Zuse Institute Berlin

Takustr. 7
14195 Berlin
Germany

藤井浩一, 伊藤直紀, SUNYOUNG KIM, 小島政和, 品野勇治,
KIM-CHUAN TOH

大規模二次割当問題への挑戦

*The work for this article has been partially conducted within the Research Campus MODAL funded by the German Federal Ministry of Education and Research (fund number 05M20ZBM) and the project HPO-Navi (fund number 391087700): Sustainable Infrastructures for Archiving and Publishing High-Performance Optimization Software

ZIB Report 22-11 (May 2022)

Zuse Institute Berlin
Takustr. 7
14195 Berlin
Germany

Telephone: +49 30 84185-0
Telefax: +49 30 84185-125

E-mail: bibliothek@zib.de
URL: http://www.zib.de

ZIB-Report (Print) ISSN 1438-0064
ZIB-Report (Internet) ISSN 2192-7782

大規模二次割当問題への挑戦

藤井浩一, 伊藤直紀, Sunyoung Kim, 小島政和, 品野勇治, Kim-Chuan Toh

May 13, 2022

Abstract

二次割当問題は線形緩和が弱いことが知られ，強化のため多様な緩和手法が考案されているが，その一つである二重非負値計画緩和（ DNN 緩和）及びその解法として近年研究が進んでいるニュートン・ブラケット法を紹介し，それらに基づく分枝限定法の実装及び数値実験結果について報告する．

Keywords: Quadratic assignment problems, Branch-and-bound method, Newton-bracketing, UG

1　はじめに

二次割当問題 (QAP) は、代表的な組合せ最適化問題の一つとして知られている．その応用分野は設備配置などが知られ，組合せ最適化問題として有名な巡回セールスマン問題なども二次割当問題として定式化されることが知られている．

正の整数 $\boldsymbol{n}$ に対して、設備の集合及び場所の集合を $N = \{1, \ldots, n\}$ とし，設備間の輸送量を表す行列 $\boldsymbol{A} = [a_{ik}]$ 及び場所間の距離を表す行列 $\boldsymbol{B} = [b_{j\ell}]$ が与えられた時，QAP は総輸送量を最小化する問題

$$\min_{\pi} \sum_{i \in N} \sum_{k \in N} a_{ik} b_{\pi(i),\pi(k)}$$

として記述される．ここで置換 π は施設 i が場所 $\pi(i)$ に割り当てられることを表す．この問題は NP 困難として知られていて，$n = 35$ 程度の問題でも依然として最適解が求められていない問題がある ([6])．

QAP に対する厳密解法として一般的な分枝限定法においては，各部分問題に対する緩和手法が重要になってくる．QAP においては多くの緩和手法による下界値計算の手法が研究されている．先行研究としては線形計画緩和 ([11])，Gilmore-Lawler（[5], [9]），動的計画法 ([2])，凸二次計画緩和 ([1])，半正定値計画緩和 ([14]) など多種多様にある．例えば Anstreicher らは凸二次計画緩和に基づく分枝限定法を実装し，QAPLIB のインスタンスの一つである nug30 を初めて解いた ([1])．

近年 QAP の緩和問題として盛んに研究されている二重非負値計画緩和（DNN 緩和）は

$$\min\left\{\langle \boldsymbol{Q}, \boldsymbol{X}\rangle : \ \ \boldsymbol{X} \in \mathbb{K}_1 \cap \mathbb{K}_2, \ \langle \boldsymbol{H}, \boldsymbol{X}\rangle = X_{00} = 1 \ \right\}. \tag{1}$$

という形で得られる．ここで $\mathbb{K}_1$ は半正定値行列錐を表し，$\mathbb{K}_2$ は非負条件が課された多面錐を表す．DNN 緩和は汎用解法である主双対内点法等も適用できるが，$n \geq 30$ 程度の大規模 QAP の緩和解を繰り返し求めるのは現実的ではない．伊藤らは二分探索法に基づいた手法で大規模 QAP の DNN 緩和を求めることに成功している ([7])．小島らは，ニュートン・ブラケット法（NB 法）と言

う，ニュートン法及びセカント法を用いた手法により，さらに安定性を上げている ([8])．本稿ではDNN 緩和と NB 法に基づく分枝限定法の実装及び QAP のベンチマークに対する数値実験結果について述べる．

