巡回セールスマン問題における候補枝集合の高精度化

小林 達也（沼田　一道　助教授）

1. はじめに

巡回セールスマン問題（TSP： Traveling Salesman Problem）とは，与えられた n 個の都市をすべて訪問して出発都市に戻る巡回路の中で，移動時間や距離に基づく移動費用の総和が最小となるものを求める問題である．標準的な組合せ最適化問題の一つであり，多数の解法が研究され試されている．

TSP は NP-困難な問題のクラスに属することが分かっているので，実用的な観点からは発見的解法 (heuristics) の研究が重要である．大規模な問題を対象とする発見的解法においては，処理時間の低減のため考慮する枝を絞り込むことが行なわれている．

文献 [2] は考慮すべき枝集合を選ぶ方法として，最小一木を緩和最適巡回路とみなし，それに対する感度解析によって各枝が最適巡回路構成枝である可能性を評価して決定する方法（α nearest neighbor）を提案している．本研究では，その方法を理解・実装して，ベンチマーク問題集である TSPLIB95 中の問題に適用し，その精度，効果を調べる．

2. 巡回セールスマン問題の定式化

n を都市数，都市の集合を $N = \{1, 2, .., n\}$，c_{ij} を都市間 i, j の移動費用，z を巡回路の総移動費用とする．本研究では $c_{ij} = c_{ji}$ の対称型の TSP を対象とする．x_{ij} を都市間 i, j を通過する（1）か，しない（0）かを表わす決定変数としたとき，TSP は以下のように定式化される．

$$
(\mathrm{TSP}) \begin{cases}
\text{minimize} & z = \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij} x_{ij} \\
\text{subject to} & \displaystyle\sum_{j:\, j<i} x_{ji} + \sum_{j:\, j>i} x_{ij} = 2 \qquad \forall i \in N \\
& \displaystyle\sum_{i \in V} \sum_{j \in N/V} x_{ij} + \sum_{j \in V} \sum_{i \in N/V} x_{ij} \geq 1 \qquad \forall V \subset N (V \neq \phi, V \neq N) \\
& x_{ij} \in \{0, 1\}, \qquad \forall i, j \in N
\end{cases}
$$

3. 候補枝集合

大規模な問題を発見的解法で効率よく解くために絞り込んだ枝集合のことを候補枝集合 (CS: Candidate Set) と呼ぶ．CS の選び方としては，単純に距離の短い枝から順に k 番目までの枝を候補枝として取り入れていくのが自然と思われるが（k-nearest neighbor），最適巡回路に含まれる枝の順位が必ずしも k 番以内に入るとは限らない．また，ドロネーグラフの接続関係を利用した Delaunay CS[1] も提案されているが，これらは実際の枝長に基づくものである．

本研究では，実際の長さではなく，「その枝を通過する」という条件を加えたときの最適巡回路長の悪化の程度をもとに CS を決定する方法 [2] をとりあげる．枝 (i, j) の通過を条件としたときの悪化量 $\alpha(i, j)$ を，

$\alpha(i, j) =$「枝 (i, j) を使用する」という条件の下で作り変えた最適巡回路長 $-$ 最適巡回路長

で定義し，α-value と呼ぶ．しかし，最適巡回路は求めようとするものであり，その長さは未知なので，何らかの近似値で代用せざるを得ない．文献 [2] では最小一木の総枝長を近似値として用いている．

4. 最小一木

一木とは，任意の1頂点を除いた残りの全頂点を張る全域木に，その頂点から2本の枝を接続してできるグラフのことであり，その中で総枝長が最小のものを最小一木と呼ぶ.（最適）巡回路は全頂点の次数が2の一木である．従って，最小一木の総枝長は最適巡回路長の下界値を与える．最小一木は，問題（TSP）の制約条件 $\sum_{j:\, j<i} x_{ji} + \sum_{j:\, j>i} x_{ij} = 2$ を $\sum_{(i,j)} x_{ij} = n$ でおきかえた緩和問題（TSP-1T）

$$
(\text{TSP-1T})\begin{cases}
\text{minmize} & z = \displaystyle\sum_{i=1}\sum_{j=i+1} c_{ij}x_{ij} \\
\text{subject to} & \displaystyle\sum_{(i,j)} x_{ij} = n \\
 & \displaystyle\sum_{i\in V}\sum_{j\in N/V} x_{ij} + \sum_{j\in V}\sum_{i\in N/V} x_{ij} \geq 1 \quad \forall V \subset N (V \neq \phi, V \neq N) \\
 & x_{ij} \in \{0,1\}, \qquad \forall i,j \in N
\end{cases}
$$

の最適解であるが，プリムのアルゴリズムを用いて，能率よく解くことが出来る.

