

研究報告書

「問題構造の解析に基づく組合せ最適化アルゴリズムの自動構成」

研究タイプ: 通常型

研究期間: 平成22年10月～平成26年3月

研究者: 梅谷 俊治

1. 研究のねらい

組合せ最適化の専門知識を持たない利用者が、産業や学術の幅広い分野において日々新たに生じる現実問題を短期間で解決するには、これらの問題を整数計画問題や制約充足問題などの汎用的な組合せ最適化問題に定式化し、その問題に対する高性能なアルゴリズムを適用することが望ましい。しかし、問題の汎用性が高まればアルゴリズムの性能向上に利用できる特徴的な構造が失われるため、汎用的な組合せ最適化問題に対して高性能なアルゴリズムを開発することは困難である。

産業や学術の幅広い分野に現れる現実問題は多種多様であり、これらの問題に共通して現れる特徴的な構造は存在しない。一方で、現実問題を定式化して得られる個別の入力データは無秩序で全く構造を持たないわけではなく、実際にはグラフ、論理、順序、割当などの典型的な離散構造で記述される特徴的な部分から構成される場合が多い。また、あらかじめアルゴリズムの仕様を全て決定する必要はなく、実行時にアルゴリズムの一部の仕様を変更すれば、個別の入力データから特徴的な構造を発見し、アルゴリズムの性能向上に利用することは可能である。

本研究では、整数計画問題などの汎用的な組合せ最適化問題に対して、実行時に個別の入力データからアルゴリズムの性能向上に役立つ特徴的な構造を発見し、その構造に合わせてアルゴリズムの設定や構成を自動的に決定する手法を提案し、大規模かつ多様な現実問題に対応できる汎用的かつ高性能な組合せ最適化アルゴリズムを実現する。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究では、実世界から収集された大規模データに基づく大規模かつ多様な 0-1 整数計画問題に対して、局所探索法を雛形とするメタヒューリスティクスを開発した。局所探索法は、現在の解に対してごく少数の変数の値に変更を加えて(近傍操作)得られる解集合(近傍)の中に改善解があれば、その解に移動する手続きを繰り返すメタヒューリスティクスの基本戦略である。その設計における自由度は大きく、個々の問題に含まれる特徴的な構造を把握した上で、探索空間、解の評価、近傍の定義、移動戦略などの各要素を注意深く設計することで高性能な局所探索法を実現できる。そこで、(A)各要素の設定と構成を自在に変更できる自由度を維持しつつ、大規模な整数計画問題に対応できる高速な局所探索法を基準として、(B)大規模な入力データから局所探索法の性能向上に役立つ特徴的な構造を短時間で発見し、(C)その構造に合わせて局所探索法の各要素の設定と構成を自動的に決定する手法を開発することで、大規模かつ多様な 0-1 整数計画問題に対応できる汎用的かつ高性能なメタヒューリスティクスを開発した。また、(D)0-1 整数計画問題のベンチマーク問題例に対する数値実験を通じて提案手法の有効性を確認した。

(2) 詳細

研究テーマ(A)「大規模な 0-1 整数計画問題に対する効率的な局所探索法の開発」

局所探索法の各要素の設定と構成を自在に変更できる自由度を維持しつつ、大規模な 0-1 整数計画問題に対応できる効率的な局所探索法を開発した。

局所探索法において、近傍内の改善解を発見するための探索は近傍探索と呼ばれる。局所探索法では計算時間の大部分が近傍探索に費やされるため、近傍探索の効率化はアルゴリズム全体の高速化に直結する。本研究では、0-1 整数計画問題に対して、現在の解に対して高々1つおよび2つの変数の値を反転させて得られる解の集合を反転させて得られる解の集合を近傍とする1反転近傍および2反転近傍における解の評価値を高速に計算する手法を開発した。

0-1 整数計画問題では、制約条件を満たす実行可能解を発見すること自体が困難であるため、目的関数に各制約条件の違反度を表すペナルティを加えた評価関数を用いる。解の評価値を計算するために目的関数と全ての制約条件を走査する必要がある、これが局所探索法の計算時間の大部分を占めている。しかし、局所探索法では近傍操作によってごく少数の変数のみ値が変化するため、現在の解と近傍解の間で値が変化した変数に関わる部分のみ再計算すれば、評価関数値の変化量を高速に計算できる。

本研究では、近傍内の解の評価に必要な情報を補助記憶に持ち、現在の解が移動する際に補助記憶を更新する方法を提案し、1反転近傍および2反転近傍の各近傍解の高速な評価を実現した。近傍内の解を評価する回数に比べて、現在の解が移動する回数ははるかに少ないため、補助記憶の更新に多少時間がかかるものの、アルゴリズム全体でも大幅な高速化を実現した。

