アルゴリズム 45－2
（1995．5．12）

クラスタ化と段階的経路精細化による巡回セールスマン問題の発見的解法

雄山 真弓　岡田 孝

関西学院大学情報処理研究センター

ユークリッド型巡回セールスマン問題の近似解を求める新しい発見的方法を報告する。この方法では最初に、空間内の近接性に基づいて都市の階層的クラスタ化を行う。ついで、上位レベルにある数個の大きなクラスタを対象として、クラスタを単位とした全体の概略的な経路を作成する。その後順次下位レベルのより小さなクラスタを対象として、クラスタ内経路の精細化を行う。本方法では、同時に考慮するクラスタ数を変えることにより、解の精度を調節できる。乱数により生成した１６都市の座標を用いて計算機実験を行い、分枝限定法によって得られた最適解との比較をおこなった。その結果、半数以上の場合に最適解と一致し、平均誤差が１％以下となる解を高速に得られることが判明した。本方法で最適解が得られなかった場合の考察を含めて報告する。

A New Heuristic Method of the Traveling Salesman Problem Based on Clustering and Stepwise Tour Refinements

Mayumi OYAMA and Takashi OKADA

Information Processing Research Center
Kwansei Gakuin University
Uegahara, Nishinomiya, 662, JAPAN
(E-mail: oyama@kgupyr.kwansei.ac.jp)

A new heuristic method is proposed to solve Euclidean traveling salesman problem. Cities are first clustered hierarchically based on the distances among cities. A rough picture of the tour is computed among several upper level clusters. Then, refinements of tours inside clusters are done recursively for the lower level clusters. The accuracy of solutions can be adjusted by changing the number of clusters in the tour computation. Computer experiments for randomly generated 16 cities problems have shown that tours obtained were the same as the exact solutions in more than half cases, and that the average deviation from the exact solutions is about 1%. Further improvements of the method is discussed with reference to the cases resulting in nonoptimal paths.

1．はじめに

平面上にn個の点が与えられているとき、それぞれの点を一度だけ通って最小距離で一巡するような経路を発見する問題は、２次元あるいはユークリッド型巡回セールスマン問題と呼ばれている。この問題は通常の巡回セールスマン問題と同様に、ＮＰ完全問題であることはよく知られており、また実用面からも大変重要な問題である。しかし、高度なテクニックを駆使した分枝限定法を用いても、点の数が多くなると指数関数的に処理時間がかかり、最適解を求めることは実際には困難である。

一方、これまでに種々の近似解法が提案されてきた[1]。これらの解法の中で巡回路構築型と呼ばれるものには、部分巡回路を次第に拡大していき最終的に全ての点を巡るnearest insertion 法やfarthest insertion 法、最小木とのマッチングにより得たオイラー閉路を巡回路に変換するChristofides法、平面を小領域に分割して各領域内で作られた巡回路を全体の巡回路に変換するKarpのpartition法、各点を[0,1]空間に写像して昇順に並べるspace filling curve法などがある。また、すでに求められた巡回路を部分的に入れ換えてより良い巡回路を探索する巡回路改善型と呼ばれるものには、2-opt(3-opt)法やLin-Kernighan法などがよく知られている。通常は、これらを組み合わせた併用型がよく使われているようである。また、最近では遺伝的アルゴリズム[2]やニューラルネットワーク[3,4]、２分決定グラフ[5]を用いた新しい試みもなされている。

本研究では、大規模な問題に適用可能でかつ精度の非常に高い発見的な方法について報告する。この方法は、巡回路構築型に属するものであるが、最初に都市集団単位で概略的な経路を求め、ついで都市集団を小さくしながら順次詳細化された経路を決定していく方法である。次節ではこの方法を定式化するとともに、７都市問題を例にとりあげ実際にどのようなアルゴリズムとなるかを紹介する。ついで乱数により生成した１６都市問題について、本方法の有効性を検証するために行った実験結果を述べる。最後に、計算機実験の過程で明らかになった点をもとに、本方法をさらに発展させるために可能な方策について議論する。

2．アルゴリズム

2．1　アルゴリズムの概要

ユークリッド空間における通常の巡回セールスマン問題を、より小さな多数の問題に分割して近似的に解くことを考える。まず、訪れるべき都市群の中で、互いに近接した一群の都市と、それらへの出入口となる都市が与えられた問題を考えることができる。図１の例に示したように、この問題では出入口となる都市が偶数個存在する必要がある。また、全体としての経路が部分的な閉路に分割されないように、その接続の仕方には制約が与えられることになる。

