf{b}} \geq \mathbf{0}$ が基底解の実行可能条件，$\overline{\mathbf{c}}_N \geq \mathbf{0}$ が基底解の最適性条件である．しかし，これに整数条件が付いた整数線形計画問題 (IP)$\min\{\mathbf{c}^\top\mathbf{x} : A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \in \mathbf{Z}_+^{m+n}\}$ の場合はある実行可能基底解において $\overline{c}_k < 0$ であっても，$x_k > 0$ とする整数解が存在しないか，存在しても $\overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{x}_N \geq 0$ となってしまうことがある．そのため，実際には基底解が最適解であるにもかかわらず，最適性を保証することができなくなってしまう．ここに整数線形計画問題に対する主解法の難しさがある．

Haus らは以下のように考えることでこの問題を解決し解の最適性を検証できるようにした．まず，問題（IP）の基底形式 $\min\{\overline{c}_0 + \overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{x}_N : \mathbf{x}_B + \overline{A}_N\mathbf{x}_N = \overline{\mathbf{b}}, \mathbf{x}_B \in \mathbf{Z}_+^m, \mathbf{x}_N \in \mathbf{Z}_+^n\}$ とその実行可能基底解 $(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N) = (\overline{\mathbf{b}}, \mathbf{0})$ が与えられているとする．一般に整数線形計画問題の実行可能解は基底解とは限らないが，文献 5)，6) では任意の実行可能解に対して，変数を増やすなどの多少の変形により基底形式を作る方法について述べている．

$\mathcal{F}_N := \{\mathbf{x}_N \in \mathbf{Z}_+^n : \overline{A}_N\mathbf{x}_N \leq \overline{\mathbf{b}}\}$ とすると以下の定理が成立する．

定理 1　$\mathbf{t} \in \mathcal{F}_N$ であれば $(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N) = (\overline{\mathbf{b}} - \overline{A}_N\mathbf{t}, \mathbf{t})$ は問題（IP）の実行可能解であり，その目的関数値は $\overline{c}_0 + \overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{t}$ である．また，問題（IP）の任意の実行可能解 $(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N)$ に対し，$(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N) = (\overline{\mathbf{b}} - \overline{A}_N\mathbf{t}, \mathbf{t})$ となる $\mathbf{t} \in \mathcal{F}_N$ が存在する．

定理 2　$\overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{t} < 0$ となる $\mathbf{t} \in \mathcal{F}_N$ が存在しないことが，実行可能基底解 $(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N) = (\overline{\mathbf{b}}, \mathbf{0})$ が問題（IP）の最適解であるための必要十分条件である．

よって，$\overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{t} < 0$ となる $\mathbf{t} \in \mathcal{F}_N$ を示すことで最適解ではないことの証明となり，新たな実行可能解により基底形式を書き換えることで，最適解へと到達することが可能である．$\overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{t} < 0$ となる $\mathbf{t} \in \mathcal{F}_N$ を発見するか，そのような $\mathbf{t}$ が存在しないことを示すことを，文献 5)，6) では *Augmentation Problem* と呼んでいる．Augmentation Problem を解き，得られた $\mathbf{t}$ により基底形式の書き換えを行い，任意の実行可能解から最適解を発見するまでの手続きを Integral Basis Method と呼んでいる．

線形計画問題と同じように，$\overline{\mathbf{c}}_N \geq \mathbf{0}$ であれば，定理 2 の条件を満たし，最適性を保証するが，一般にはこうとは限らない．そこで，Integral Basis Method ではこの考え方を拡張し，次の条件 3 を満たす集合 $S = \{\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \ldots, \mathbf{v}^r\} \subseteq \mathbf{Z}_+^n$ を考える．

条件 3　すべての $\mathbf{t} \in \mathcal{F}_N$ について，

$$\mathbf{t} = \sum_{i=1}^{r} u_i\mathbf{v}^i \quad (u_i \in \mathbf{Z}_+)$$

を満たす $\mathbf{u} \in \mathbf{Z}_+^r$ が少なくとも 1 つ存在する．

$\mathbf{e}_k$ を第 k 成分が 1 の単位ベクトルとすると，$S^0 = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_n\}$ は，条件 3 を満たす自明な集合である．また，次に定義する *Irreducible Solution Set*（ISS）は，条件 3 を満たす特殊な集合である．

