

2次割当問題への適用による 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、6 問の問題を除いて計算時間の短縮に成功している。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 and Its 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 application 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 are could be effectively applicable also in general ILP.

1. はじめに

本稿では、整数線形計画問題の厳密解法を扱う。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²⁾。しかし、この手法はまだ歴史が浅く、今のところ小規模の問題しか解くことができない。本稿では問題を 2 次割当問題 (QAP) に限定した上で、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。

2. Integral Basis Method

Integral Basis Method は与えられた実行可能解が最適ではない場合は、より良い目的関数値を持つ別の実行可能解を提示し、最適解である場合は、より良い解が存在しないことを保証することで最適性の保証とする。

線形計画問題 (LP) $\min\{c^T x : Ax = b, x \geq 0\}$ の基底形式 $\min\{\bar{c}_0 + \bar{c}_N^T x_N : x_B + \bar{A}_N x_N = \bar{b}, x_B \geq 0, x_N \geq 0\}$ と、その基底解 $(x_B, x_N) = (\bar{b}, 0)$ では、

$\bar{c}_N \geq 0$ 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) $\min\{c^T x : Ax = b, x \in Z_+^{m+n}\}$ の場合はある実行可能基底解において $\bar{c}_k < 0$ であっても、最適解となる場合がある。

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 $\min\{\bar{c}_0 + \bar{c}_N^T x_N : x_B + \bar{A}_N x_N = \bar{b}, x_B \in Z_+^m, x_N \in Z_+^n\}$ とその実行可能基底解 $(x_B, x_N) = (\bar{b}, 0)$ 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、2) 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。 $\mathcal{F}_N := \{x_N : \bar{A}_N x_N \leq \bar{b}\}$ とすると以下の定理が成立する。

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

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

$\bar{c}_N^T t < 0$ となる $t \in \mathcal{F}_N$ を発見するか、そのよ

[†] 東京農工大学工学部情報コミュニケーション工学科
Department of Computer, Information and Communication Sciences, Faculty of Engineering, Tokyo 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

うな \mathbf{t} が存在しないことを示すことを、2) では *Augmentation Problem* と呼んでいる。Hausらの定義では、*Augmentation Problem* を解き、得られた \mathbf{t} により基底形式の書換えを行い、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。ここで、次の条件3を満たす集合 $S = \{\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \dots, \mathbf{v}^r\} \subseteq \mathbf{Z}_+^n$ を考える。

条件3 すべての $\mathbf{t} \in \mathcal{F}_N$ について、 $\mathbf{t} = \sum_{i=1}^r u_i \mathbf{v}^i$ ($u_i \in \mathbf{Z}_+$) を満たす $\mathbf{u} \in \mathbf{Z}_+^r$ が少なくとも一つ存在する。

$S^0 = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n\}$ は、条件3を満たす自明な集合である。条件3を満たす集合 S が与えられたとき、 $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{t}$ は \mathbf{u} を用いて、 $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{t} = \sum_{i=1}^r \bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}^i u_i$ と書ける。また、 $\mathcal{F}_S := \{\mathbf{u} \in \mathbf{Z}_+^r : \sum_{i=1}^r \bar{\mathbf{A}}_N \mathbf{v}^i u_i \leq \bar{\mathbf{b}}\}$ と定義することで、新たな整数線形計画問題 $\min\{\sum_{i=1}^r \bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}^i u_i : \mathbf{u} \in \mathcal{F}_S\}$ 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。また、 \mathcal{F}_N は \mathcal{F}_S を用いて次のように書ける。

$\mathcal{F}_N = \{\mathbf{x}_N \in \mathbf{Z}_+^n : \mathbf{x}_N = \sum_{i=1}^r u_i \mathbf{v}^i, \mathbf{u} \in \mathcal{F}_S\}$
 $u_i \geq 0$ から、次の条件4が成立すれば、 $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{t} < 0$ 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4 すべての $\mathbf{v}^i \in S$ ($1 \leq i \leq r$) について、 $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}^i \geq 0$ が成立する。

定義5 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 (ISS)* という。

S^* として \mathcal{F}_N の ISS を取ると、 $(\bar{\mathbf{b}}, \mathbf{0})$ が最適解であれば、条件4が必ず成立し、最適解でなければ、 $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v} < 0$ となる $\mathbf{v} \in S^*$ が必ず一つ以上存在する。