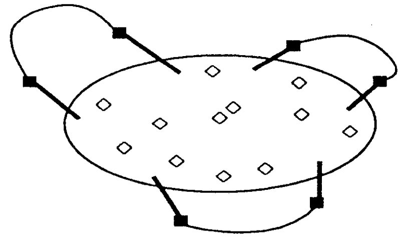

図１　出入口の指定された問題

この問題を解くためには、複数の出入口とその接続についての制約条件を取り扱えるように、通常の分枝限定法を拡張すればよい。しかし、出入口となる都市を確定するためには、全体の経路が概略的にでも判っている必要があり、このままでは何ら問題

を分割したことにはならない。そこで空間的に近接した都市群クラスタの概念を導入し、以下のような問題を定義する。

問題. 以下の要素が与えられているとする。

NT個の巡回すべき都市の集合 : $T=\{t_1, t_2, \ldots, t_{NT}\}$
NC個の都市群のクラスタの集合 : $C=\{c_1, c_2, \ldots, c_{NC}\}$
NE個の出入口となる都市 : $E=\{e_1, e_2, \ldots, e_{NE}\}$
出入口の接続に対する制約条件 : Cond(E)

ここで都市群のクラスタc_iは、T中の各都市の近接度によって定義されるものであり、それに属する都市の集合によって表わされる。また、T のすべての要素は、C 中のいずれかのクラスタに必ず 1 回属しているものとする。出入口となる都市e_iはT以外の都市であり、E の中に同一の都市が複数回あらわれてもよい。また、部分的な閉路を構成しないように、制約Cond(E)が与えられることになる。

ここで、E のすべての要素を出入口とし、Cond(E)を満たしながら、C のすべての要素を通る経路の中で、距離が最小となる経路を求めることが問題である。ただし、クラスタ内およびクラスタ間や、各クラスタと出入口の間の経路距離の評価関数は与えられているものとする。

この問題は、クラスタの定義方法およびクラスタ内外の各種距離の評価関数が与えられれば、通常の分枝限定法を拡張して解くことができる。その解は、対象となる都市群を巡回するための概略の経路を、クラスタのレベルで示しているものと見なすことができる。

次に、経路探索の対象となったCの各要素クラスタを近接度によりさらに統合し、2個のより大きなクラスタa, b を構成したとする。これらのクラスタは、T のすべての要素都市を空間的近接性により 2 分したものである。

ここで、クラスタa 中の都市群を、新たに上記問題中のT と考える。クラスタの定義方法は定められているので、これらの都市群をNC 個のクラスタに分割し C@a を定めることができる。また、すでに上位レベルの概略の経路が定まっているので、これらの都市群への出入口E@aと接続に対する制約条件Cond(E@a)も容易に計算できる。クラスタbに対しても同様である。このように考えると、この問題を大きなクラスタから小さなクラスタへと帰納的に解いていくことが、もともとの巡回セールスマン問題の解法になっていることがわかる。解くべき問題中の都市の数が 1 になった時には、最終的な経路におけるその都市の前後の都市が、すでに出入口として指定されていることになる。

これまでに示した巡回セールスマン問題の解法を、擬似的なプログラムの形で表すと次の refine のようになる。ここで、cluster, branchandbound はそれぞれクラスタ化を行うプログラムと最短経路を求めるプログラムであり、cluster2 はクラスタa, b とその出入口および接続に対する制約条件を求めるプログラムである。

```
procedure refine(T, E, Cond(E));
begin
 if T中の都市数 = 1
  then T中の都市に対して最終経路での隣接都市を登録
   else
     begin
       C := cluster(T);
      path := branchandbound(C, E, Cond(E));
     (a, E@a, Cond(E@a), b, E@b, Cond(E@b)) := cluster2(path, E, T);
      refine(a, E@a, Cond(E@a));
      refine(b, E@b, Cond(E@b));
     end;
end;
```

