

巡回セールスマン問題の近傍に対する数理的解析

加 地 太 一

1 はじめに

巡回セールスマン問題 (traveling salesman problem, TSP)[5] を代表とする組合せ最適化問題は, システムの計画, 設計, 運用など様々な意思決定の問題で利用されている. これらの問題は, 一般に実用的な時間内で最適解を得るのが困難な難しいクラスに属している. そのため, 実用的な時間内でより質の高い近似解を求める研究が一つに盛んである. この組合せ最適化問題を解くための有力な手法として遺伝アルゴリズム, タブーサーチ, アニーリング法などを主とするメタヒューリスティクスがある [3].

メタヒューリスティクスの解法は, 解の移動を反復することが基調となっている. ここで, 解の移動操作のベースを作り上げているものが解の近傍である. 近傍とは任意の解に対してなんらかの操作を加えることにより得られる解の集合である. メタヒューリスティクスはこの近傍にもとづいて解空間を探索し, より良い解へ到達することを目指すものである.

この近傍の定義がメタヒューリスティクスの開発における基盤となり, より良い近傍のデザインが選り優れたメタヒューリスティクスの構築に繋がる. すなわち, 近傍はメタヒューリスティクスの基本的な役割を演じ, 質の良い解を得るために近傍をどのように設計するかが重要な問題となる [4].

ここで、設計した近傍の能力、特性を分析、比較できれば、メタヒューリスティクスの開発にとって有益な結果を導き出すであろう。

メタヒューリスティクスの性能を分析する方法として、実験的解析が主流となっている。それにはよりリアルな情報を用いた解析を通して、メタヒューリスティクスの性能を明らかにしていくことの現実的な方向性が読み取れる。しかし、実験的解析では実験環境などに多くの自由度を有するがため、その基準が整わず一般性を導きにくいところがあるのも事実である。そこで、理論的解析を用いてより普遍的なメタヒューリスティクスの特性を明らかにしていくことも重要な課題となってくる。特に、Eikekder 等 [2] などによる確率的解析の検討などもあり、その可能性が論じられている。しかし、確率的解析を行うにあたって、通常、特定した問題のケースで確率モデルをたて解析を行う。したがって、対象となる確率モデルは限定したものであり、一般性に薄く他の問題への適用が難しくなる。

そこで、近傍の構造を、汎用的に解析可能な確率的解析モデルを提案し、様々な問題に対して対応可能な理論的解析が試みられた [6]。ここでは、組合せ最適化問題の解空間における近傍点のランダムな評価値系列が AR(1) プロセス (first order autoregressive process) で支配されるという仮定を用いて解空間および評価値系列の統計量を導き出し、この AR(1) プロセスから得られた統計量を用い、さらに、解コストの同時分布にガウス性が伴う仮定を利用して汎用的に解析可能な近傍モデルを構築している。

また、理論的解析のもう一つの方法として、Elementary Landscapes の視点からの研究がある [10]。Elementary Landscapes は、近傍の移動が波動方程式によって特徴づけられる解空間であり、探索において特徴的な性質を有することとなる。特に、Elementary Landscapes が成立する解空間では、解のコストとその近傍解のコストにおいてグローバール方程式と呼ばれる関係が成立する。その性質を利用し複雑な解空間上において近傍構造を解析出来ることが示唆されている。

本論文では、実践的な問題に対して両者のアプローチによる解析を試み、

その精度、特徴を明らかにする。特に、確率的解析では、ガウス分布が成立する理想的な問題に対しては、優れた結果を導き出している。しかし、多くの事例に関しては、まだ確率的解析に対する客観的な評価に至っていない。また、多様な事例に対して Elementary Landscapes の性質が実際に利用可能であるかなど検証しなければならない点が多く残されている。そこで、これらの理論的解析に関する考え方、方法論を論じ、幾つかの実践的な問題に対して数値実験を行い、その精度、特性などを比較分析する。そして両者の性質の一致性を明確にし、この2つのアプローチに基づく理論的解析の可能性を論ずる。

2 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題 (traveling salesman problem, TSP) は、何ヶ所かの都市とその都市間の距離が与えられたとき、すべての都市を巡り、元に戻る最短の道順を求める問題である。したがって、すべての可能な道順を列挙してその中で最良な巡回路を見つければ解ける、数学的にはナンセンスな問題である。しかし、このナンセンスな問題が、情報の世界では重要な試金石となる代表的な問題でもある。何十年にもわたって、それはコンピューターサイエンスの最も基本的な進歩の多くに影響を与え、いろいろな計算技法の有用性を明らかにするのに役立ってきた。