2　ラグランジュ DNN 緩和に対するニュートン・ブラケット法

本章では QAP のラグランジュ DNN 緩和を導入し，その解法であるニュートン・ブラケット法（NB 法）を紹介する．

2.1　QAP の部分問題

二次割当問題 (QAP) は，非凸二次計画問題として

$$\mathrm{QAP}(\emptyset,\emptyset):\ \min\left\{\langle \boldsymbol{Q}^0,\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle :\ \begin{array}{l} \boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^{1+n^2}_+,\ u_0=1,\\ u_{ij}(u_0-u_{ij})=0\ ((i,j)\in N\times N)),\\ \displaystyle\sum_{k\in N} u_{ik}-u_0=0\ (i\in N),\\ \displaystyle\sum_{k\in N} u_{kj}-u_0=0\ (j\in N)\end{array}\right\}$$

と定式化される．今，Π_r を N の部分集合の順列とし，$r\geq 1$ に対して $F=(i_1,\ldots,i_r)\in\Pi_r$ 及び $L=(j_1,\ldots,j_r)\in\Pi_r$ とする．このとき施設 $i_p\in F$ 及び場所 $j_p\in L$ $(p=1,\ldots,r)$ に対して QAP の部分問題は

$$\zeta(F,L)\quad=\quad\min\left\{\langle \boldsymbol{Q}^0,\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle :\ \begin{array}{l} \boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^{1+n^2}_+,\ u_0=1,\\ u_{ij}(u_0-u_{ij})=0\ ((i,j)\in F^c\times L^c),\\ \displaystyle\sum_{k\in L^c} u_{ik}-u_0=0\ (i\in F^c),\\ \displaystyle\sum_{k\in F^c} u_{kj}-u_0=0\ (j\in L^c)\\ u_{i_pj_p}=1\ (p=1,\ldots,r),\\ u_{ij_p}=0\ (i\in N\backslash\{i_p\},p=1,\ldots,r),\\ u_{i_pj}=0\ (j\in N\backslash\{j_p\},p=1,\ldots,r)\end{array}\right\}$$

と定式化される．変数 u_{i_pj} 及び u_{ij_p} を消去することにより，問題は

$$\mathrm{QAP}(L,F):\ \zeta(F,L)=\min\left\{\langle \boldsymbol{Q}(F,L),\, \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T\rangle :\ \begin{array}{l} \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{1+(n-r)^2}_+,\ x_0=1,\\ x_{ij}(x_0-x_{ij})=0\\ ((i,j)\in F^c\times L^c)\\ \displaystyle\sum_{k\in L^c} x_{ik}-x_0=0\ (i\in F^c),\\ \displaystyle\sum_{k\in F^c} x_{kj}-x_0=0\ (j\in L^c)\end{array}\right\}\qquad(2)$$

と書き換えることができる．NB 法を述べるにあたっては，QAP のルート問題である $\mathrm{QAP}(\emptyset,\emptyset)$ に対して議論するが，部分問題 $\mathrm{QAP}(F,L)$ $((F,L)\in\Pi_r\times\Pi_r\ (r=1,\ldots,n))$ に対しても議論はそのまま適用される．

2.2 QAP のラグランジュ DNN 緩和

まず QAP が $2n$ の線形等式制約 $\sum_{k\in N} u_{ik} = u_0\ (i \in N)$ 及び $\sum_{k\in N} u_{kj} = u_0\ (j \in N)$ を含むことに注意する．これは

$$\sum_{i\in N}\left(\sum_{k\in N} u_{ik} - u_0\right)^2 + \sum_{j\in N}\left(\sum_{k\in N} u_{kj} - u_0\right)^2 = 0. \tag{3}$$

という単一の二次等式制約に変換される．Lagrange 緩和を適用することにより，パラメータ $\lambda \in \mathbb{R}$ 付きの 0-1 二次計画問題

$$\mathrm{QOP} : \zeta_\lambda \quad = \quad \min\left\{\langle \boldsymbol{Q}^0_\lambda,\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle :\ \begin{array}{l} \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{1+n^2}_+,\ u_0 = 1, \\ u_{ij}(u_0 - u_{ij}) = 0\ ((i,j) \in N \times N) \end{array}\right\} \tag{4}$$