定義 4　集合 $S \subseteq \mathcal{F}_N$ が条件 3 を満たし，すべての $\mathbf{v}^k \in S$ について，

$$\mathbf{v}^k = \sum_{i=1}^{r} u_i\mathbf{v}^i$$

を満たす $\mathbf{u} \in \mathbf{Z}_+^r$ が $\mathbf{u} = \mathbf{e}_k$ に限られるとき，集合 S を $\mathcal{F}_N$ の *Irreducible Solution Set* という．

条件 3 を満たす集合 S が与えられたとき，$\overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{t}$ は $\mathbf{u}$ を用いて，

$$\overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{t} = \sum_{i=1}^{r} \overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{v}^i u_i$$

と書くことができる．また，$\mathcal{F}_S$ を

$$\mathcal{F}_S := \{\mathbf{u} \in \mathbf{Z}_+^r : \sum_{i=1}^{r} \overline{A}_N\mathbf{v}^i u_i \leq \overline{\mathbf{b}}\}$$

と定義することで，新たな整数線形計画問題

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{i=1}^{r} \overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{v}^i u_i \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{u} \in \mathcal{F}_S \end{aligned}$$

を考えることができる．この問題は元の問題（IP）と等価である．$\mathcal{F}_N$ は $\mathcal{F}_S$ を用いて次のように書くことができる．

$$\mathcal{F}_N = \{\mathbf{x}_N \in \mathbf{Z}_+^n : \mathbf{x}_N = \sum_{i=1}^{r} u_i\mathbf{v}^i,\ \mathbf{u} \in \mathcal{F}_S\}.$$

$u_i \geq 0$ から，次の条件 5 が成立すれば，$\overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{t} < 0$ となる $\mathbf{t} \in \mathcal{F}_N$ が存在しないことの証明となる．

条件 5　すべての $\mathbf{v}^i \in S$（$1 \leq i \leq r$）について，$\overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{v}^i \geq 0$ が成立する．

条件 5 を満たさない場合，$\overline{\mathbf{c}}_N^\top\mathbf{v}^k < 0$ となる $\mathbf{v}^k \in S$ が少なくとも 1 つ存在する．このとき，$\mathbf{v}^k \in \mathcal{F}_N$ であれば，定理 2 の条件に反する $\mathbf{t}$（$= \mathbf{v}^k$）が見つかったこととなる．$\mathcal{F}_N$ の ISS を S^* とすると，$(\overline{\mathbf{b}}, \mathbf{0})$ が最適解であれば，S^* について条件 5 が必ず成立し，

最適解でなければ，$\bar{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v} < 0$ となる $\mathbf{v} \in S^*$ が必ず 1 つ以上存在し，Augumentation Problem が解けたことになる．しかし，ISS を列挙した後はそれぞれの要素と $\bar{\mathbf{c}}_N$ の内積を計算するだけであるということは，いい換えると $\mathcal{F}_N$ の ISS を列挙することは整数線形計画問題の最適性検証と同じくらいに困難であるということを意味する．

そこで，Integral Basis Method では，S^* を列挙する代わりに，つねに条件 3 を満たすようにしながら S を順次書き換え，条件 5 を満たす S か，$\bar{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}^k < 0$, $\mathbf{v}^k \in \mathcal{F}_N$ となる $\mathbf{v}^k$ を見つけることで Augumentation Problem の解法としている．S の書き換えは，$\mathbf{v}^k \in S$, $\bar{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}^k < 0$, $\mathbf{v}^k \notin \mathcal{F}_N$ となる $\mathbf{v}^k$ を 1 つ選び，以下に示す S' を新たな集合 S とする．

集合 $S = \{\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \ldots, \mathbf{v}^r\}$ が条件 3 を満たし，$\mathbf{v}^k \in S$ が，$\bar{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}^k < 0$ となり $\mathbf{v}^k \notin \mathcal{F}_N$ であるとする．このとき，$\mathbf{e}_k \notin \mathcal{F}_S$ である．$\overline{\mathcal{F}}_S \subseteq \mathbf{Z}_+^r$ を $\mathbf{e}_k \notin \overline{\mathcal{F}}_S$ であるような $\mathcal{F}_S$ の緩和領域（$\overline{\mathcal{F}}_S \supseteq \mathcal{F}_S$）とし，$\overline{S} = \{\mathbf{u}^1, \mathbf{u}^2, \ldots, \mathbf{u}^q\}$ を $\overline{\mathcal{F}}_S$ の ISS とする．ここで，集合 S' を

$$S' := \left(S \setminus \{\mathbf{v}^k\}\right) \cup \{\sum_{i=1}^r u_i \mathbf{v}^i : \mathbf{u} \in \overline{S}, u_k \geq 1\}$$