なお、最上位レベルでプログラムrefineを適用するときは、都市群中のいずれかの都市を出入口として与えればよい。

2．2　解法の解説

本節では、図２に示す７都市の問題を例として、実際に上記アルゴリズムの適用により問題を解く過程を説明する。なお、上記アルゴリズムの実現に当たっては、クラスタ化の方法とクラスタレベルでの距離の定義が大きな問題となる。以下に述べる例題および次節の計算機実験においては、クラスタ化法としては最近傍法をもちいた。また、経路距離の計算に当たっては、クラスタ内の距離は単純に無視することとし、クラスタ間の距離としては両クラスタに属する都市間での最短距離を採用した。さらに、クラスタレベルでの概略経路算出時には、同時に３個のクラスタを考慮することとした(NC=3)。

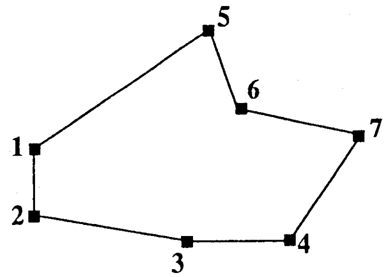

図２　７都市の問題

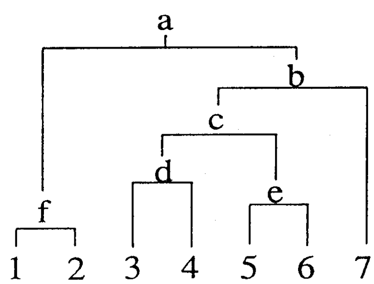

図３　階層的クラスタ化

ステップ１　与えられた７都市を最近傍法をもちいてクラスタ化し、図３に示すデンドログラムを作成する。以下のステップではこの結果を利用できるため、クラスタ化の計算はスキップする。なお、最下位レベルの各都市も、クラスタとして扱う。

ステップ２　最初は、最上位のクラスタa内の都市、すなわち全ての都市を巡回対象とする。この結果、クラスタc, f, 7の３個のクラスタが概略経路を構成する要素として選択される。

出入口として都市１を用いることとし、分枝限定法で探索される経路の中から３種の例を図４に示す。この図で、左端の１は入口の都市、右端の１は出口の都市をあらわす。図の(1)は、入口を出発した経路が、まずｆのクラスタに入り、次いで７,ｃのクラスタを経由して最後に１へ戻る概略経路をあらわしている。図の(2)も同様であるが、クラスタｃへ入った経路が一度7へ出て、再びｃへ戻り、その後ｆを経由して、出口１に至る経路をあらわしている。さらに(3)はｆクラスタに入った経路が7,ｃを通った後、再びｆを通る例である。分枝限定法により、このようなすべての経路を探索する。その結果この例では(3)、すなわち図５に示すものを最短の経路として決定する。

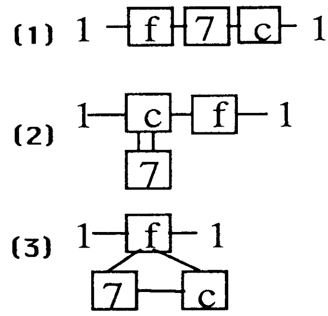

図４　経路の例（ステップ2）

このようにして得られた経路から、クラスタａのすぐ下の２つのクラスタｂ,ｆの出入口として、それぞれ都市１,２と3,７が得られる。なお、元来の出入口として与えた都市１は、便宜的なものであるので、クラスタｆの出入口としてはあつかわない。

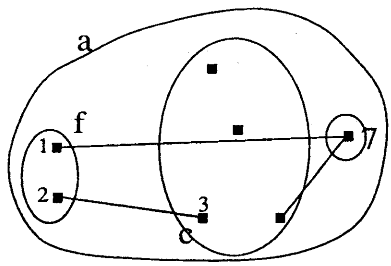

図５　最短経路（ステップ2）

<u>ステップ３</u>　図３のデンドログラムで、２番目に大きなクラスタｂ内の都市群を対象とした問題を考える。この問題では、巡回対象のクラスタはd, e, 7, 出入口は都市1,２となる。ステップ２と同様に分枝限定法で求めた最短の経路を図６に示す。この経路から、クラスタ7は出入口として都市6と4を与えられ、一方クラスタｃには２つの出入口ペア：都市1, 7と2, 7が与えられることが判る。