が得られる．ここで $\lambda \in \mathbb{R}$ は二次等式制約に付随するラグランジュ乗数であり，$\boldsymbol{Q}^0_\lambda \in \mathbb{S}^{1+n^2}$ は

$$\langle \boldsymbol{Q}^0_\lambda,\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle \quad = \quad \langle \boldsymbol{Q}^0,\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle + \lambda\left(\sum_{i\in N}\left(\sum_{k\in N} u_{ik} - u_0\right)^2 + \sum_{j\in N}\left(\sum_{k\in N} u_{kj} - u_0\right)^2\right) \tag{5}$$

で定義される．第二項は等式の違反量に対するペナルティとして見なすことができ，目的関数値は $\lambda \to \infty$ に伴い QAP 最適値 ζ に収束していく．

対称行列の空間集合 $\mathbb{S}^{1+n^2}$ に対して $\mathbb{K}_1, \mathbb{K}_2, \mathbb{K}, \boldsymbol{H}$ を

$$\begin{aligned}
\mathbb{K}_1 &:= \mathbb{S}^{1+n^2}_+ = \left\{\boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^{1+n^2} : \boldsymbol{X} \succeq 0\right\}, \\
\mathbb{K}_2 &:= \left\{\begin{array}{l} X_{pq} \geq 0\ (0 \leq p,\ q \leq n^2), \\ X_{0p} = X_{p0} = X_{pp}\ (1 \leq p \leq n^2), \end{array}\right\}, \\
\mathbb{K} &:= \mathbb{K}_1 \cap \mathbb{K}_2 = \left\{\boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^{1+n^2}_+ :\ \begin{array}{l} X_{pq} \geq 0\ (0 \leq p,\ q \leq n^2), \\ X_{0p} = X_{p0} = X_{pp}\ (1 \leq p \leq n^2) \end{array}\right\}, \\
\boldsymbol{H} &= \left\{\boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^{1+n^2} : X_{0,0} = 1.0\right\}
\end{aligned}$$

と定義する．解 $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{1+n^2}$ が QOP (4) の実行可能解であるならば，すなわち

$$QOP : \bar{\zeta}_\lambda \quad = \quad \inf\left\{\langle \boldsymbol{Q}^0_\lambda,\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle :\ \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T \in \mathbb{K} = \mathbb{K}_1 \cap \mathbb{K}_2,\ \langle \boldsymbol{H},\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle = u_0^2 = 1\ \right\}. \tag{6}$$

の実行可能解とも言える．

QOP (4) 及び (6) は共通の二次目的関数 $\langle \boldsymbol{Q}^0_\lambda,\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle$ を有しているため，ここでは不等式 $\zeta_\lambda \geq \bar{\zeta}_\lambda$ が得られる．今 $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{1+n^2}$ は QOP (6) の実行可能解とすると $\langle \boldsymbol{H},\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle = u_0^2 = 1$ が成立するため，$\langle \boldsymbol{Q}^0_\lambda,\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\rangle = \langle \boldsymbol{Q}^0_\lambda,\, (-\boldsymbol{u})(-\boldsymbol{u})^T\rangle$ が成立する．したがって，一般的に $u_0 = 1$ を仮定することができる．今 $\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T \in \mathbb{K}_2$ が成立するため，$u_{ij} = u_0 u_{ij} \geq 0$ 及び $u_0 u_{ij} = u_{ij}^2\ ((i,j) \in N \times N)$ が成り立つことがわかる．すなわち，$\boldsymbol{u}$ は QOP (4) の実行可能解であり，不等式 $\zeta_\lambda \leq \bar{\zeta}_\lambda$ が従う．以上の議論により QOP (4) 及び QOP (6) は $\zeta_\lambda = \bar{\zeta}_\lambda$ として目的関数値が一致することが示せた．変数 $\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T \in \mathbb{S}^{1+n^2}$ を行列変数 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^{1+n^2}$ で置き換えることにより QAP のラグランジュ DNN 緩和問題及びその双対問題

$$\eta^p_\lambda \quad = \quad \inf\left\{\langle \boldsymbol{Q}^0_\lambda,\, \boldsymbol{X}\rangle :\ \boldsymbol{X} \in \mathbb{K} = \mathbb{K}_1 \cap \mathbb{K}_2,\ \langle \boldsymbol{H},\, \boldsymbol{X}\rangle = X_{00} = 1\ \right\}. \tag{7}$$

$$\eta^d_\lambda \quad = \quad \max\left\{y : y \in \mathbb{R},\ \boldsymbol{Y}_1 \in \mathbb{K}^*_1,\ \boldsymbol{Y}_2 \in \mathbb{K}^*_2,\ \boldsymbol{Q}^0_\lambda - \boldsymbol{H}y = \boldsymbol{Y}_1 + \boldsymbol{Y}_2\right\}. \tag{8}$$