と定義すると次の定理 6 が成り立つ．

定理 6 集合 S' は $\mathcal{F}_N$ に対し，条件 3 を満たす．

$\overline{\mathcal{F}}_S$ を ISS の列挙が容易なようにとることで，$\bar{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}^k < 0$ となる $\mathbf{v}^k$ を要素として含まず，条件 3 を満たす新たな集合 S' を得ることができる．こうして次々と S を書き換えていくことで，基底解の最適性を検証するのが Integral Basis Method である．そのアルゴリズムを**図 1** に示す．

ISS の列挙が容易な $\overline{\mathcal{F}}_S$ のとり方として，文献 5), 6) では主に $\mathbf{e}_k$ が違反する制約式 1 本をもとに緩和領域をとる方法をいくつか示している．本稿ではその中で最も効率が良いとされている *Strengthened Knapsack Relaxation*（SKR）について説明する．この緩和法は本研究での QAP への適用の際にも利用している．

Integral Basis Method のアルゴリズム中で，現在集合 S を保持しており，$\mathcal{F}_S$ の緩和領域 $\overline{\mathcal{F}}_S$ とその ISS である $\overline{S}$ が必要であるとする．$\mathbf{v}^k$ が $\bar{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}^k < 0$ であり，$\mathbf{v}^k \notin \mathcal{F}_N$，$\mathbf{e}_k \notin \mathcal{F}_S$ とする．$\mathcal{F}_S$ を定義する制約式

$$\sum_{j=1}^r \overline{A}_N \mathbf{v}^j u_j \leq \bar{\mathbf{b}}$$

について考える．$\overline{A}_{Ni,\cdot}$ を $\overline{A}_N$ の i 行目の行ベクトルとし，$a_j := \overline{A}_{Ni,\cdot} \mathbf{v}^j$ とおくと，i 番目の制約式は

$$\sum_{j=1}^r a_j u_j \leq \bar{b}_i$$

となる．$\mathbf{e}_k \notin \mathcal{F}_S$ であるのだから，$\mathbf{e}_k$ が制約に違反する，つまり $a_k > \bar{b}_i$ となる i が少なくとも 1 つ存在する．このとき，

$$\overline{\mathcal{F}}_S^1 := \{\mathbf{u} \in \mathbf{Z}_+^r : \sum_{j=1}^r a_j u_j \leq \bar{b}_i\}$$

は，$\mathcal{F}_S$ の緩和領域であり，$\mathbf{e}_k \notin \overline{\mathcal{F}}_S^1$ となる．$\overline{\mathcal{F}}_S^1$ の ISS の列挙は，$\mathcal{F}_S$ に比べれば容易であるものの，依然として難しい．そこで，さらに緩和することを考える．まず，係数 a_j の正負によって添字集合 $I_<$，I_0，$I_>$ を

$$I_< := \{j : a_j < 0\}$$
$$I_0 := \{j : a_j = 0\}$$
$$I_> := \{j : a_j > 0\}$$

と定義すると，

$$\overline{\mathcal{F}}_S^2 := \{\mathbf{u} \in \mathbf{Z}_+^r : a_k u_k + \sum_{j \in I_<} a_j u_j \leq \bar{b}_i\}$$

は $\overline{\mathcal{F}}_S^1$ をさらに緩和した領域となる．$\overline{\mathcal{F}}_S^2$ の ISS を $\overline{S}^2$ とすると，

$$\overline{S}^2 := \{\mathbf{e}_j : 1 \leq j \leq r, j \neq k\}$$
$$\cup\{\mathbf{e}_k + \sum_{j \in I} \mathbf{e}_j : I \subseteq I_<, a_k + \sum_{j \in I} a_j \leq \bar{b}_i,$$

```
procedure Integral_Basis_Method
INPUT: c̄_N, F_N
OUTPUT: "optimal"
  or "not optimal: t is better"
begin
  S := S^0;
  while true do begin
    select v^k ∈ {v ∈ S : c̄_N^⊤ v < 0};
    if no such v^k exists then return "optimal";
    if v^k ∈ F_N then
      return "not optimal: v^k is better";
    S̄ := ISS(F̄_S);
    S := S';
  end;
end
```

図 1 Integral Basis Method のアルゴリズム
Fig. 1 Algorithm for Integral Basis Method.