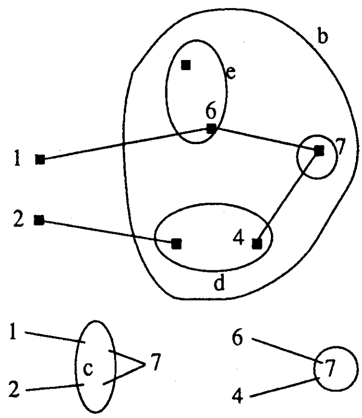

図６　最短経路（ステップ3）

<u>ステップ４</u>　３番目に大きなクラスタｃ内の都市群を対象とするとき、巡回対象のクラスタe, 3, 4と出入口のペア1, 7および2, 7から最短経路を選択することになる。この場合、出入口1と２を結ぶ経路を構成すれば閉路ができるため、1と7、2と7を結ぶことが接続の制約条件となる。あらゆる出入口接続の組合せ中で、このような制約条件を満たすものを選択し、さらにこれまでのステップと同様に分枝限定法を適用して、最短の経路を求める必要がある。なお、複数の出入口ペアが出現する場合は、経路が交差しないなどの条件を加え、探索空間を狭めて計算量を削減する。

この例では、制約条件を満たす出入口の接続は１種に限られる。この条件に沿って３個のクラスタを配置した例を、図７の(1)-(3)に示す。この場合には図８に示す(3)が最短経路となる。

ステップ５　クラスタd, e, f 内の都市を対象として順次同様に経路の精細化を行うことにより、全ての都市について出入口となる都市が決定される。その結果図２に示した全体の経路が求められる。

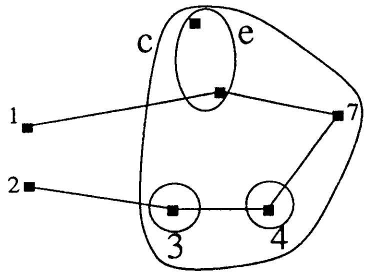

図８　最短経路（ステップ４）

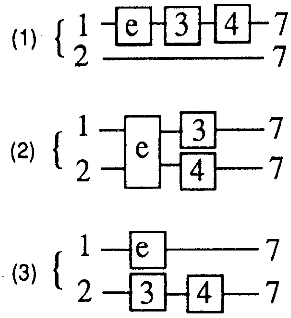

図７　経路例（ステップ４）

３．結果と議論

乱数を用いて作成した50組の16都市データについて、上記のアルゴリズムを適用し、分枝限定法で求めた最適解との比較を行った。表１はその結果を示す。ここでNCは、概略経路の計算において考慮したクラスタの数である。表中の例えばNC=4の欄では、得られた50組の解の中で29組が最適解と一致し、さらに最適解の経路長からのずれの平均が1.22%であったことを示している。都市数に比べてNCの値が大きいNC = 5, 6の場合を除いて、一般的にNCの値が大きくなるに従い、精度が上がっていることが判る。計算時間はNC=3,4,5に対しそれぞれ0.1秒から5秒程度であった。

Table1　Applications to 50 cases of 16 cities problem

NC [a]	2	3	4	5	6
Exact solutions [b]	11	24	29	41	39
Average deviation [c] (%)	4.12	1.97	1.22	0.19	0.28

a. *NC* is the number of subclusters considered in computing partial tours.
b. The number of exact solutions obtained by the current method out of 50 cases examined.
c. The average deviation of tour lengths from the exact solutions.

本アルゴリズムでは概略経路作成時にNC個のクラスタを考慮するが、実際に作成された経路の中でさらに経路を精細化するときに使われる情報は、NC個のクラスタを統合して得られる２個のクラスタへの出入口だけである。これはゲームの木で毎回 NC-1 手まで先読みをして次の１手を決定することに相当する。この観点からすれば、NC = 2 の場合は全く先読みをせずに現在の局面評価だけに基づいて手を決めることに相当し、NC の値が大きくなるほど先の局面まで読んだ結果に基づいて、次の１手を決めることに対応する。

このように、本方法は非常に精度の高い解を与える方法であるが、当然ながら最適解と

一致しないケースも多く出現する。また、都市数が増加した場合、非常に計算時間が長くなる場合が観測された。ここでは、これら現象の原因を解明し、現在のアルゴリズムをどのように発展させるべきかを議論する。

16都市の問題で、最適解が与えられなかった典型的な例を図9に示す。ここでa, b, cが配置すべき3個のクラスタである。点線で示した経路が最適解へと導くものであるが、我々の方法では実線で示したものを最短経路として与えている。しかも、この差異が次ステップの出入口の決定に直接かかわっているため、最終的に最適でない解を与えている。この原因は、aのような大きなクラスタに対しても、現在の方法ではクラスタ内距離を完全に無視していることにある。実際このケースでは、クラスタ間距離よりもクラスタ a 内の距離が長くなっている。