が得られる．ここで $\mathbb{K}^*_1, \mathbb{K}^*_2$ はそれぞれ $\mathbb{K}_1, \mathbb{K}_2$ の双対錐である．

2.3 ニュートン・ブラケット法

ニュートン・ブラケット法（NB 法）とは，Lagrangian DNN 緩和（DNN 緩和）を一次元関数の最適化問題とみなし，一次元関数にニュートン法を適用する解法である．本節ではそのアルゴリズム概要について述べる．

2.3.1 DNN 緩和の再定式化

任意の $y \in \mathbb{R}$ に対して関数 g を

$$g(y) \quad := \quad \min\ \left\{ \left\| \boldsymbol{Q}_\lambda^0 - \boldsymbol{H}y - (\boldsymbol{Y}_1 + \boldsymbol{Y}_2) \right\| : \boldsymbol{Y}_1 \in \mathbb{K}_1^*,\ \boldsymbol{Y}_2 \in \mathbb{K}_2^* \right\} \tag{9}$$

と定義すると $g(y) \geq 0$ が成立し

$$g(y) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{Q}_\lambda^0 - \boldsymbol{H}y = \boldsymbol{Y}_1 + \boldsymbol{Y}_2,\ \boldsymbol{Y}_1 \in \mathbb{K}_1^*,\ \boldsymbol{Y}_2 \in \mathbb{K}_2^*$$

が成立する．この時 $(y, \boldsymbol{Y}_1, \boldsymbol{Y}_2)$ は DNN 緩和双対 (8) の実行可能解となる．したがって DNN 緩和（の双対）を解くことは，$g(y) = 0$ を満たす最大の y を求めることに帰着される．そのような y を求めるためには y に対して関数値 $g(y)$ を求める必要があるが，そのためには最適化問題 (9) を解く必要がある．NB 法においては，各反復において近接勾配法を適用することにより (9) の KKT 条件

$$\left. \begin{array}{l} \boldsymbol{Q}_\lambda^0 - \boldsymbol{H}y = \boldsymbol{Y}_1 + \boldsymbol{Y}_2 - \boldsymbol{X},\ \boldsymbol{Y}_1 \in \mathbb{K}_1^*,\ \boldsymbol{Y}_2 \in \mathbb{K}_2^*, \\ \boldsymbol{X} \in \mathbb{K}_1 \cap \mathbb{K}_2,\ \langle \boldsymbol{X},\, \boldsymbol{Y}_1 \rangle = 0 \text{ かつ } \langle \boldsymbol{X},\, \boldsymbol{Y}_2 \rangle = 0. \end{array} \right\} \tag{10}$$

を満たす変数対 $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}_1, \boldsymbol{Y}_2) = (\widehat{\boldsymbol{X}}(y), \widehat{\boldsymbol{Y}}_1(y), \widehat{\boldsymbol{Y}}_2(y))$ を求めている．

2.3.2 上界値 ub^k の算出

ある $\bar{y} \in \mathbb{R}$ に対して $g(\bar{y}) > 0$ と仮定する．この時 $g(y^*) = 0$ となる y^* を求めるニュートン法の反復は

$$\mathrm{ub}^{k+1} \ = \ \mathrm{ub}^k - \frac{\|\widehat{\boldsymbol{X}}(\mathrm{ub}^k)\|^2}{\langle \boldsymbol{H},\, \widehat{\boldsymbol{X}}(\mathrm{ub}^k) \rangle} \tag{11}$$