研究テーマ(B)「局所探索法の性能向上に役立つ特徴的な構造の発見」

大規模な入力データから局所探索法の性能向上に役立つ特徴的な構造を高速に発見する手法を開発した。

0-1 整数計画問題に対して精度の良い近似解を求めるためには、複数の変数の値を同時に変更するより大きい近傍を持つ局所探索法を開発する必要がある。しかし、大規模な 0-1 整数計画問題では2反転近傍であっても近傍内の候補解の数が非常に多くなるため、大きな近傍を探索する際には改善する見込みの高い候補解にのみ絞り込む必要がある。

2反転近傍では、同じ制約条件に同時に現れる頻度の高い変数の組を同時に反転させると改善解が得られ易い傾向があることが分かる。そこで、各変数に対して、同じ制約条件に現れる変数のうち頻度の高い上位 1%を図1(左)に示すリストに格納し、局所探索法では2反転近傍の候補解をこのリストに含まれる変数に絞り込むことで探索の効率化を実現した。また、このリストをグラフの隣接リストと見なせば、図1(右)に示す変数間の関係を表すネットワークが得られる。大規模な整数計画問題では、リストの生成に多くの計算時間を要するため、実際には、リストの全ての行を前処理で生成するのではなく、空の状態から始めて、各変数に対して2反転近傍を適用する際に、その変数に対応するリストの行を遅延生成することで、探索に必要な部分における特徴的な構造を高速に発見した。

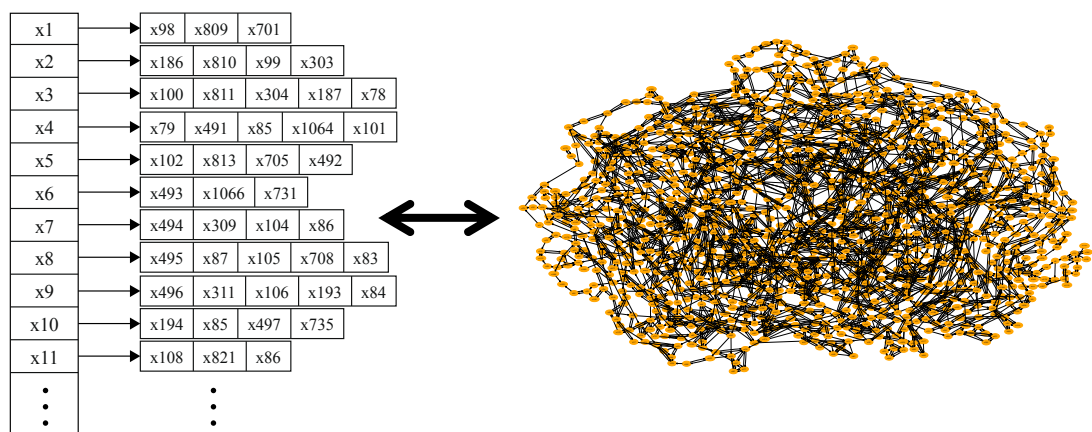


図1: 同じ制約条件に同時に現れる頻度の高い変数の組を格納したリスト(左)と変数間の関係を表すネットワーク(右)

研究テーマ(C)「特徴的な構造に基づく大規模な近傍探索の実現」

変数間の関係ネットワークの下で複数の変数の値を同時に変更する大規模近傍を持つ局所探索法を開発し、個々の組合せ最適化問題に対する専用解法と同程度の性能を実現した。

これまで多くの組合せ最適化問題では、その特徴的な構造を利用した大規模近傍に基づく効率的な局所探索法が開発されてきた。例えば、割当問題において割当先を交換する近傍操作、巡回セールスマン問題において2つの辺を入れ替える近傍操作は、0-1 整数計画問題では4つの変数を同時に反転する近傍操作に対応している。しかし、0-1 整数計画問題において、4反転近傍に含まれる全ての解を走査すれば精度の良い近似解が得られるわけではなく、それぞれ割当問題、巡回セールスマン問題と同様の特徴的な構造を持つ部分を発見できなければ効率的な局所探索法は実現できない。

本研究では、変数間の関係を表すネットワークから2反転近傍では改善しなかったものの有望な変数の組を記憶しておき、これらを組み合わせて4反転近傍を実現した。具体的には、変数間の関係を表すネットワークで評価関数値の変化量が小さい2反転近傍操作に対応する辺のみをたどって生成されるパスもしくはサイクルに対応する4反転近傍の解のみを走査することで、特徴的な離散構造に対応する部分を集中的に探索する局所探索法を実現した。