しかし、TSP の都市数が、多少なりとも大きくなることにより可能な道順の数が異常に増加するところに、この問題における大きなハードルが存在する。まず、都市数を n と仮定する。この場合、出発点から次の都市への行き方は $(n-1)$ 通りであり、さらに、その都市から次の都市への行き方は $(n-2)$ 通りと考えていけば、全巡回路の数は $(n-1)!$ 通りとなる。これはスターリングの公式 ($n! \approx \sqrt{2\pi n}(n/e)^n$) によりほぼ n^n 通りと表すことができ、都市数の増加により指数関数的にすべての可能な道順の数が増加することがわかり、これを組合せ的爆発と呼ぶ。

たとえば、30都市の一つの巡回路のコストを一秒間に 10^{12} (1兆)回計算できるスーパーコンピュータが仮にあった場合、30都市の全部の巡回路の数は $29! \approx 8.8 \times 10^{30}$ 個であるので、30都市のすべての巡回路を計算するには 8.8×10^{18} 秒かかる。一年は 3.15×10^7 秒であるので、30都市のTSPの答えを求めるには約2800億年 (2.8×10^{11})年もかかることになる。すなわち、たかだか、30都市を計算するのに数千億年、あるいは数兆億年という天文学的計算時間を要してしまう。また、これらの問題はいかにコンピュータのスピードが高速になろうが、その計算時間は雀の涙ほどしか改善されない。いわゆるNP困難な問題の代表例であり、計算時間は問題のサイズ(都市数)に対して指数関数的に増加する傾向を示す。

また、このTSPは、多くの手法の試金石ともなっており、さまざまな手法がこのTSPの問題に対して研究、開発され、そしてTSPで研究開発された手法が各種の難しい問題に適用されていくなど、組合せ最適化問題の中心的な存在である。

この問題は、通過したらば1、そうでないならば0とする決定変数 x_{ij} を用いて、

$$\min \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n d_{ij} x_{ij} \quad (1)$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i \neq j} x_{ij} = 2, \quad i, j = 1, 2, \dots, n, \quad (2)$$

$$\sum_{i \in K} \sum_{j \in K, i < j} x_{ij} \leq |K| - 1, \\ K \subset \{1, 2, \dots, n\}, \\ 2 \leq |K| \leq n - 1, \quad (3)$$

$$x_{ij} = 0 \text{ or } 1, \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (4)$$

のような形式でTSPは定式化される。ここで、 d_{ij} は都市 i から都市 j へ行く距離の値に相応するエッジのコストであり、それらのエッジの集合を D

とする。(2)式は任意の頂点から正確に2つの他の頂点につながっていることを表している。さらに、(3)式で任意の部分グラフで閉路が構成されない制限を加えている。この制約条件のもと(1)式の最小コストを求める問題となる。

ちなみに、このTSPの応用としていくつかの問題があげられる。TSP自体として適用可能であり、効果を上げている問題としてドリル経路最適化の問題がある。これはプリント基板の穴あけの作業において、穴あけの経路を求める問題がTSPとして適用でき、近似解法などを用いて実際に利用されている問題でもある。それにより、穴あけの経路長、および、穴あけの作業時間などの短縮化を可能とする。その他、スケジューリングの問題、配送計画の問題など多くの分野でも応用される。

TSPの問題を実用的な時間内で解くための方法としてメタヒューリスティクスが用いられる。メタヒューリスティクスの解法は、解の移動を反復することが基調となっている。ここで、解の移動操作のベースを作り上げているものが解の近傍である。近傍とは任意の解に対してなんらかの操作を加えることにより得られる解の集合である。局所探索法はこの近傍にもとづいて解空間を探索し、より良い解へ到達することを目指すものであり、この枠組みのもとで数多くのメタヒューリスティクス手法が提案されている。

3 巡回セールスマンにおける解空間と近傍

TSPのすべての実行可能解 x の集合を解空間 X としよう。また、解 x に対しての評価値(コスト)を $f(x)$ で表すこととする。実行可能解 $x^* \in X$ が、任意の解 $x \in X$ に対して $f(x^*) \leq f(x)$ を満たすとき、 x^* を最適解と呼ぶ。そして、与えられた解 x からある基本操作で別の解を導出することを移動と呼ぶ。その移動によって得られる解集合 $N(x)$ を解 x の近傍として定義する。その写像 $f: X \rightarrow R$ を組合せ最適化問題の評価値ランドスケープ(fitness landscape)と呼び、各問題の評価値ランドスケープは、 (X, N, f)

の3つの要素の組合せにより定義される。

TSPは、実用的な時間で最適解を得るのが困難な難しいクラスに属し、近似的な解を有効な時間や精度で求める研究が一つに盛んである。この組合せ最適化問題を解くための有力な手法として遺伝アルゴリズム、タブーサーチ、アニーリング法などを主とするメタヒューリスティクスがある。特に、局所探索法 (Local Search, LS)[3]は、メタヒューリスティクスの枠組みを示す基本的なアルゴリズムとなる。局所探索法では、何らかの方法で得られた可能解 x に対して、その近傍 $N(x)$ を定義する。その $N(x)$ 中の可能解の中で目的関数値を改善できるものがあれば、それに置き換えるという方法により解の探索を進め、改善が得られなくなるまで反復し探索するアルゴリズムとなる。すなわち、初期解 x_1 が与えられて、その近傍 $N(x_1)$ の中の改善解 x_2 に移動し、同様な操作を繰り返し、 x_k が得られるとその近傍 $N(x_k)$ 中に改善解が見出せなくなり探索が停止する。そのときの x_k は近傍 $N(x_k)$ 内に x_k より良い解がないという意味で局所解 (locally optimal solution, local optimum) という。