で得られる．このニュートン反復によって得られる数列 ub^k $(k = 0, 1, \ldots)$ は単調に減少し y^* へ収束する．

2.3.3 下界値 lb^k の算出

$u_0 = 1$ 及び行列 $\boldsymbol{U} = [u_{ij}]$ は QAP 実行可能解 $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{1*n^2}$ の置換行列に対応するため

$$\langle \boldsymbol{I},\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T \rangle \quad = \quad u_0^2 + \sum_{(i,j) \in N \times N} u_{ij}^2 = 1 + n,$$

が成立する．ここで $\boldsymbol{I}$ は $(1 + n^2) \times (1 + n^2)$ の恒等行列を表す．冗長な不等式 $\langle \boldsymbol{I},\, \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T \rangle \leq 1 + n$ を追加すると

$$\begin{aligned} \tilde{\eta}_\lambda^p \quad &= \quad \inf \left\{ \langle \boldsymbol{Q}_\lambda^0,\, \boldsymbol{X} \rangle : \begin{array}{l} \boldsymbol{X} \in \mathbb{K} = \mathbb{K}_1 \cap \mathbb{K}_2, \langle \boldsymbol{H},\, \boldsymbol{X} \rangle = X_{00} = 1, \\ \langle \boldsymbol{I},\, \boldsymbol{X} \rangle \leq 1 + n \end{array} \right\}. \\ \tilde{\eta}_\lambda^d \quad &= \quad \max \left\{ y + (1+n)t : \begin{array}{l} y \in \mathbb{R},\ t \leq 0,\ \boldsymbol{Y}_1 \in \mathbb{K}_1^*,\ \boldsymbol{Y}_2 \in \mathbb{K}_2^*, \\ \boldsymbol{Q}_\lambda^0 - \boldsymbol{H}y - \boldsymbol{I}t = \boldsymbol{Y}_1 + \boldsymbol{Y}_2 \end{array} \right\}. \end{aligned} \tag{12}$$

はそれぞれ QAP の Lagrangian DNN 緩和問題の主問題・双対問題と見なすことができる．任意の $(y, \boldsymbol{Y}_2) \in \mathbb{R} \times \mathbb{K}_2$ に対して

$$\begin{aligned} \tilde{v}(y, \boldsymbol{Y}_2) &:= \max\left\{0,\ \boldsymbol{Q}_\lambda^0 - \boldsymbol{H}y - \boldsymbol{Y}_2\text{の最小固有値}\right\}, \qquad (13) \\ \widetilde{\boldsymbol{Y}}_1(y, Y_2) &:= \boldsymbol{Q}_\lambda^0 - \boldsymbol{H}y - \boldsymbol{Y}_2 - \boldsymbol{I}\tilde{v}(y, \boldsymbol{Y}_2) \in \mathbb{S}_+^{1+n^2}. \qquad (14) \end{aligned}$$

と定義をすると $(\tilde{v}(y, \boldsymbol{Y}_2), y, \widetilde{\boldsymbol{Y}}_1(y, Y_2), \boldsymbol{Y}_2)$ は DNN 問題 (12) の実行可能解となる．したがって対応する目的関数値 $y + (1+n)\tilde{v}(y, \boldsymbol{Y}_2)$ は最適値 y^* の下界を与える

2.3.4 ニュートン・ブラケット法のアルゴリズム

上界値 ub^k 及び下界値 lb^k の算出を NB 法のアルゴリズムとしてまとめる．

Algorithm 2.1 ニュートン・ブラケット法

STEP 0: 初期設定として $\mathrm{lb}^0 = -\infty$ かつ $k = 0$ とする．上界値 $\mathrm{ub}^0 > y^*$ を設定する．

STEP 1:

上界値 $y = \mathrm{ub}^k$ について KKT 条件 (10) を満たす $(\widehat{\boldsymbol{X}}(y), \widehat{\boldsymbol{Y}}_1(y), \widehat{\boldsymbol{Y}}_2(y)) \in (\mathbb{K}_1 \cap \mathbb{K}_2) \times \mathbb{K}_1^* \times \mathbb{K}_2^*$ を近接勾配法によって得る．

STEP 2: 上界値 ub^{k+1} を ub^k 及びニュートン反復公式 (11) から更新する．

STEP 3: 下界値 $\mathrm{lb}^{k+1} = \max\{\mathrm{lb}^k,\ \mathrm{ub}^{k+1} + (1+n)\ \tilde{v}(\mathrm{ub}^{k+1}, \widehat{\boldsymbol{Y}}_2(\mathrm{ub}^k))\}$ を更新する．