しかし、一般に整数線形計画問題において S^* を列挙することは非常に困難である。そこで、*Integral Basis Method* では、条件3を満たす $S \subseteq \mathbf{Z}_+^n$ と、 $\mathbf{v}^k \in S, \bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}^k < 0$ に対し、 $\mathbf{v}^k \notin S'$ となる S' を繰り返し求めることで、条件4を満たす S か、 $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}^k < 0$ となり、条件3を満たす $\mathbf{v}^k \in S$ を探すことで *Augmentation Problem* の解法としている。

集合 $S = \{\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2, \dots, \mathbf{v}^r\}$ が条件3を満たし、 $\mathbf{v}^k \in S$ が、 $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}^k < 0$ となり $\mathbf{v}^k \notin \mathcal{F}_N$ であるとする。このとき、 $\mathbf{u}' = \mathbf{e}_k$ として、 $\mathbf{u}' \notin \mathcal{F}_S$ である。 $\bar{\mathcal{F}}_S \subseteq \mathbf{Z}_+^r$ を $\mathbf{u}' \notin \bar{\mathcal{F}}_S$ であるような \mathcal{F}_S の緩和領域 ($\bar{\mathcal{F}}_S \supseteq \mathcal{F}_S$) とし、 $\bar{S} = \{\mathbf{u}^1, \mathbf{u}^2, \dots, \mathbf{u}^n\}$ を $\bar{\mathcal{F}}_S$ の ISS とする。ここで、集合 $S' := S \setminus \{\mathbf{v}^k\} \cup \{\sum_{i=1}^r u_i \mathbf{v}^i : \mathbf{u} \in \bar{S}, u_k \geq 1\}$ を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。

```

procedure Integral_Basis_Method
INPUT:  $\bar{\mathbf{c}}_N, \mathcal{F}_N$ 
OUTPUT: "optimal"
         or "not optimal:  $\mathbf{t}$  is better"
begin
   $S := S^0$ ;
  while true do begin
    select  $\mathbf{v}^k \in \{\mathbf{v} \in S : \bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v} < 0\}$ ;
    if no such  $\mathbf{v}^k$  exists then
      return "optimal";
    if  $\mathbf{v}^k \in \mathcal{F}_N$  then
      return "not optimal:  $\mathbf{v}^k$  is better";
     $\bar{S} := \text{ISS}(\bar{\mathcal{F}}_S)$ ;
     $S := S'$ ;
  end;
end

```

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

$\bar{\mathcal{F}}_S$ を ISS の列挙が容易なように取ることで、 $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}^k < 0$ 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。

2) では、ISS の列挙が容易な $\bar{\mathcal{F}}_S$ の取り方として、 \mathbf{e}_k が違反する制約式1本を元に緩和領域を取る方法をいくつか示している。本研究では1本の制約式と GUB (*Generalized Upper Bound*) 制約を同時に利用する *Strengthened Knapsack Relaxation (SKR)* を採用した。また2) で示されている *Symmetry Breaking Constraint* など、いくつかの改良手法については本研究でも使用している。

3. QAP の定式化と基底形式

Σ_n を n 次対称群、 π_i を $\pi \in \Sigma_n$ の i への作用とし、 $A, B \in \mathbf{Z}_+^{n \times n}$ を問題として与えられる n 次正方行列とすると、QAP は $\min\{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{\pi_i \pi_j} b_{ij} : \pi \in \Sigma_n\}$ と定式化される。

QAP の線形化にはいくつか方法があるが、今回は Kaufman と Broeckx による方法¹⁾ を利用した。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。 $d_{ik} = \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n a_{ij} b_{kl} x_{jl}$ とすると、QAP は全整数線形計画問題 (1)-(6) として定式化される。

$$\min \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n y_{ik} \quad (1)$$

$$\text{s.t. } \sum_{i=1}^n x_{ik} = 1 \quad (1 \leq k \leq n), \quad (2)$$

$$\sum_{k=1}^n x_{ik} = 1 \quad (1 \leq i \leq n), \quad (3)$$

$$d_{ik} x_{ik} + \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n a_{ij} b_{kl} x_{jl} - y_{ik} \leq d_{ik} \quad (1 \leq i, k \leq n), \quad (4)$$

$$x_{ik} \in \{0, 1\} \quad (1 \leq i, k \leq n), \quad (5)$$

$$y_{ik} \in \mathbf{Z}_+ \quad (1 \leq i, k \leq n) \quad (6)$$

表記を簡単にするために、最適性を検証しようとする

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 (3) を両方の不等式に分解してスラック変数 s_i, t_i を追加し、式 (4) のスラック変数 \hat{y}_{ik} を追加する。このとき、 $(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N), \bar{\mathbf{b}}$ を、