$$a_k + \sum_{j \in I} a_j - a_l > \bar{b} (\forall l \in I)\}$$

となる．文献 5)，6) ではさらに，*Generalized Upper Bound*（GUB）制約を考慮することでこの ISS から不要な要素を減らす手法や，右辺値に正の値を加えて緩和することで，ISS の要素数が極端に増えることを防ぐ手法，S に冗長な要素が含まれることを簡単な GUB 制約式を追加することで防ぐ *Symmetry Breaking Constraint* について述べられている．本研究では GUB 制約と Symmetry Breaking Constraint を利用している．

3. QAP の全整数線形計画問題による定式化

Σ_n を n 次対称群，π_i を $\pi \in \Sigma_n$ の i への作用とし，$A = (a_{ij}) \in \mathbf{Z}_+^{n \times n}$，$B = (b_{ij}) \in \mathbf{Z}_+^{n \times n}$ を問題として与えられる n 次正方行列とすると，QAP は

$$\min \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{\pi_i \pi_j} b_{ij} \tag{1}$$

$$\text{s.t. } \pi \in \Sigma_n \tag{2}$$

と定式化される．

QAP の整数線形計画問題としての定式化は複数存在するが，今回は Kaufman と Broeckx による方法[2),7)]を利用した．

$$d_{ik} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} a_{ij} b_{kl}$$

とすると，QAP は全整数線形計画問題 (3)〜(8) として定式化される．

$$\min \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} y_{ik} \tag{3}$$

$$\text{s.t. } \sum_{i=1}^{n} x_{ik} = 1 \quad (1 \le k \le n), \tag{4}$$

$$\sum_{k=1}^{n} x_{ik} = 1 \quad (1 \le i \le n), \tag{5}$$

$$d_{ik} x_{ik} + \sum_{j=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} a_{ij} b_{kl} x_{jl} - y_{ik} \le d_{ik} \quad (1 \le i, k \le n), \tag{6}$$

$$x_{ik} \in \{0, 1\} \quad (1 \le i, k \le n), \tag{7}$$

$$y_{ik} \in \mathbf{Z}_+ \quad (1 \le i, k \le n). \tag{8}$$

元々は y_{ik} を連続変数としているが，全整数線形計画問題とするためにここでは整数変数としている．

4. QAP の基底形式

この章では，Integral Basis Method を QAP に適用するにあたって必要になる，QAP の定式化 (3)〜(8) の解に対応する基底形式の作成方法について説明する．表記を簡単にするために，最適性を検証しようとする QAP の解が群論でいうところの単位元 $\mathbf{e}$（$e_i = i$）であるとする．単位元ではない $\pi^* \in \Sigma_n$ については，行列 B を適切に並べ替えることで，$\mathbf{e}$ を解とする問題を作成することができる．

式 (5) の n 本の等式を $2n$ 本の不等式に分解してそれぞれにスラック変数 s_i，t_i（$1 \le i \le n$）を追加する．また，式 (6) のスラック変数 $\hat{y}_{ik}$ を追加する．このとき，$(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N)$ として，

$$\mathbf{x}_B = \begin{pmatrix} x_{ii} (1 \le i \le n), \\ y_{ii} (1 \le i \le n), \\ \hat{y}_{ik} (1 \le i, k \le n, i \ne k), \\ s_i (1 \le i \le n), \\ t_i (1 \le i \le n) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{x}_N = \begin{pmatrix} x_{ik} (1 \le i, k \le n, i \ne k), \\ y_{ik} (1 \le i, k \le n, i \ne k), \\ \hat{y}_{ii} (1 \le i \le n) \end{pmatrix}$$

ととり，

$$\bar{\mathbf{b}} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}, \\ \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{ij} (1 \le i \le n), \\ d_{ik} - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{kj} \\ \quad (1 \le i, k \le n, i \ne k), \\ \mathbf{0}, \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

とすると，$(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N) = (\bar{\mathbf{b}}, \mathbf{0})$ が単位元 $\mathbf{e}$ に対応する基底解となる．このとき，$\bar{c}_0$，$\bar{\mathbf{c}}_N$，$\mathcal{F}_N$ はそれぞれ，

$$\bar{c}_0 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{ij}, \tag{9}$$

$$\bar{\mathbf{c}}_N = \begin{pmatrix} \bar{c}_{x_{ik}} (1 \le i, k \le n, i \ne k), \\ \bar{c}_{y_{ik}} (1 \le i, k \le n, i \ne k), \\ \bar{c}_{\hat{y}_{ii}} (1 \le i \le n) \end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$\bar{c}_{x_{ik}} = \sum_{j=1}^{n} (a_{ji} b_{jk} - a_{jk} b_{jk}) - d_{kk}, \tag{11}$$

$$\bar{c}_{y_{ik}} = 1, \tag{12}$$

$$\bar{c}_{\hat{y}_{ii}} = 1, \tag{13}$$

$$\mathcal{F}_N = \{(x_{ik}, y_{ik}, \hat{y}_{ii}) \in \{0,1\}^{n^2-n} \times \mathbf{Z}_+^{n^2} : \text{式 } (15) - (19)\} \tag{14}$$