STEP 4: k を $k+1$ に更新し，STEP1 に移行する．

上のアルゴリズムについて，以下が成立する．

Theorem 2.2 *([8, Theorem 3.3])*

(i) $k \to \infty$ に伴い ub^k 及び lb^k は y^* に収束する．

(ii) $\boldsymbol{Q}_\lambda^0 - \boldsymbol{H}\bar{z}_0$ が $\mathbb{K}_1^* + \mathbb{K}_2^*$ の内点になるような $\bar{z}_0$ が存在するとする．この時 ub^k は y^* に二次収束する．

上界値 ub^k を求める際はニュートン法を適用すると二次収束が得られるが，実用上は安定性のために $k \geq 1$ の反復ではニュートン法の代わりにセカント法を用いている．

分枝限定法の実装において NB 法を用いるケースにおいては，正確な y^* を計算することを負荷が高すぎるため極力避ける．具体的には「(a) $\hat{\zeta} \leq \mathrm{lb}^k$」あるいは「(b) $\mathrm{ub}^k < \hat{\zeta}$」のようなケースが検知されたら計算を中断する．ここで $\hat{\zeta}$ は QAP の大域的上界を表す．ケース (a) においては，該当ノードは枝刈りされる．ケース (b) においては，$y^* \leq \mathrm{ub}^k < \hat{\zeta}$ が成立し，さらなる分枝が必要となる．これら二つの判定を使うことにより，より効率的に NB 法を分枝限定法に組み込んでいる．

3 ニュートン・ブラケット法と分枝限定法

3.1 分枝限定法におけるノード生成

分枝限定法において構築される木のノードは，QAP の部分問題に対応する．初期段階では部分問題リストには QAP$(\emptyset, \emptyset)$ が設定される．ノード QAP(F, L) $(F = (i_1, \ldots, i_r) \in \Pi_r,\ L = (j_1, \ldots, j_r) \in$

Π_r) が生成されると，下界値 $\zeta^\ell(F,L)$ 及び暫定最小値 $\zeta^u(F,L)$ が計算される．暫定最小値と下界値に対して $\zeta^u(F,L) \leq \zeta^\ell(F,L)$ が成立するとノードは削除される．成立しない場合は，$n-r$ 個の子ノードが生成される．その場合は，施設 $i_+ \in F^c$ あるいは場所 $j_+ \in L^c$ が選択される（分枝変数選択）．

分枝限定法で生成される木の深さは高々 n となる．ルートノード QAP(F,L) は深さ 0 に位置し，深さ n では QAP$(F,L)(|F|=|L|=n,\ F^c=L^c=\emptyset)$ は全ての施設が場所に割当てられている自明な QAP となる．

実装においては，木の深さが十分深い部分問題に対しては単純列挙で解を求められうるため，木の深さが一定以下になったら緩和問題を解くのを避け単純列挙に切り替えている．

3.2 分枝変数の選択及びノード選択

分枝変数の選択戦略として，average branching と primal DNN branching の二つを実装している．分枝戦略 average branching は，設備 f 及び 場所 l を固定した時の部分問題 QAP $(F\cup f),(L\cup\ell))$ 上の実行可能解の目的関数の平均値を正確に計算し，これを分枝スコアとして用いている．分枝戦略 primal DNN branching は DNN 緩和問題の主実行可能解 $\widehat{\boldsymbol{X}} := \boldsymbol{X}/\langle \boldsymbol{H}^0,\, \boldsymbol{X}\rangle$ を用いる．この解の部分問題への射影 $\widehat{\boldsymbol{X}} \mapsto \widehat{\boldsymbol{X}}(f,\ell)$ を得て，射影先での目的関数値 $\langle \boldsymbol{Q}^0((F\cup f),(L\cup\ell)),\, \widehat{\boldsymbol{X}}(f,\ell)\rangle$ を算出し，これを分枝スコアとして用いる．分枝変数選択に関しての詳細は ([3]) を参照されたい．

ノード選択においては最良値に基づく選択（ best bound method ）を採用している．通常対比される戦略として挙げられる「深さ優先探索」のメリットは早期の実行可能解の発見で，厳密解法の対象となるような規模の二次割当問題においてはそれほど課題ではない．このため best bound method を採用している．