メタヒューリスティクスの開発において重要となるのがこの近傍の定義である。近傍の集合 $N(x)$ は、与えられた解 x に対して、その解の属性の移動、交換、置き換えなどにより、少し変更を加えることで得られる解の集合によって定義される。特に、TSPにおける代表的な近傍として、2-opt, 3-opt[1, 8], City-insert[8] などがある。2-opt 近傍は基本的にツアーから2つのエッジを取り除き、ツアーを構成できる2つの新しいエッジでつなぎ替えることにより新たな解を生成する。3-opt 近傍は、同様な方法で、3つのエッジを取り除き、3つのエッジを加えることにより新たなツアーを構成する。City-insert 近傍は、現在のツアーから1つの都市を取り除き、他の位置にその都市を移動して新たなツアーを作り上げる。これらの近傍は、 $x \in N(y) \Leftrightarrow y \in N(x)$ となる対称的な性質を持つことによって解空間において固有の規則性を導き出してくれる。

また、近傍の定義は問題に依存し、効果的な近傍の構築はより質の良い解

を探索することを可能とする [4, 8, 11]. それゆえに, 与えられた問題に対して, どのように有効な近傍を定義するのかは1つの課題であり, 定義する近傍の特性, 特徴を解析することは重要不可欠な問題ともなる. この近傍の特徴を明らかに出来れば, メタヒューリスティクスの開発において有益な知見となり得るであろう.

4 確率的解析による解空間と近傍の解析

本節では, この近傍の構造を確率的に解析して, かつ, その解析にあたっては汎用的な確率的解析モデルの構築を目指す. そのために, 組合せ最適化問題の解空間における近傍点のランダムな評価値系列が AR(1) プロセス (first order autoregressive process) で支配されるという仮定を用いて解空間および評価値系列の統計量を導き出す. この AR(1) プロセスから得られた統計量を用い, さらに, 解コストの同時分布にガウス性が伴う仮定を利用して, 汎用的な近傍モデルを構築することを目指したい.

そこで, まず解空間における近傍点の評価値系列の分析を行う. その構造が AR(1) プロセスとして近似でき特定な問題, 近傍に依存することなく分析が可能であれば, 必要な解空間および評価値系列の基本的統計量を AR(1) モデルを適用して導出可能となる. これによって上記の目的を達成することができ, 多くの組合せ最適化問題の各種の近傍などに対応する汎用的な解析が可能となることが期待される.

さらに, 解コストの同時分布にガウス性が伴う仮定のもと, 複雑な近傍全体を捉えた近傍モデルを検討し, AR(1) モデルの情報を利用して近傍の分布の解析を試みている. 特徴として, 前述の AR(1) モデルから求められた統計情報がこの近傍モデルの上でもよい推定値の導出を可能とし, 汎用的な近傍モデルの構築を可能としている [6].

4.1 解空間の確率的解析

TSP のランドスケープの特性を解析するために、まず、ランダムに選んだ点(解)を出発点としてランダムに選ばれた近傍点(近傍解)に移動し、この点(解)から再びランダムに選ばれた近傍点(近傍解)に移動することを繰り返し得られた評価値(fitness)の系列 $x_1, x_2, \dots, x_t, \dots, x_N$ を考える。ここで、 t は時系列のステップであり、解 x_t は $N(x_{t-1})$ からランダムに選び出されている。 F_t をステップ t における解 x_t のコストを示す確率変数とする。この $\{F_t\}$ が、

$$F_t = \mu + \rho(1)(F_{t-1} - \mu) + \Delta \quad (5)$$

の差分方程式で表現でき AR(1) としてモデル化できる。ただし、 Δ は平均 0、分散 σ_Δ^2 をもつホワイトノイズで、 μ は解コストとの期待値であり、 $\rho(1)$ は 1 ステップの自己相関関数である。今後便宜上、 $\rho(1)$ を ρ で表すこともある。ここで、 $\{F_t\}$ は $\{F_{t-1}\}$ のみの依存する時系列となる。

AR(1) プロセスの特徴として、 $\rho(r)$ を r ステップの自己相関関数とすれば、

$$\rho(r) = \rho(1)^{|r|}, \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6)$$