となる．$\mathcal{F}_N$ の定義で省略した式 (15)〜(19) は以下のとおりである．

$$\sum_{i=1, i\neq k}^{n} x_{ik} \leq 1 \quad (1 \leq k \leq n), \tag{15}$$

$$\sum_{k=1,k\neq i}^{n} x_{ik} - \sum_{k=1,k\neq i}^{n} x_{ki} \leq 0 \quad (1 \leq i \leq n), \tag{16}$$

$$-\sum_{k=1,k\neq i}^{n} x_{ik} + \sum_{k=1,k\neq i}^{n} x_{ki} \leq 0 \quad (1 \leq i \leq n), \tag{17}$$

$$\begin{aligned} &-y_{ik} + d_{ik}x_{ik} \\ &\quad + \sum_{j=1}^{n} \sum_{l=1,l\neq j}^{n} (a_{il}b_{kl} - a_{ij}b_{kl})x_{jl} \\ &\quad \leq d_{ik} - \sum_{j=1}^{n} a_{ij}b_{kj} \\ &\qquad (1 \leq i,k \leq n, i \neq k), \end{aligned} \tag{18}$$

$$\begin{aligned} &-\hat{y}_{ii} + \sum_{j=1,j\neq i}^{n} d_{ii}x_{ji} \\ &\quad - \sum_{j=1}^{n} \sum_{l=1,l\neq j}^{n} (a_{il}b_{il} - a_{ij}b_{il})x_{jl} \\ &\quad \leq \sum_{j=1}^{n} a_{ij}b_{ij} \qquad (1 \leq i \leq n), \end{aligned} \tag{19}$$

この形式は制約式と変数を増やしているが，Integral Basis Method では基底変数の数はそれほど問題にならない．そこで，QAP の制約式の形状をできるだけ残すことで改良を考えやすくするようこの形式を採用した．

以上により全整数線形計画問題の実行可能な基底形式が与えられたことになるので，この時点で SKR を用いて，Integral Basis Method を適用することが可能である．

5. QAP に対する Integral Basis Method の実装

図 1 に示したアルゴリズムでは S を保持していたが，実際の実装では同時に $\mathcal{F}_S$ を保持することとした．これは，Strengthened Knapsack Relaxation により $\overline{\mathcal{F}}_S$ を求める際に，$\mathcal{F}_S$ が必要になるためである．ただし，式 (15) は GUB 制約であり，SKR に利用することはない．また，式 (16)，(17) は簡単に生成できることから，明示的に保持するのではなく，必要なときに生成することとした．したがって，$\mathcal{F}_S$ のうち，式 (18)，(19) を保持する．

また，式 (4) から式 (15) が導かれるのと同様に，式 (5) から GUB 制約

$$\sum_{k=1,k\neq i}^{n} x_{ik} \leq 1 \quad (1 \leq i \leq n)$$

を導くことができる．この制約は $\mathcal{F}_N$ に暗に含まれる GUB 制約と考えることができる．SKR の GUB 制約として，この制約も考慮することとした．

6. 定式化の性質を利用した緩和方法

4 章で説明した基底形式と SKR を用いて Integral Basis Method を実装したところ，単純な Integral Basis Method の適用では n が大きくなるにつれて，S が極端に大きくなることが分かった．この原因としては，S から $\mathbf{v}$ を消去して新たに S' を生成したときに新しく追加された要素 $\mathbf{v}'$ のほとんどで $\overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}' < \overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}$ となっていたことがあげられる．そのため，$\mathbf{v} \in \mathcal{F}_N$ となるまで S の更新が行われ続けてしまう．なぜこのようなことが起きるかというと，$\overline{\mathbf{c}}_N$ を見ると，式 (11) において，d_{kk} はかなり大きく，ほとんどの場合で式 (11) が負となっており，$\mathbf{v}'$ に x_{ik} 成分が多く含まれていると，それだけ $\overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}'$ が小さくなる．