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

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

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

とすると、 $(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N) = (\bar{\mathbf{b}}, \mathbf{0})$ が先の解に対応する基底解となる。

4. 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 \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、制約式の一部は GUB 制約であり、SKR に利用することは無い。さらに一部の制約式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、必要ときに生成することとした。

また、式 (2) から式 GUB 制約が導かれるのと同様に、式 (3) から GUB 制約 $\sum_{k=1, k \neq i}^n x_{ik} \leq 1$ ($1 \leq i \leq n$) 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。

5. 定式化の性質を利用した緩和方法

3 節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のが分かった。この原因としては、 S から \mathbf{v} を消去して新たに S' を生成したときにその要素 \mathbf{v}' のほとんどで $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}' < \bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}$ 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点、 $\bar{\mathbf{c}}_N$ を見ると x_{ik} に対応する $\bar{\mathbf{c}}_N$ はほとんどの場合で負となっており、 \mathbf{v}' に x_{ik} 成分が

多く含まれていると、それだけ $\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}'$ が小さくなる。

$\bar{\mathbf{c}}_N^T \mathbf{v}'$ を大きくするには、 y_{ii}, \hat{y}_{ik} 成分を多く含むようにしなければならない。しかし、 y_{ii}, \hat{y}_{ik} を含む唯一の制約式は係数が負の項の数が多く、この制約式を利用した緩和では S' が大きくなってしまふ。

そこで我々は、式 (4) 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いた。式 (4) 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} のみが係数が負の項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 (2), (3) と合わせて考えると、次の割当問題の最適解の目的関数値が α となる。この割当問題は $O(n \log n)$ で解くことができる。

$$\min \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n a_{ij} b_{kl} x_{jl} \quad (7)$$

$$\text{s.t. } \sum_{j=1}^n x_{jl} = 1 \quad (1 \leq l \leq n), \quad (8)$$

$$\sum_{l=1}^n x_{jl} = 1 \quad (1 \leq j \leq n), \quad (9)$$

$$x_{jl} \in \{0, 1\} \quad (1 \leq j, l \leq n) \quad (10)$$

n^2 個の項すべてを緩和するのではなく、ちょうど割当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} 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。

6. 実験結果

この節では前節の改良によりどのくらい効率が改良されたかを調べるため、ベンチマーク問題と、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 の問題が良く使われる。しかし、QAPLIB には最小でも $n = 12$ と大きな問題しか無いため、その元となった問題を使用した。nug9 は同系統の問題から導出した独自の問題である。これらの問題は電子的なファイルとして、4) から入手可能である。

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 に加えて前節で示した緩和を利用した場合である。

表 2 から明らかなように前節で示した緩和により反復回数が大きく減少している。その結果、最終的な S の要素数と計算時間が減少している。

また、他の解法との比較として、分枝限定法ベースのソルバーである GLPK と Integral Basis Method の実装である gywopt³⁾ で QAP を (混合) 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 (1)-(6) から式 (6) 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

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 iteration and size of S

問題	反復回数		S の要素数	
	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

たため、Padberg と Rijal による 0-1 変数による定式化¹⁾を解くこととした。

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。

7. おわりに

本研究では Integral Basis Method を 2 次割当問題に適用することで、

- \mathcal{F}_N に暗に含まれている GUB 制約があること
- \mathcal{F}_S 全体を保持せずとも、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もあり、その原因としては主に、

- \bar{c}_N によっては、 $\bar{c}_N^T v' < \bar{c}_N^T v^k$ となる v' を多く含む S' を生成することがあること
- \mathcal{F}_S に負の項が多く、 \bar{S} が極端に多くなることの 2 つがあることが分かった。 \bar{S} の要素数を減らす方法は 2) で検討されているが、本研究では $\bar{c}_N^T v'$ 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。 $\bar{c}_N^T v'$ を考慮していれば、 \mathcal{F}_S から大きく緩和した $\bar{\mathcal{F}}_S$ 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、今後の更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。

参考文献

- 1) Çela, E.: *The Quadratic Assignment Problem Theory and Algorithms*, Kluwer Academic Publishers (1998).
- 2) 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).
- 3) Köppe, M. and Haus, U.-U.: The primaldual Project. <http://www.math.uni-magdeburg.de/primaldual/>.
- 4) Taillard, E.: Quadratic assignment instances. <http://ina.eivd.ch/collaborateurs/etd/problemes.dir/qap.dir/qap.html>.