の式のようにステップ数 r の増加によって自己相関関数の値は 0 への指数関数的な減衰性を示す。この性質が確認されたならば、解空間の評価値ランドスケープが AR(1) プロセスに従っていると判断できうる。また、評価値系列が AR(1) プロセスであり、かつ $|\rho(1)| < 1$ ならば、そのプロセスは定常過程となることが知られている [9]。定常過程の定義から $\{F_t\}$ において、

$$E[F_t] = \mu \quad \text{for all } t, \quad (7)$$

$$E[(F_t - \mu)^2] = \sigma^2 \quad \text{for all } t \quad (8)$$

が成立する。ただし、 σ^2 は解コストの分散である。

また、評価値系列のサンプル平均は

$$\bar{F} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N F_t \quad (9)$$

で計算でき、定常過程において評価値系列のサンプル平均 \bar{F} が、アンサンブル平均 μ としてのバイアスのない見積もり（推定量）として扱えることが知られており [9]、サンプル平均をもってアンサンブル平均とする。

さらに、共分散関数 (covariance function) を

$$R(r) = E[(F_t - \mu)(F_{t+r} - \mu)], \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (10)$$

により定義すると、自己相関関数は

$$\rho(r) = R(r)/R(0), \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (11)$$

として定義される。

定常過程における自己共分散、自己相関関数の見積もり（推定量）は

$$\hat{R}(r) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-|r|} (F_t - \bar{F}) \cdot (F_{t+|r|} - \bar{F}), \quad (12)$$

$$\hat{\rho}(r) = \hat{R}(r)/\hat{R}(0) \quad (13)$$

を用いることがすすめられ、 N が大きければ真値に近い値を導くこととなる [9, chap. 5].

また、導出された1ステップの自己相関関数 ρ の値は解 x_0 のコストとその近傍解コストの相関係数と同値である。解 x_0 の任意の2つの近傍解コストの間の相関係数 ν は、近傍解同士の間通する属性の比率が高いことから、近似的に ρ に近い定数と仮定する。このように、AR(1) プロセスの考えに基づき解空間および評価値系列の特微的な統計量が推定可能となり、以後で述べる推定値の基本統計量として活用できる。

4.2 近傍構造の確率的解析

本節では、AR(1) モデルから得られた統計量をもとに、特定の近傍に依存することなく、様々な近傍に対して解析可能な確率モデルの構築を目指す。その確率モデルを構築するために、解空間上の評価値の確率変数が任意の分布を持つ仮定を必用とする。また、TSP の多くの事例において、その評価値の周辺分布の全てがガウス分布の性質を伴うことが、実験的にも理論的にも示されている。例えば、Karlin と Taylor[7] は、結合分布がガウス分布ならば、その周辺分布はガウス分布であることは示している。また、多くの組合せ最適化問題において、コンピュータシミュレーションにより、ランドスケープが多変量ガウス分布の特徴を示すことを示唆している [13]。

もし評価値の確率変数がガウス分布であると仮定できるならば、近傍の確率的解析は可能となる。すなわち、近傍の分布が、評価値の平均ベクトル、共分散行列により推定可能となる。それゆえに、TSP のランドスケープを多変量ガウス分布と仮定し近傍モデルの構築を行う。

モデルを考察するために、まず、任意の解を x_0 として、解 x_0 に対する近傍解の集合を $\{x_1, x_2, \dots, x_b\}$ と考える。 b は近傍解の個数 $|N(x_0)|$ である。さらに F_0 を解 x_0 のコストを示す確率変数とし、 $\{F_1, \dots, F_b\}$ を解 x_0 の近傍解 $\{x_1, \dots, x_b\}$ のコストを表す確率変数をとす。ここで、近傍構造は次の確率にもとづきモデル化できる。

$$P\{F_1 = c_1, F_2 = c_2, \dots, F_b = c_b | F_0 = c_0\} \quad (14)$$

この確率は、任意の解 x_0 がコスト c_0 である場合、その解 x_0 の近傍解 $\{x_1, x_2, \dots, x_b\}$ のコストが各々 $\{c_1, c_2, \dots, c_b\}$ となる条件付き確率を示している。(14) 式に対応する確率密度関数を

$$h(c_1, c_2, \dots, c_b | c_0) \quad (15)$$

として定義する。この条件付き確率密度関数 (15) 式は、近傍 $N(x_0)$ の確率

密度関数と同値となる。

近傍 $N(x_0)$ の確率モデルを構築するために、 $\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_b, F_0)^\top$ が、平均ベクトル \mathbf{m} と共分散行列 Σ をもつ多変量ガウス分布 $\mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ となると仮定する。 $\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_b, F_0)^\top$ に対して、平均ベクトル、共分散行列は、

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} m_1 \\ \vdots \\ m_b \\ m_0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1b} & r_{10} \\ & \ddots & & \\ r_{b1} & \cdots & r_{bb} & r_{b0} \\ r_{01} & \cdots & r_{0b} & r_{00} \end{pmatrix} \quad (16)$$

となる。すなわち、 $\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_b, F_0)^\top$ の各要素の平均は m_i となり、 F_i , $i = 1, \dots, b, 0$ の分散は r_{ii} である。 F_i , $i = 1, \dots, b, 0$ と F_j , $j = 1, \dots, b, 0$, $i \neq j$ の共分散が r_{ij} となる。