$\overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}'$ を大きくするには，$\hat{y}_{ii}$，y_{ik} 成分を多く含むようにしなければならない．しかし，$\hat{y}_{ii}$，y_{ik} を含む唯一の制約式である式 (18)，(19) は係数が負となる項が多く，この制約式を利用した緩和では S' が大きくなってしまう．

そこで我々は，式 (6) に遡って，この式の緩和を考えることで，負の項が少ない制約式を導くことを考えた．式 (6) で

$$\alpha \leq \sum_{j=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} a_{ij}b_{kl}x_{jl}$$

となる α が求まれば，

$$d_{ik}x_{ik} - y_{ik} \leq d_{ik} - \alpha$$

と y_{ik} のみ係数が負となる制約式を導くことができる．この制約式を緩和として用いることで，都合の良い S' を得ることができる．

α の値は制約式 (4)，(5) と合わせて考えると，次の割当て問題の最適値を α とすることができる．この割当て問題は一般の割当て問題よりも簡単で，$\mathrm{O}(n \log n)$ で解くことができる．

$$\min \sum_{j=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} a_{ij}b_{kl}x_{jl} \tag{20}$$

$$\text{s.t.} \sum_{j=1}^{n} x_{jl} = 1 \quad (1 \leq l \leq n), \tag{21}$$

$$\sum_{l=1}^{n} x_{jl} = 1 \quad (1 \leq j \leq n), \tag{22}$$

$$x_{jl} \in \{0,1\} \quad (1 \leq j,l \leq n) \tag{23}$$

式 (6) の n^2 個の項すべてを緩和するのではなく，割当て問題の部分問題となるように緩和することで，任意の $\mathbf{v} \in S$ に対して，その x_{ik} 成分が残るような制約式を導くことができる．

たとえば次の割当て問題

$$\min \sum_{j=1,j\neq i}^{n}\sum_{l=1,l\neq k}^{n} a_{ij}b_{kl}x_{jl} \tag{24}$$

$$\text{s.t.} \sum_{j=1,j\neq i}^{n} x_{jl} = 1 \quad (1 \leq l \leq n, l \neq k), \tag{25}$$

$$\sum_{l=1,l\neq k}^{n} x_{jl} = 1 \quad (1 \leq j \leq n, j \neq i), \tag{26}$$

$$x_{jl} \in \{0,1\} \quad (1 \leq j,l \leq n, j \neq i, l \neq k) \tag{27}$$

の最適値を β とすると，

$$\beta \leq \sum_{j=1,j\neq i}^{n}\sum_{l=1,l\neq k}^{n} a_{ij}b_{kl}x_{jl}$$

であるので，

$$d_{ik}x_{ik} + a_{ii}b_{kk}x_{ik} + \sum_{l=1,l\neq k}^{n} a_{ii}b_{kl}x_{il} + \sum_{j=1,j\neq i}^{n} a_{ij}b_{kk}x_{jk} - y_{ik} \leq d_{ik} - \beta$$

を導くことができる．さらに x_{ik}，y_{ik} 以外の項を落として

$$(d_{ik} + a_{ii}b_{kk})x_{ik} - y_{ik} \leq d_{ik} - \beta$$

とすることができる．

7. 実験結果

この章では前節の改良によりどのくらい効率が向上したか調べるため，ベンチマーク問題に基づいて作成した問題と，その最適解に対して最適性の検証を行った結果を示す．QAP のベンチマーク問題としては QAPLIB の問題がよく使われる．しかし，QAPLIB には最小でも $n = 12$ と大きな問題しかないため，その元となった文献 3)，10)，13) から問題を選択した．これらの問題は電子的なファイルとして，文献 12) から入手可能である．ただし，nug9 は同系統のインスタンスと同じルールで独自に作成した．

表 1 に最適性を検証するまでの計算時間を，**表 2** に反復回数と最終的な S の要素数を示す．ここで反復回数とは，図 1 における S' を求めた回数を示す．改良前の列が，前節で示した緩和を使わず SKR のみを使用した場合で，改良後の列が SKR に加えて前章で示した緩和を利用した場合である．

表 2，表 1 より，前章で示した緩和を利用することで反復回数が大きく減少し，多くの問題では最終的な S の要素数と計算時間が減少していることが分かる．

表 1 計算時間（秒）の比較
Table 1 Computing time (sec.)