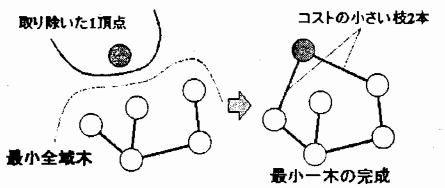

図1.　最小一木

5. α-nearest neighbor

3節で述べた α-value を最小一木に基づいて $\alpha(i,j) = L(T^+(i,j)) - L(T)$ と計算し、各点毎にその値の小さい方から順に候補枝として選んだCSのことを α-nearest neighbor と呼ぶ．ただし，T は最小一木，$L(T)$ はその長さである．また $T^+(i,j)$ は枝 (i,j) を使用するという条件の下で作り変えた最小一木である．$\alpha(i,j)$ を求める際に，一つ一つの枝に対して毎回最小一木を作り変えたのでは効率が悪い．文献[2]では $T^+(i,j)$ の求め方として，以下の3つの場合に分けて求める方法を提案している.

1. 枝 (i,j) が T に含まれているとき，$T^+(i,j)$ は T と同じである.
2. 枝 (i,j) のどちらか一方の端点が最小一木を構成する際に取り除いた頂点と接続しているとき，$T^+(i,j)$ は枝 (i,j) を挿入する代わりに，その頂点に接続している2本の枝のうち長い方の枝を除いて導く.
3. 1. 2. 以外の枝のとき，全域木 T に枝 (i,j) を取り入れると cycle を形成する．$T^+(i,j)$ はこの cycle の中で枝 (i,j) 以外の最も長い枝を取り除いて導く.

6. α-nearest neighbor の高精度化－ラグランジュ双対問題－

α-value は最小一木をもとに計算されるが，その精度は最小一木が最適巡回路のよい近似になっているか否かに左右される．問題（TSP）の費用行列 c_{ij} にある操作を加えて c'_{ij} に変換した問題の最小一木の総枝長 (に補正を加えたもの) が元の (TSP) の最適巡回路長の下界値になること，c'_{ij} をうまくとるとこの下界値を大きく出来ることが知られている.

これは問題 (TSP) を (TSP-1T) に緩和するときに除いた制約条件 $\sum_{j:j<i} x_{ij} + \sum_{j:j>i} x_{ij} = 2$ に π_i という変数を乗じて目的関数に加えたラグランジュ緩和問題 (TSP-L)

$$
\text{(TSP-L)}\begin{cases}
\text{minimize} & z = \sum_{i=1}\sum_{j=i+1} c_{ij}x_{ij} + \sum_{i=1}^{n}\pi_i\left\{\sum_{j:j<i} x_{ji} + \sum_{j:j>i} x_{ij} - 2\right\} \\
\text{subject to} & \sum_{(i,j)} x_{ij} = n \\
 & \sum_{i\in V}\sum_{j\in N/V} \geq 1 \quad \forall V \subset N (V \neq \phi, V \neq N) \\
 & x_{ij} \in \{0,1\}, \quad \forall i,j \in N
\end{cases}
$$

の最適値が (TSP) の下界値となることを利用したものである．(TSP-L) の目的関数は $z = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=i+1}^{n}(c_{ij}+\pi_i+\pi_j)x_{ij} - 2\sum_{i=1}^{n}\pi_i$ と変形できる．これは，(TSP-L) の最適解が "枝 ij の長さを $c'_{ij} = c_{ij}+\pi_i+\pi_j$ とした問題 (TSP-1T)" の最適解に他ならないことを示している ($-2\sum_{i=1}^{n}\pi_i$ は x に関しては定数)．従って，π が決まれば問題 (TSP-L) の最適解は (TSP-1T) の最適解同様，プリムのアルゴリズムを利用して容易に計算できる．

ある π に対して (TSP-L) の最適解が x^* と求まっているとき，最適値 $z(x^*,\pi)$ を π の関数と見て，その "勾配ベクトル" の方向に π を変化させることで，(TSP-L) の最適値すなわち (TSP) の下界値を増加させようとする．これがラグランジュ双対法である．$z(x^*,\pi)$ は必ずしも π で微分可能ではないので劣勾配法とも呼ばれる．

劣勾配ベクトルは $\nabla_\pi z = (\ldots, \sum_{j:j<l} x^*_{jl} + \sum_{j:j>l} x^*_{lj} - 2, \ldots)$ であり，第 l 要素は (x^* に対応する最小一木における) 点 l の次数から 2 を引いたものである，π の更新は $\pi^{(k+1)} = \pi^{(k)} + t^{(k)}\nabla_\pi z$ で行われる．$t^{(k)}$ は k 回目の更新におけるステップサイズである．ラグランジュ双対法は，最小一木の次数が 2 でない頂点に対して，正／負のペナルティを与えることで各頂点の次数が 2 に近づくようにして，下界値を大きくする方法と理解することができる．