TSP のランドスケープが AR(1) であるならば、(9), (12), (13) 式により、 μ, σ, ρ が見積もられ、多変量ガウス分布 $\mathbf{F} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ のパラメータは、

$$m_i = \mu, \quad i = 1, \dots, b, 0, \quad (17)$$

$$r_{ii} = \sigma^2, \quad i = 1, \dots, b, 0, \quad (18)$$

$$r_{i0}, r_{0i} = \rho\sigma^2, \quad i = 1, \dots, b, \quad (19)$$

$$r_{ij} = \nu\sigma^2, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, b \quad (20)$$

として導出可能となる。また、現在の解 x_0 とその近傍との相関係数 ρ は、AR(1) の時系列のワンステップにおける自己相関と同値である。 ν は、現在の解 x_0 の近傍同士の相関であるが、ここでは ρ と同一な値を用いる。両者の解構造においてはほぼ共通する属性となるため、近似値としても用いても確率解析において十分実用に耐える結果を得ている。

近傍 $N(x_0)$ に対応する確率密度関数 $h(c_1, \dots, c_b \mid c_0)$ を導出するため、 \mathbf{F} , \mathbf{m} , Σ を、

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{m}_2 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \quad (21)$$

のような分轄形式で考える．ここで，分轄された各々は，

$$\mathbf{F}_1 = (F_1, \dots, F_b)^\top, \quad \mathbf{F}_2 = (F_0), \quad (22)$$

$$\mathbf{m}_1 = (m_1, \dots, m_b)^\top, \quad \mathbf{m}_2 = (m_0) \quad (23)$$

であり， $\Sigma_{11} = (r_{ij})$ を F_i , $i = 1, \dots, b$ と F_j , $j = 1, \dots, b$ に対する共分散行列とし，その各要素を r_{ij} , $i, j = 1, \dots, b$ と記す． $\Sigma_{22} = (r_{00})$ は F_0 の分散とする．そして， $\Sigma_{12} = (r_{i0})$ と $\Sigma_{21} = (r_{0i})$ は F_0 と F_i , $i = 1, \dots, b$ との共分散を表す．

この多変量ガウス分布 $\mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ から近傍の確率密度関数 $h(c_1, \dots, c_b \mid c_0)$ を導出する．すなわち， $\mathbf{F}_2 (= F_0) = c_0$ のもとでの \mathbf{F}_1 の条件付き確率が近傍 $N(x_0)$ の確率モデルを与える．

そこで， $h(c_1, \dots, c_b \mid c_0)$ の分布を導出し近傍の確率分布を特定したい．前述した $\mathbf{F} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ の仮定のもと， \mathbf{F}_2 の要素が $F_0 = c_0$ として与えられた \mathbf{F}_1 の条件付き確率分布 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ の \mathbf{m}' と Σ' は

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m}_1 + \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} (c_0 - \mathbf{m}_2) = (m'), \quad (24)$$

$$\Sigma' = \Sigma_{11} - \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} \Sigma_{21} = (r'_{ij}) \quad (25)$$

となることが知られている [12]． $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ は，平均ベクトル \mathbf{m}' ，共分散行列 Σ' の b 次元多変量ガウス分布を表す．すなわち，解 x_0 がコスト c_0 をもつ時の解 x_0 の近傍を多変量ガウス分布 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ としてモデル化できる．この (24) と (25) 式より，近傍解の平均，分散，共分散は，

$$m' = \mu + \rho(1)(c_0 - \mu), \quad (26)$$

$$r'_{ii} = \sigma^2(1 - \rho(1)^2), \quad i = 1, \dots, b, \quad (27)$$

$$r'_{ij} = \sigma^2(\nu - \rho^2), \quad i = 1, \dots, b, \quad j = 1, \dots, b, \quad i \neq j \quad (28)$$

となる多変量ガウス分布モデルとなる．

5 Elementary Landscapes からの視点

AR(1) が成立すると仮定し、確率的な観点で近傍の特性を解析した。この近傍の解析には、もう一つの視点として、Elementary Landscapes の考え方によるアプローチが可能である。本節では、その Elementary Landscapes から近傍を解析する考え方を示し、その視点から近傍、解空間に対する数理的解析の可能性、拡張性を検討する。

まず、TSP に対するランドスケープは (X, N, f) の 3 対によって決定される。目的関数 f が、解とその近傍解による繋がりで構成されるグラフのラプリアンの固有関数であるとき、その問題のクラスを elementary landscapes と呼ぶ [10]。この elementary landscapes は幾つかの性質をもつランドスケープの特別なクラスに属する。このクラスの性質の 1 つとして、次のグローバール方程式が満たされる。

$$E_{y \in N(x)}[f(y)] = f(x) + \frac{k}{d} (\bar{f} - f(x)), \quad \forall x \in X \quad (29)$$