問題	n	改良前	改良後	gywopt	GLPK
nug5	5	0.01	0.0	1.36	0.0
nug6	6	0.06	0.03	223.38	1.0
nug7	7	1.01	0.29	–	5.0
nug8	8	41.90	22.92	–	71.0
nug9	9	2928.22	1196.14	–	*
nug10	10	–	35099.8	–	*
tai5a	5	0.0	0.0	2.66	0.0
tai6a	6	0.09	0.11	111.78	0.0
tai7a	7	1.03	0.88	–	3.0
tai8a	8	33.51	12.73	–	48.0
tai9a	9	2608.09	1453.58	–	1122.0
esc8a	8	58.44	6.16	–	4.0
esc8b	8	96.61	188.86	–	7.0
esc8c	8	78.53	137.48	–	9.0
esc8d	8	71.06	84.25	–	3.0
esc8e	8	91.53	114.27	–	3.0
esc8f	8	67.78	82.72	–	3.0

表 2 反復回数，S の要素数の比較
Table 2 The number of iterations and size of S.

	反復回数		S の要素数	
問題	改良前	改良後	改良前	改良後
nug5	162	7	117	56
nug6	684	51	715	389
nug7	3489	111	5033	1501
nug8	23834	496	40282	15813
nug9	176556	1196	362798	36798
nug10	–	1871	–	665073
tai5a	147	31	120	133
tai6a	637	118	717	729
tai7a	3216	168	5037	2523
tai8a	19815	219	40318	9402
tai9a	157660	1851	362876	132359
esc8a	33237	5701	30232	21371
esc8b	34561	3727	39230	45828
esc8c	30302	2537	40228	42940
esc8d	31465	2967	39953	39907
esc8e	38220	4221	37708	38539
esc8f	31465	2967	39953	39907

また，比較対象として，分枝限定法ベースのソルバである GLPK[4] と Integral Basis Method の実装である gywopt[8] で QAP を整数線形計画問題として解いたときの計算時間を表 1 に載せている．GLPK では式 (3)〜(8) から式 (8) を $y_{ik} \in \mathbf{R}_+$ とした定式化を一般の混合整数線形計画問題として解いた．gywopt ではこの定式化はうまく処理できなかったため，Padberg と Rijal による 0-1 変数による定式化[2),11)] を解くこととした．gywopt による Integral Basis Method では $n = 6$ までしか解くことができなかった．GLPK では nug9，nug10 については，“numerical problems with basis matrix” というエラーを表示して止まってしまった．

前章で示した緩和問題は分枝限定法ベースの解法ではほとんど役に立たないと思われる．しかし，Integral Basis Method ではこれらの不等式を緩和として利用することで，集合 S から 1 つの要素 $\mathbf{v}$ を取り除き，$\overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v} \le \overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}'$ となるような $\mathbf{v}'$ を追加した集合 S' を求めることができる．この緩和を利用することが有効であったことが実験結果から分かる．

また，一般の整数線形計画問題として Integral Basis Method を適用しただけでは非常に小さな問題についてしか最適性を検証することができなかったが，本研究での改良により，一般の整数線形計画問題に対する分枝限定法に近い性能を実現することができた．

8. おわりに

本研究では QAP に対する Integral Basis Method の実装とその改良を行った．実装の過程を通して，

- $\mathcal{F}_N$ に表れず，暗に含まれている GUB 制約があること
- $\mathcal{F}_S$ 全体を保持しなくても，暗に保持することが可能な制約があること

が分かった．また，実験の結果，単純な Integral Basis Method の適用では，S が極端に大きくなることがあり，その原因としては主に，

- $\overline{\mathbf{c}}_N$ によっては，$\overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}' < \overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}^k$ となる $\mathbf{v}'$ を多く含む S' を生成することがあること
- $\overline{\mathcal{F}}_S$ の制約式に負の項が多く，$\overline{S}$ が極端に多くなること

の 2 つがあることが分かった．$\overline{S}$ の要素数を減らす方法は文献 5)，6) で検討されているが，本研究では $\overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}'$ を考慮することで，大幅な効率の改善が可能であることが分かった．$\overline{\mathbf{c}}_N^\top \mathbf{v}'$ を考慮していれば，$\mathcal{F}_S$ から大きく緩和した $\overline{\mathcal{F}}_S$ を用いても十分に効果があるといえる．このことは，より精密な制約式を求めようとする切除平面法と対照的であり，非常に興味深い．また，QAP のように特徴的な性質を持つ定式化では，基底形式の緩和の代わりに元の制約式において緩和を考えることも有効であることが分かった．これらの手法は，QAP に限った話ではなく，一般の整数線形計画問題を対象とするときでも有効であろうと考えられる．