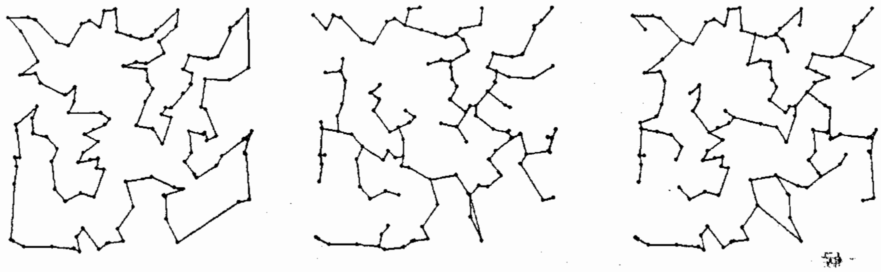

図 2.　ch130 都市 (最適巡回路, 初期最小一木, ラグランジュ後最小一木)

7. 数値実験

まず、初期最小一木とその最小一木を基にラグランジュ双対法よって改善された最小一木について，最小一木中に含まれている最適巡回路の枝の含有率を比較する．次に、オリジナルコスト (c_{ij}) と α-value の下で短い枝から順番に候補枝として採用していく．そのときに最適枝が候補枝として取り入れられた順位の平均値と各頂点の中で一番悪かった順位を比較する (数値実験 (1))．そして，オリジナルコストと α-value について短い枝から k 番目までの枝を候補枝として候補枝集合を作成する．この候補枝集合を用いて 2-opt 法を行い，得られる解の精度を比較する (数値実験 (2))．実験には TSPLIB95 の問題を使用した．2-opt 法はランダムな初期値から出発して 100 回行い，その平均値を取った．プログラムは Boland 社の Delphi5 を用いて作成した．計算機による実験結果を以下の表に示す．

表 1. 数値実験 (1) の結果

		最適枝の含有率 (%)		オリジナルコスト		α -value	
データ名	都市数	初期最小一木	L-双対法改善後	平均順位	最悪取り入れ順位	平均順位	最悪取り入れ順位
ch130	130	73.077	80.769	3.731	18	1.938	10
att48	48	66.667	77.083	3.542	8	1.771	5
kroA100	100	76	86	3.58	24	1.79	13
pr76	76	73.684	81.579	3.895	14	2.382	18
a280	280	76.429	76.429	1.725	7	1.282	6
eil76	76	71.053	86.842	2.724	9	1.382	7
att532	532	73.872	84.023	3.468	22	1.786	10
eil101	101	73.267	82.178	2.624	8	1.515	4
eil51	51	72.549	80.392	2.706	6	1.725	5

表 2. 数値実験 (2) の結果

kroA100	opt-tour=21282, 2-opt(全枝)=22470.88					
k=	5	10	13	15	20	24
オリジナルコスト	23332.73	23442.25	23216.41	22988.05	22852.6	22699.53
α -nearest neighbor 法	23327.95	23442.15	23019.28	23063.22	22646.34	22641.89

8. 考察

α-value の下での CS の方が，オリジナルコストの下での CS よりも最適枝が候補枝として取り入れられやすいことがわかった．この 2 つの候補枝集合を用いて TSPLIB95 の問題である kroA100 を 2-opt 法で解いたところ，α-value を用いた CS の方が，オリジナルコストの下での CS よりも良い巡回路を与えたが，2 つの CS から得られた巡回路の総移動距離の差は小さく，オリジナルコストの下での CS よりも有効なものであるかどうかはこの実験からでは確認することが出来なかった．

9. まとめ

本研究では候補枝集合の新しい考え方である α-nearest neighbor の性能を調べる実験を行ったが，文献 [2] で主張されている程の効果は確認できなかった．その原因の 1 つは，本研究で用いた発見的解法である 2-opt 法にあるように思われた．文献 [2] では，高精度で定評のある Lin-Kernighan 法を用いている．精度の良い発見的解法を用いなければ α-value による CS の効果が低いのではないかと考えられた．また、α-nearest neighbor を高精度化するために用いたラグランジュ双対法の中で，劣勾配法を行うときに用いるステップサイズについても，ステップサイズの値の取り方を工夫することで最小一木の精度をもう少し改善できる可能性があるように思われた．

参考文献

[1] 岩倉 行信: 巡回セールスマン問題に対する発見的解法の高精度化，1998.

[2] Keld Helsguan: *An effective implementation of the Lin-Kernighan traveling salesman heuristic*, European Journal of Operational Research, pp106-130, vol.126, No.1, 2000.

[3] 山本 芳嗣，久保 幹夫: 巡回セールスマン問題への招待，朝倉書店，1995.

[4] 今野 浩，鈴木 久敏: 整数計画法と組合せ最適化，pp.236-269，日科技連，東京，1998.