ただし、 \bar{f} は解空間の平均であり、 d は近傍のサイズに対応し、 k は解空間 X と近傍 N に依存する定数となる。逆に、もし k が分かれば、その問題の近傍の特性が容易に導かれることとなる。

Elementary Landscapes の特徴を有するのであれば、 k によりいかなるインスタンスに対しても近傍の特性が一意に定義され導かれることとなる。特に、解空間が多峰性であり、かつ複雑な様相を示す TSP において、ある一定の性質を有することは驚異に値する。本論文では、その性質を数値実験を通し検証を行うものである。ここでは、基本的な値である、近傍の期待値に着目しその性質を確認するが、今後、さらに近傍の探索能力などの性質が、単純な特性により導き出すことが可能であるか検証し、elementary landscapes の視点からの応用をはかりたい。

また、このグローバール方程式は、確率的解析で与えられた (26) 式と対応

する式となる。この一致性を用いて、相関関数 $\rho(r)$ において、

$$\rho(r) = \left(1 - \frac{k}{d}\right)^r \quad (30)$$

の関係が成立する。したがって、定数 k が導かれれば自己相関関数が容易に導出でき解の近傍を解析できる。ただし、解空間 X と近傍 N に依存する定数 k は幾つかの問題に対して導かれているが、多くの問題に対して k は特定されていない。特定されている k の幾つかは、各々の問題に対して代数的考察に基づき導き出しているケースが多いが、単純な構造の場合に限られている。逆に、本研究による確率的解析から求まる自己相関関数から k を導くことは可能である。ただし、AR(1) が成立する条件と elementary landscapes が成立する条件において必用十分な関係を検討しなければならない。AR(1) における自己相関関数から k が求められるならば、elementary landscapes の考えの適用が大幅に広がるものとする。

本研究では、TSP の 2-opt 近傍に対して数値実験を行うが、その 2-opt 近傍に関しては代数的な考察により k を導く事が可能である [14]。ここでは、近傍移動の操作における TSP の都市間距離の増減にもとづく変化コストを導き出し、グローバー方程式と対比することにより、問題に依存する定数 k を導き出している。2-opt 近傍において、 $k = n - 1$ と導出され、2-opt 近傍の大きさは、 $d = n(n - 3)/2$ と計算される。

6 数値実験

確率的解析に関しては、理想的な問題に対して理論モデルの有効性は得られている段階である。本研究では、より実用的な問題に対して、確率的解析により導かれる近傍の特性が実際の実験値と一致しているか改めて検証していく。ここで、解空間上の評価値系列が AR(1) プロセスと仮定したが、実験対象がその性質となるかは確認しておく必要がある。さらに、elementary landscapes の視点から得られる特徴が、解析の実用に耐え得るかなど実験

的に示す。以上の実験対象とする TSP の事例として、TSPLIB[5] から 3 つの実践的な問題である `eil101.tsp`, `gr202.tsp`, `lin318.tsp` を選び、2-opt 近傍を用い、その特徴を実験的に明らかにする。

最初に、解空間上の評価値系列の特徴を確認しておきたい。近傍構造モデルを構築するため、解空間上の評価値系列を AR(1) プロセスと仮定した。この評価値系列が AR(1) プロセスであれば、いくつかの特性が得られるわけであるが、問題は実際に AR(1) プロセスであるかということに帰着される。AR(1) プロセスの特徴的な性質として指数的な減衰性を示す (6) 式となる顕著な特性がある。この指数的減衰性を確認して、評価値ランドスケープ上の評価値系列が AR(1) プロセスに従う必要条件を確かめ、モデルとして採用できるかを確認したい。

たとえば、`eil101.tsp` に対する評価値系列データの自己相関関数の振る舞いを示したのが図 1 である。横軸はステップの変化に対応し、縦軸が自己相関関数の値となる。実線がその評価値系列データのサンプルから (13) 式により計算した自己相関関数の変化である。このときの評価値系列のサンプルパスの長さ、すなわち (12) 式の N の値は 1000000 とする。また、破線は指数的減衰性を表わす (6) 式の変化をプロットしたものであり、指数的減衰の振る舞いを表わす理論曲線である。ただし、最初の値である $\rho(1)$ は観測値から推定した値を用いており、その値に対する指数関数的な減衰性を示す理論曲線である。結果として、実線の観測値から得られた自己相関関数の値の変化は、指数的減衰性の変化を表わす理論曲線にほぼ一致した結果となった。

以上、`eil101.tsp` の解空間のサンプルから求めた自己相関関数値は AR(1) の特徴を示す指数関数的な減衰性が認められた。したがって、その空間における近傍点のランダムな評価値系列は AR(1) プロセスに従っていると言ってよいであろう。また、その他の問題に対しても同様な指数的減衰性が見られ、AR(1) プロセスの特性を有していた。以上より、実験対象のランドスケープにおいて、AR(1) プロセスを仮定することには十分な根拠となると