本研究で作成した実装は，QAP に対する新たな厳密解法ということもできる．分枝限定法ベースの解法では nug30（$n = 30$）などが解かれていること[1)] と比べると，現時点では $n = 10$ までの小規模な問題についてしか解くことができていないが，今後のさらなる改良の余地があると思われる．また，分枝限定法と違い，最適性を保証する付加的な情報を得ることができるという特徴もある．今のところこの情報を活用する方法については検討されていないが，線形計画問題に対する単体法のように，感度分析・再最適化などに利用することができるのではないかと考えている．

今回は解の最適性検証のみを行ったが，今後の改良でどんな解から始めても最適解を求めることができるようにしたいと考えている．

謝辞 本研究の一部は，科学研究費補助金基盤研究(C)(2)(No.16510105）の補助を受けている．

参 考 文 献

1) Anstreicher, K., Brixius, N., Goux, J.-P. and Linderoth, J.: Solving large quadratic assignment problems on computational grids, *Mathematical Programming*, Vol.91, No.3, pp.563–588 (2002).

2) Çela, E.: *The Quadratic Assignment Problem Theory and Algorithms*, Kluwer Academic Publishers (1998).

3) Eschermann, B. and Wunderlich, H.: Optimized synthesis of self-testable finite state machines, *20th International Symposium on Fault-Tolerant Computing* (*FFTCS 20*), Newcastle upon Tyne (1990).

4) GNU project: GNU Linear Programming Kit. http://www.gnu.org/software/glpk/

5) Haus, U.-U., Köppe, M. and Weismantel, R.: The Integral Basis Method for Integer Programming, *Mathematical Methods of Operations Research*, Vol.53, pp.353–361 (2001).

6) Haus, U.-U., Köppe, M. and Weismantel, R.: A Primal All-Integer Algorithm Based on Irreducible Solutions, *Mathematical Programming, Series B*, Vol.96, pp.205–246 (2003).

7) Kaufman, L. and Broeckx, F.: An Algorithm for the Quadratic Assignment Problem using Benders' Decomposition, *European Jour-*

nal of Operational Research, Vol.2, pp.204–211 (1978).
8) Köppe, M. and Haus, U.-U.: The primaldual Project. http://www.math.uni-magdeburg.de/primaldual/
9) Nemhauser, G. and Wolsey, L.: *Integer and Combinatorial Optimization*, Wiley (1998).
10) Nugent, C., Vollmann, T. and Ruml, J.: An experimental comparison of techniques for the assignment of facilities to locations, *Operations Research*, Vol.16, pp.150–173 (1968).
11) Padberg, M. and Rijal, M.: *Location, Scheduling, Design and Integer Programming*, Kluwer Academic Publishers (1996).
12) Taillard, E.: Quadratic assignment instances. http://ina.eivd.ch/collaborateurs/etd/problemes.dir/qap.dir/qap.html
13) Taillard, E.: Robust tabu search for the quadratic assingnment problem, *Parallel Computing*, Vol.17, pp.443–455 (1991).
14) Wolsey, L.: *Integer Programming*, Wiley (1998).

(平成 17 年 8 月 25 日受付)
(平成 17 年 10 月 13 日再受付)
(平成 17 年 10 月 21 日採録)

鴻池　祐輔（正会員）

1978 年生．2006 年東京農工大学大学院工学教育部電子情報工学専攻博士後期課程修了，博士（工学）．同年東京農工大学工学府・工学部産学官連携研究員（現職）．主に整数計画問題の解法とその並列化に興味を持つ．オペレーションズ・リサーチ学会会員．

品野　勇治（正会員）

1961 年生．1997 年東京理科大学大学院工学研究科博士課程修了，博士（工学）．同年東京理科大学助手．1999 年東京農工大学講師，2004 年同大学助教授（現職）．主に，数理計画法の理論と応用の研究，組合せ最適化問題に対する並列・分散アルゴリズムとその実装に関する研究に従事．オペレーションズ・リサーチ学会，IEEE，ACM 各会員．

藤江　哲也

1969 年生．1998 年東京工業大学大学院情報理工学研究科数理・計算科学専攻博士後期課程修了．博士（理学）．同年神戸商科大学管理科学科助手．2004 年より，兵庫県立大学経営学部助教授．離散最適化の理論と応用に関する研究に従事．日本オペレーションズ・リサーチ学会，日本経営工学会，日本応用数理学会，Mathmatical Programming Society 各会員．