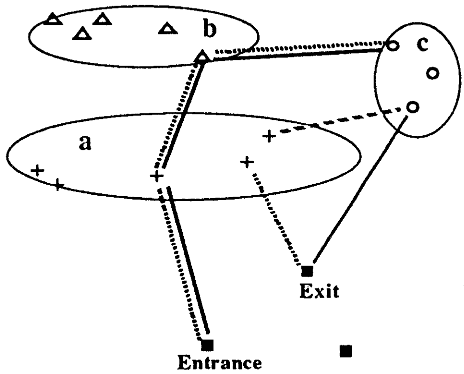

図9　最適解を与えない例

この問題を解決するためには2種の方向が考えられる。一方は、クラスタ内距離を何らかの方法で推定することであり、他方は階層的クラスタリングにおけるクラスタ間距離の定義を変更することである。前者の方法として、図１０に示すようなクラスタが存在するとき、その幾何学的特徴、例えばクラスタの形を長方形あるいは楕円で近似したときのサイズをもとに距離を推定する方法が考えられる。あるいはクラスタ内で出入口となる都市からもっとも遠い都市を訪れた場合の距離をクラスタ内距離とすることも有力な方法であろう。

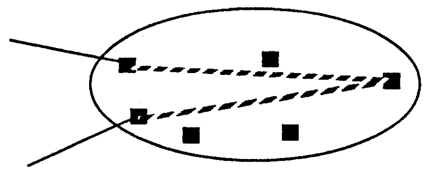
図10　クラスタ内距離の推定

他方のクラスタ間距離の定義を変える方法では、最近傍法の代わりに群平均法や重心法を使って、階層的にクラスタ化を行う。この場合、図10のような細長いクラスタよりもより円形に近い形でのクラスタ生成が予想される。その結果、クラスタ内距離を無視することによる悪影響が少なくなると期待される。

100都市問題についても本方法を適用したところ、問題によっては1時間を越える計算時間を要するケースが出現した。その理由は、出入口ペアの数が多くなり、探索空間が広がったことにあった。このように出入口ペアが増加した原因は、やはり最近傍法によるクラスタ化にあることが判明した。すなわち、図11に示すように非常に多くの都市を含む1つの巨大クラスタが出現し、これに含まれない周囲の都市が多くの小さなクラスタを作って、多数の出入口を構成することになる。クラスタ間距離定義の変更により、この問題点も解消すると予想される。

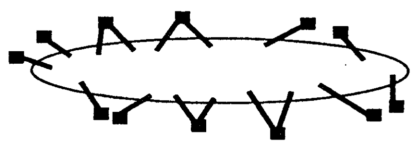
図11 出入口ペアの多い問題

4．おわりに

本報告で述べた方法は、計算量に関して言えば、都市数をnとすれば、クラスタ化について$n^2 \log n$, 経路精細化の段階がnとなる。ただし、出入口の数NEや同時に考慮するクラスタ数NCに関しては、計算量が指数関数的に増加する。クラスタ化の方法を変更することにより、NEの値を小さく押さえられれば現在以上に有効な方法になると予想される。また、クラスタ内距離の評価に適当な関数を与えることにより、本方法の与える結果が低い上界値を持つようにできると考えられる。今後、前節で述べた点について改善を加えるとともに、出入口の取り扱いについてもより効率的なアルゴリズムの研究、ソフトウェアの開発を行っていく予定である。

References

[1] Lawler, E. L. et al.: *The Traveling Salesman Problem*, John Wiley & Sons (1985).

[2] Goldberg, D. E. : *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison-Wesley Publishing Company, Reading (1989).

[3] Durbin, R., Szeleski, R. and Yuille, A.: An Analysis of the Elastic Net Approach to the Traveling Salesman Problem, *Neural Computation*, Vol.1, pp.348-358 (1989).

[4] 野沢浩: 大域結合写像としてのニューラルネットワークモデルとその応用、信学技法、NLP92-36 (1992).

[5] 柳谷雅之: 組合せ最適化問題のBDDによる解法、情報処理、Vol.34, pp.617-623 (1993).