3.3 実行可能解の算出

現状の DNN 緩和に基づく分枝限定法においては，DNN 緩和はあくまでも「下界値計算」に用いている．そのため，実行可能解の算出については Tailard ら（[13]）によるタブーサーチ法を適用している．タブーサーチ法は調整すべきパラメータが少ないのが特徴で，小規模から中規模程度の問題であればルートノードにおいて実行可能解を発見する．実装では各ノードでタブーサーチ法を実行し実行可能解を探索している．

3.4 並列化分枝限定法

二次割当問題は分枝限定法のノード数が膨大になることが知られており，DNN 緩和による強力な下界値を求められたとしてもグリッド・コンピュータあるいはスーパーコンピュータの援用は欠かせない．先行研究においてもグリッド・コンピュータを利用した計算で新記録を樹立している ([1]).

DNN 緩和に基づく分枝限定法は，メニーコア環境で動作するよう，品野の開発する並列分枝限定法フレームワーク UG([12]) を用いて並列化している．UG はスーパーコンピュータで多くの未解決問題を解いている実績があり，スケーラブルで信頼性が高い.

4 数値実験結果

本章では QAP に対する NB 法を用いた分枝限定法の数値計算結果を述べる．実験のベンチマークとしては QAPLIB ([6]) を，計算環境としては Mac mini 3.0GHz Intel Core i5 メモリ 32GB を用いた．表中の「 problem 」列は問題名を,「 #node 」列はノード数,「 time(s) 」 は計算時間（秒）を表している．

まずは小規模インスタンス（$n \leq 18$）に対する結果を述べる．比較結果として Liao による QAP の DNN 緩和を ADMM で解いた数値実験結果 ([10]) 及び二分探索を用いて DNN 緩和を解いた数値実験結果を用いる ([4])．結果を Table 1 に示す．表中 ADMM とあるのが [10] からの引用，BBCPOP が二分探索法，NewtonBracket が NB 法の結果となる．ただし BBCPOP と NewtonBracket は同一の計算環境を用いていて，ADMM は異なる．結果をみると NB 法に基づいた結果が二分探索法を用いた結果と比較してノード数・計算時間の面で優位であり，ADMM と比較してもノード数で優位であることがわかる．

	ADMM		BBCPOP		NewtonBracket	
problem	#node	time(s)	#node	time(s)	#node	time(s)
nug12	23	43.74	35	31.39	35	5.80
nug14	14	49.56	28	73.64	15	6.34
nug15	15	147.85	72	138.59	16	8.51
nug16a	16	144.84	46	194.35	17	13.63
nug16b	31	419.06	197	384.59	50	72.34
nug17	188	1151.46	191	541.90	50	72.34
nug18	805	5,071.32	355	1,532.24	104	127.31

Table 1: 小規模 QAP ベンチマークにおける各手法の比較結果

次に中規模インスタンス（$n \leq 25$）に対する二つの分枝戦略 average branching 及び primal DNN branching の比較について述べる．結果を Table 2 に示す．どちらの分枝戦略が優位かはインスタンスに依存するが，nug 系の問題に対しては primal DNN branching が優位であることが観察できる．

最後に大規模問題 ($n \geq 30$) に対する NB 法に基づく並列分枝限定法の結果を述べる．結果を Table 3 に示す．表中の「Opt.val」列は最適値を表し．「No. of CPU cores used」と記載された列は利用したコア数を記している．計算環境として統計数理研究所の HPE SGI 8600 (384 nodes，13,824 cores，144TB) を用いている．分枝変数選択には average branching を採用している．大規模インスタンスの内 tai30a と sko42 は今回の数値実験によって初めて解かれていて NB 法に基づく並列分枝限定法の高速性及び安定性を示している．

5 まとめ

本稿では QAP に対する DNN 緩和及び NB 法に基づく分枝限定法の実装を述べ，数値実験結果について報告した．既存研究との比較及び最適解が求められていなかったベンチマーク問題を解いたことを考慮すると二次割当問題に対する現時点での最も良い性能を示す解法の一つと言える．今後の課題としては，QAP は一部問題が高い対称性を持つことが知られており，対称性を利用した NB 法及び分枝限定法の改良が挙げられる．