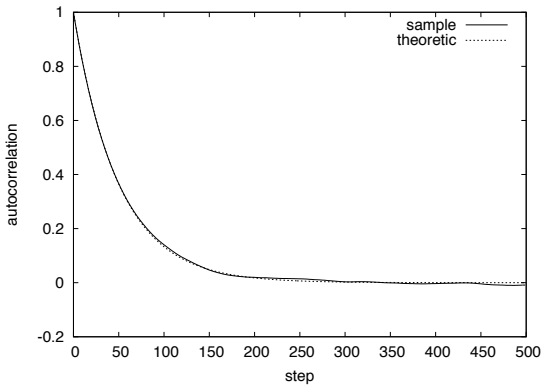


図1 eil101.tsp に対する 2-opt 近傍での自己相関関数の振る舞い

考えて良いであろう。

さらに、AR(1) の仮定のもと評価値の時系列から相関関数の値が実験的に推定できる。また、今回の 2-opt 近傍に関しては定数 k の値が知られているので、Elementary Landscapes の性質から (30) 式により相関関数 $\rho(r)$ が導出可能である。そこで、各問題に対して、それらの頂点数 n と近傍の大きさ $d = n(n-3)/2$ 、および問題に依存する定数 $k = n-1$ の値と、それらの値により求まるグローバー方程式による $\rho(1)$ 、かつ AR(1) による $\rho(1)$ を表 1 に合わせて示しておく。また、この表におけるグローバー方程式による $\rho(1)$ の項目名を“Grover”とし、AR(1) による $\rho(1)$ の項目名を“AR(1)”とする。その結果、確率的視点から求めた自己相関関数 $\rho(r)$ と k の値から求めた自己相関関数に強い一致性が見られた。すなわち、Elementary Landscaps であれば、どのインスタンスに対しても定数 k のみの値により、近傍の特徴を表す相関関数は一意に定まることが示される。

次に、AR(1) に基づく近傍の特徴を表す期待値、およびグローバー方程式

表 1 近傍の相関係数の推定値

問題	n	d	k	Grover	AR(1)
eil101.tsp	101	4949	100	0.9798	0.9803
gr202.tsp	202	20099	201	0.9900	0.9902
lin318.tsp	318	50085	317	0.9937	0.9940

から導かれる近傍解の期待値の精度を検証する．合わせて、両者を比較することにより共に矛盾しない関係であるかを確認したい．表 2 に、eil101.tsp に対するそれらの実験結果を示す．この表の項目では、現在の解 x のコストを “ $f(x)$ ” とし、解 x の近傍を実験的に生成し求めた実際の期待値を “サンプル” とする．また、AR(1) の考えから求まる (26) 式による期待値を “AR(1)” とし、elementary landscapes の性質から求まる (29) 式による期待値を “Grover” として記しておく．また同様に、gr202.tsp と lin318.tsp の問題に対しての結果を表 3, 4 に示す．

これらの結果から、近傍の期待値の推定では、AR(1) にもとづく確率的解析、および Elementary Landscapes の視点による解析において両者とも精度の高い推定値を示した．両者の一致性から AR(1) と Elementary Landscapes は必用十分な関係でもあることが予想される．また、グローバー方程式から導出した推定値が、若干、AR(1) から導出した推定値に勝るものとなっている．近傍解の特徴が、グローバー方程式により従う傾向が強いことは興味ある結果である．また、複雑な解空間の下で、Elementary Landscapes の性質が適用可能であり、解空間と近傍における一般性が導かれる可能性を示す実験結果となった．

表2 eil101.tsp における近傍の期待値の推定値

$f(x)$	サンプル	AR(1)	Grover
2151.458008	2177.270996	2176.462158	2177.270738
1503.113403	1542.031372	1540.806274	1542.02665
1002.470459	1051.501343	1049.961426	1051.499749
803.753357	856.804382	855.133545	856.7979447
696.215698	751.435852	749.700439	751.4332026

表3 gr202.tsp における近傍の期待値の推定値

$f(x)$	サンプル	AR(1)	Grover
2308.951172	2317.286377	2317.128418	2317.223452
1701.791748	1716.153198	1715.993408	1716.135924
1173.282471	1192.93457	1192.728149	1192.912003
804.578247	827.910461	827.682373	827.8950046
521.710083	547.880615	547.621094	547.8556629

7 おわりに

計算困難な組合せ最適化問題の近似解を求めるための手法としてメタヒューリスティクスの研究，開発がなされている．この手法のベースとなる近傍の構造を解析することは近傍生成などにおける知識獲得を可能とし，メタヒューリスティクスの改良につながる知見となりうる．また，アルゴリズムの良し悪しを解析するための理論的解析の基本的情報を提供するものである．

