Simulated Annealing 的手法を取り入れた無閉路有向グラフの最適系列分割問題の解法

01107771 小樽商科大学 加地太一 KAJI Taichi

1 はじめに

無閉路有向グラフの頂点を先行順位の関係を無視せずに各成分に分割する問題を系列分割問題と呼ぶ。本論文では無閉路有向グラフを系列分割するときに生ずるカット・エッジのコストの総和を最小化する問題を取り扱い、この問題を“総カット値を最小化する系列分割問題”と呼ぶことにする。その応用事例として、先行順位のある要素をその先行順位の制限を無視することなく、いくつかのグループに、カットエッジに付随した輸送コストを考慮して配置する問題などが考えられる。また、コスト関数や制約条件を問題の特性に合わせて変えることによって、ライン・バランシングの問題など多様な問題に適応させることが可能である。

この総カット値を最小化する系列分割問題に対して、動的計画法を適用することによって厳密解法[3]が構成できる。この解法は無閉路有向グラフの構造に強く依存しており、並列構造が認められるとき多項式オーダーであるが、ランダムな構造を持つ無閉路有向グラフでは指数的オーダーの計算時間を必要とし、この厳密解法ではランダムグラフに対して実用的な時間内での計算は不可能である。これに対して我々はSimulated Annealing 法的な考えを用い、さらに局部的な最適化を取り入れ、本問題に効果的な近似解法を実現する。

2 最適系列分割問題

総カット値を最小化する系列分割問題で考えるネットワークは、多重辺をもたない単一の入口と出口を持つn個の頂点からなる無閉路有向グラフ$D(V,E)$として与えられており、$D(V,E)$のすべての頂点$v\in V$には重み$w(v)$が、各有向辺$(u,v)\in E$にはコスト$c(u,v)$が付与されている。これらの値はすべての$u,v\in V$について、条件$0<w(v)\leq B$,および$c(u,v)\geq 0$を満たす整数であり､Bはブロックサイズと呼ばれる問題に固有な正の整数である。このときVをk個の疎な部分集合$V_1,V_2,\ldots,V_k$に以下の制約のもとで切断される辺のコストの総和を最小にする分割を求める。

(1)頂点間の先行順位関係を保持する。

(2)容量制約 $|V_i| = \sum_{v\in V_i} w(v) \leq B$

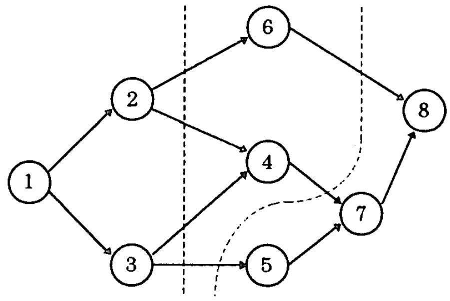
この制約条件(1)を満たす分割を系列分割と呼び、図１の（a）にその一例を示す。また、本問題を以後、単に<u>最適系列分割問題</u>と呼ぶ。

3 Simulated Annealing的手法による近似解法

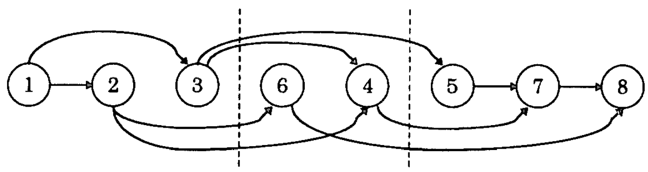
本問題の特徴として、解の成分集合の個数、各成分集合の要素数はともに不定であり、また各成分集合は頂点の重みの和がブロックサイズBを越えてはならないという容量制約を受けている。これに対して、データ構造、近傍移動の工夫、および局所的最適化により効果的な近似解法を実現する。

3．1 無閉路有向グラフと一列化グラフ

まず、無閉路有向グラフを一列化グラフに変換することによって、系列分割を計算処理に適した形に表現し、算法を効果的に実現する。無閉路有向グラフ$D(V,E)$の頂点集合Vはいつでも一列化（トポロジカルソート）が可能である。頂点をこの一列化の順に左から右に並べ換えて得られる同型なグラフを一列化グラフと呼ぶことにする。一列化された頂点列を$\{v_1,v_2,\ldots,v_n\}$とすると、一列化グラフの各頂点はこの順に左から右に並んでおり、すべての辺の向きは常に左から右に向かっている。また連続した頂点の並びからなる部分列$\{v_p,v_{p+1},\ldots,v_q\}$は系列を保持する$V$の部分集合となることを容易に示すことができる。それゆえ、無閉路有向グラフの系列分割は一列化グラフとその頂点列上の分割点（ブレイク・ポイント[2]）の並びを与えることによって生成できる（図１参照）。ここで部分列$\{v_p,v_{p+1},\ldots,v_q\}$をブロックと呼び、$[v_p,v_{q+1})$を用いて表わす。



(a) 無閉路有向グラフの系列分割



(b) (a)に対する一列化グラフの系列分割

図１ 無閉路有向グラフと一列化グラフの関係

3．2 近傍移動の実現

近傍構造の実現として､頂点の移動に基づく left-to-right 移動、right-to-left 移動を本問題の特色に合わせて構成し順次連続するブロックに適用することを試みる。任意の探索過程での解$x=(V_1,V_2,\ldots,V_k)$はある一列化グラフ