References

[1] Anstreicher, K., Brixius, N., J-P., G., Linderoth, J.: Solving large quadratic assignment problems on computational grids. Mathematical Programming **91**, 563–588 (2002)

problem	average branching		primal DNN branching	
	#node	time(s)	#node	time(s)
nug12	35	20.77	13	19.66
nug14	15	28.67	15	28.97
nug15	16	34.86	16	35.03
nug16a	17	42.05	17	42.35
nug16b	17	57.13	17	59.36
nug17	50	97.23	50	98.58
nug18	104	143.47	87	128.86
nug20	685	1210.33	247	509.72
nug21	312	745.53	218	472.78
nug22	429	1083.88	290	596.18
nug24	1245	4978.72	586	2807.63
tai10a	11	13.42	11	13.79
tai10b	11	12.72	11	12.72
tai12a	34	18.50	34	18.66
tai12b	34	24.18	34	25.16
tai15a	188	100.39	201	108.42
tai15b	76	53.19	76	54.05
tai17a	364	226.79	269	169.67
tai20a	2464	3245.62	2525	3169.68
tai20b	166	172.22	166	185.95
tai25b	372	1248.68	372	1376.28

Table 2: 中規模 QAP ベンチマークに対する分枝変数戦略の比較結果

[2] Christofides, N., Benavent, E.: An exact algorithm for the quadratic assignment problem on a tree. Operations Research **37**(5), 760–768 (1989)

[3] Fujii, K., Ito, N., Kim, S., Kojima, M., Shinano, Y., Toh, K.C.: Solving Challenging Large Scale QAPs. arXiv preprint arXiv:2101.09629 (2021)

[4] Fujii, K., Shinano, Y., Ito, N.: DNN-based Branch-and-bound for the Quadratic Assignment Problem (2019), http://ura3.c.ism.ac.jp/opt2019/program.html, the 4th ISM-ZIB-IMI MODAL Workshop on Mathematical Optimization and Data Analysis

[5] Gilmore, P.C.: Optimal and suboptimal algorithms for the quadratic assignment problem. Journal of the society for industrial and applied mathematics **10**(2), 305–313 (1962)

[6] Hahn, P., Anjos, M.: QAPLIB – A quadratic assignment problem library. http://www.seas.upenn.edu/qaplib

[7] Ito, N., Kim, S., Kojima, M., Takeda, A., Toh, K.: BBCPOP: A sparse doubly nonnegative relaxation of polynomial optimization problems with binary, box and complementarity constraints. Tech. Rep. arXiv:1804.00761 (2018)

[8] Kim, S., Kojima, M., Toh, K.: A Newton-bracketing method for a simple conic optimization problem. Tech. Rep. arXiv:1905.12840 (May 2019)

problem	Opt.val	#node	time(sec)	No. of CPU cores used
nug30	6,124	26,181	3.14e3	1,728
tai30a	1,818,146	34,000,579	5.81e5 $\approx$ 6.8 days	1,728
tai35b	283,315,445	2,620,547	2.49e5	1,728
tai40b	637,250,948	278,465	1.05e5	1,728
sko42	15,812	6,019,419	5.12e5 $\approx$ 5.9 days	5,184

Table 3: 大規模 QAP ベンチマークに対する数値実験結果

[9] Lawler, E.L.: The quadratic assignment problem. Management science **9**(4), 586–599 (1963)

[10] Liao, Z.: Branch and bound via the alternating direction method of multipliers for the quadratic assignment problem. Diss. Master Thesis, University of Waterloo, 2016. (2016)

[11] Ramakrishnan, K., Resende, M., Ramachandran, B., Pekny, J.: Tight QAP bounds via linear programming. In: Combinatorial and Global Optimization, pp. 297–303. World Scientific (2002)

[12] Shinano, Y., Achterberg, T., Berthold, T., Heinz, S., Koch, T.: Solving open mip instances with parascip on supercomputers using up to 80,000 cores. pp. 770–779. 2016 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS), IEEE (2016)

[13] Tailard, E.: Robust taboo search for the quadratic assignment problem. Parallel Computing **17**, 443–455 (1991)

[14] Zhao, Q., Karisch, S.E., Rendl, F., Wolkowicz, H.: Semidefinite programming relaxations for the quadratic assignment problem. Journal of Combinatorial Optimization **2**(1), 71–109 (1998)