研究テーマ(D)「0-1 整数計画問題のベンチマーク問題例に対する数値実験」

混合整数計画問題のベンチマーク問題集に含まれる 0-1 整数計画問題の問題例に対して、現時点で最も高性能な混合整数計画ソルバーの1つである CPLEX12.5.1 と提案手法を適用した結果を比較した。提案手法では、2反転近傍の候補解となる変数の組を1%に絞り込んでいる上に、ds-big(制約:1042, 変数:174,997)や ivu06-big(制約:1177, 変数:2,277,736)などの大規模な問題例では、生成されたリストの行数の割合がそれぞれ 5.92%, 0.21%と非常に低いことから、2反転近傍のごくわずかな候補解を探索するだけで混合整数計画ソルバーでは実現できない高精度の近似解が求められることを確認した。

3. 今後の展開

実世界から収集された大規模データに基づく組合せ最適化問題は十分に整理されていない場合が多く、近年の情報爆発による問題の大規模・多様化も相まって、組合せ最適化の専門家であってもアルゴリズムの性能向上に役立つ構造を発見することが困難な問題が急増している。本研究により組合せ最適化の専門家ですら発見が困難な隠れた構造を自動的に発見できるようになれば、より高性能な組合せ最適化アルゴリズムの実現が期待できる。この点において、提案手法は計算困難な組合せ最適化問題に対する従来手法の限界を乗り越える新たな枠組みとしての発展が期待できる。

4. 評価

(1) 自己評価

本研究の当初の目標通り、個別の入力データからアルゴリズムの性能向上に役立つ情報を発見し、アルゴリズムの設定や構成を自動的に決定する枠組みに基づいて、大規模な 0-1 整数計画問題に対する高性能な局所探索法を実現できた。実際に、従来の数理計画法に基づくアプローチに全く頼ることなく、現時点で最も高性能な混合整数計画ソルバーを上回る性能を持つ組合せ最適化アルゴリズムを実装したことは、当該分野に大きなインパクトを与える研究成果である。また、多くのさきがけ研究者との交流を通じて、本研究の課題を新たなパラダイムとして展開するに足る多くのアイデアを得ることができた。一方で、局所探索法の基本部分の実装に多くの時間を取られたため、研究期間内に、新たなアイデアをほとんど実装できなかった点と、研究成果を国際会議や論文などにほとんど発表できなかった点が悔やまれる。

(2) 研究総括評価(本研究課題について、研究期間中に実施された、年2回の領域会議での評価フィードバックを踏まえつつ、以下の通り、事後評価を行った)。

問題データからアルゴリズムを組み立てる手法の研究である。ジェネリックプログラミングの視点から組合せ最適化アルゴリズムを使った問題定式化をサポートするというアイデアである。

当初の目標通り、個別の入力データからアルゴリズムの性能向上に役立つ情報を発見し、アルゴリズムの設定や構成を自動的に決定する枠組みに基づいて高性能な局所探索法を実現している。現状で最も高性能な混合整数計画ソルバーを上回る性能を持つ組合せ最適化アルゴリズムを実装しており、公開予定である。この分野に大きなインパクトを与える成果であり、高く評価できる。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. S.Umetani, M.Arakawa and M.Yagiura, A heuristic algorithm for the set multicover problem with generalized upper bounds, Lecture Notes in Computer Science, 2013, 7997, 75-80.
2. 梅谷俊治, 問題構造の解析に基づく組合せ最適化アルゴリズムの自動構成, オペレーションズ・リサーチ, 2014, 59, 掲載予定.

(2)特許出願

研究期間累積件数:0件

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

- 梅谷俊治, 問題構造の解析に基づく組合せ最適化アルゴリズムの自動構成, 日本オペレーションズ・リサーチ学会秋季研究発表会 アブストラクト集, 252-253, 2011.
- 梅谷俊治, 荒川正尚, 柳浦睦憲, 一般化上界制約付き集合多重被覆問題に対する発見的解法, 平成 24 年度 文部科学省 数学・数理科学と諸科学・産業との連携研究ワークショップ「離散構造と最適化:展開と連携」, 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所, 2012.
- S.Umetani, M.Arakawa and M.Yagiura: A heuristic algorithm for the set multicover problem with generalized upper bound constraints, Learning and Intelligent Optimization Conference (LION7), 2013.
- 梅谷俊治, 大規模な集合分割問題に対する局所探索法, 京都大学数理解析研究所研究集会「最適化の基礎理論と応用」, 2013.
- S.Umetani, A local search algorithm for large-scale set partitioning problems, The 13th Statistical Machine Learning Seminar, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo, Japan, 2013.