Dの頂点の並びと、ブレイクポイントの集合$\{b_1,b_2,\cdots,b_k\}$によって表現される。このとき、ブロック$V_i=[b_i,b_{i+1})$中からランダムに選択した頂点をvとする。以下で述べるコスト変化量δが改善される場合と、非改善のとき条件$\exp(\delta/t)>\mathrm{random}[0,1)$が成立した場合、$D$上での$v$を始点とする最短な流出辺の終点$u$の直前に$v$を移動する処理を行い、そうでない場合頂点の移動は行わない。この処理をブロック$V_1,V_2,\ldots,V_k$の順に適用した結果、新たな解x'への移動が行われる。この移動を多次元left-to-right移動と呼び、解xに対してある演算子を作用させた結果とみなし、$x'=\overrightarrow{multiN}\cdot x$で表す。right-to-left移動に関しても、vを終点とする最短な流入辺の始点uの直後にvを移動する同様な考えにもとづく処理をブロック$V_k,V_{k-1},\ldots,V_1$の順に適用する。これによる移動を多次元right-to-left移動と呼び、$x''=\overleftarrow{multiN}\cdot x'$で表す。あわせて、以上の過程でTabu Search法の考えを導入し、その効果についても検討してみる。

また、多次元left-to-right移動, 多次元right-to-left移動だけでは、解の実行可能性が失われるばかりでなく、成分集合の個数、大きさに大きな変化をもたらすことは望めない。そこで、ブレイク・ポイントの移動、新たな付加、および削除などによって実行可能性を回復して得られる実行可能解の集合を新たに解x''の近傍解の集合λと定義し、λの中で最も低いコストを示す解x'''への移行を示す関数をopt(x'')とする。ここでopt(x'')はKernighanの一列化グラフの最適系列分割問題を解く算法[(2),(4)]をそのまま利用して実現できる。この算法の計算量は$O(n)$であり、与えられた一列化グラフのもとで最適なブレイク・ポイント列を見出す。その結果、頂点のブロック間での移動によるコストの改善と、実行可能性の回復が行われる。これらの処理を一反復過程中において$x'''=opt(\overleftarrow{multiN}\cdot\overrightarrow{multiN}\cdot x)$の順序で行い、局所的に最良な近似効果を持つ近傍移動を達成する。

3．3　頂点移動にともなうコスト変化量の計算

left-to-right移動、およびright-to-left移動で用いるコスト変化量$\overrightarrow{\delta},\overleftarrow{\delta}$は以下の計算により効果が示される。一列化グラフ上で、vからの流出辺（への流入辺）の端点となる頂点の中で最も左側（右側）に存在する頂点の直前（直後）にvを移動すると考えたとき、このvを左端点（右端点）とするブロックで、頂点の重さの総和がブロックサイズBを越えないものの中で、重さの総和が最大であるものを$V^+(V^-)$で表わす。また、頂点uを右端点（左端点）とするブロックで、頂点の重さの総和がブロックサイズBを越えないものの中で、重さの総和が最大であるものを$W^-(u)$ $(W^+(u))$で表わす。

$$\overrightarrow{\delta}(v)=\sum_{s\in W^-(v)}c(s,v)-\sum_{t\in V^+}c(v,t) \qquad \cdots\cdots(1)$$

$$\overleftarrow{\delta}(v)=\sum_{t\in W^+(v)}c(v,t)-\sum_{s\in V^-}c(s,v) \qquad \cdots\cdots(2)$$

3．4　Simulated Annealing的アルゴリズム

以上のデータ構造、近傍移動、コスト変化量を用い、Simulated Annealing的考えにもとづき以下の算法を構成する。

```
Procedure simulated annealing
begin
    tmp := initial temperature;
    x := initial solution; x*:=x;
    while stop-criterion <> yes do begin
        for i:= 1 to r do begin
            x' := multiN(→) · x ;
            x'' := multiN(←) · x' ;
            x''' := opt(x'') ;
            if f(x''') < f(x*) then x* := x''';
            x := x''' ;
        end;
        tmp := tmp × phi;
        r := r × tau;
    end;
    best solution := x*;
end;
```

受理率（受理された頂点移動の数／要求される頂点移動の数）が０．８から０．１の間で良好な解が得られるので、その範囲で終了判定を設定する。そのとき、初期温度は辺コストの最大値の値に対してやや高めの値を用いる。またr=100, phi=0.9, tau=1.1とし計算を行う。

4　おわりに

本算法の挙動解析を行い、Simulated Annealing法における性質との比較を行う。また、２並列グラフに対しては厳密解が求めることが可能であり、相対誤差を求めた結果、近似度５％以内の良好な解が求まることが示された。以上より本算法は今回の問題に対して有効な近似解法を与えるものと考えられる。さらに、今後の問題として目的関数、制約条件を変化させることによって構成できるライン・バランシング問題などへの適用および効果について検討を試みたい。

参考文献

(1)Emile A. and Jan K. : "Simulated Annealing and Boltzmann Machines", John Wiley & Sons(1989).
(2)Kernighan,B.W. : "Optimal Sequential Partitions of Graphs", J.ACM, Vol.18, No.1, pp.34-40(1971).
(3)加地：「半順序の最適系列分割問題の構造と算法構成」、商学討究、Vol. 45、No. 2、pp.185-204(1994).
(4)加地，大内：「最適系列分割問題に対する効率的分枝限定法の構築と諸特性解析」，情報処理学会論文誌，Vol.35, No.3, pp.364-372(1994).
(5)久保：「Local SearchからSimulated Annealing,Tabu Searchへ」,モダンヒューリスティックス（平成６年度第２回ORセミナー）,pp.1-32(1994).
(6)藤沢、久保、森戸：「Tabu Searchのグラフ分割問題への適用と実験的解析」，電学論c ,Vol.114,No.4,pp.430-437(1994).