表 4 lin318.tsp における近傍の期待値の推定値

$f(x)$	サンプル	AR(1)	Grover
505894.7813	506442.25	506410.1875	506414.5818
306857.4688	308647.5938	308622.0313	308637.0243
101702.2578	104780.6875	104754.3438	104780.2899
73638.75781	76895.07813	76866.96875	76894.41058
44615.73828	48054.28125	48026.125	48055.08471

そこで本論文では、近傍の分布の特性を確率的に解析するための2つのアプローチを示し、その2つのアプローチに関して実践的な問題事例に対しての数値実験を試みた。

1つの方法は、解空間、近傍点の特性を示す統計量を導出するために、評価値ランドスケープ上の評価値系列が AR(1) プロセスと呼ばれる特徴的な性質を有する仮定のもと必要な統計量を導き出した。さらに、AR(1) プロセスから導き出した統計量と、解空間にガウス性を伴う仮定を用いて近傍の構造を確率的にモデル化し、汎用的な近傍の特性の解析に成功した。ただし、この確率的解析の実用性に関しては、幅広く実践的な問題事例に対して調査する必用があり、ここでは、幾つかの実践的な問題を取り上げその可能性を示した。

もう一つの方法として、Elementary Landscapes という特徴付けられた解空間の上で、解と近傍解の間に生じるいくつかの性質から検討を加えた。その性質として、グローバー方程式が成立するが、その方程式を用い近傍の分布の特性が求まる。ただし、問題特有の定数 k を導かねばならない。すでに、2-opt 近傍に関してはその値が導出されているので、本論文では、2-opt を対象に Elementary Landscapes における性質を検討したい。

合わせて、この2つの解析の違い、一致性を明確にし理論的解析の拡張の

可能性を論ずる．実験結果から，AR(1)にもとづく確率的解析，およびグローバー方程式による解析において共に精度の高い推定値を得た．両者の一貫性から AR(1) と Elementary Landscapes との関係は必用十分であることが予想され，そうであるならば互いの特性値を利用し解析の展開をはかることが可能である．そして，複雑な解空間上で，近傍解が，単純な方程式に従い移動することは興味ある結果の1つである．

今回は，TSP における実践的な問題に対して，2-opt 近傍に焦点をあて検証を試みたが，今後はさらに異なる近傍，異なる問題に実験対象を広げ解析の性能，特徴を明らかにしていきたい．また，AR(1) と Elementary Landscapes との関係性，両者を用いた応用への展開など試み，さらに優れた理論的解析の世界を築きたい．

参考文献

- [1] E. Aarts and J. K. Lenstra, editors. *Local Search in Combinatorial Optimization*. Princeton University Press, 2003.
- [2] H. M. M. Eikelder, M. G. A. Verhoeven, T. W. M. Vossen, and E. H. L. Aarts. A probabilistic analysis of local search. In I.O. Osman and J.P. Kelly, editors, *Meta-Heuristics: Theory & Applications*, pages 605–618. Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [3] T. F. Gonzalez, editor. *Handbook of Approximation Algorithms and Metaheuristics*. Chapman & Hall/CRC, second edition, 2018.
- [4] J. Humeau, A. Liefoghe, E. G. Talbi, and S. Verel. ParadisEO-MO: from fitness landscape analysis to efficient local search algorithms. *Journal of Heuristics*, 19(6):881–915, 2013.
- [5] D. S. Johnson and L. A. McGeoch. Experimental analysis of heuristics for the STSP. In G. Gutin and A. P. Punnen, editors, *The Traveling Salesman Problem and Its Variations*, pages 369–443. Springer,

- 2002.
- [6] T. Kaji. A probabilistic analysis of neighborhoods for combinatorial optimization problems and its application. *Journal of Heuristics*, 27(6):1057–1079, 2021.
 - [7] S. Karlin and H. Taylor. *A First Course in Stochastic Processes*. Academic Press, second edition, 1975.
 - [8] P. M. Pardalos and M. G. C. Resende, editors. *Handbook of Applied Optimization*. Oxford University Press, 2002.
 - [9] M. B. Priestley. *Spectral Analysis and Time Series*. Academic Press, 1983.
 - [10] P. F. Stadler. Towards a theory of landscapes. In R. López-Peña, H. Waelbroeck, R. Capovilla, R. García-Pelayo, and F. Zertuche, editors, *Complex Systems and Binary Networks*, pages 78–163. Springer-Verlag, 1995.
 - [11] E. G. Talbi. *Metaheuristics: From Design to Implementation*. Wiley, 2009.
 - [12] Y. L. Tong. *The Multivariate Normal Distribution*. Springer-Verlag, 1990.
 - [13] E. Weinberger. Correlated and uncorrelated fitness landscapes and how to tell the difference. *Biological Cybernetics*, 63:325–336, 1990.
 - [14] L. D. Whitley, A. M. Sutton, and A. E. Howe. Understanding elementary landscapes. In *Proceedings of the 10th annual conference on Genetic and evolutionary computation (GECCO-2008)*, pages 585–592, 2008.

