

Local Search の確率的解析による性能評価

加 地 太 一

1 はじめに

本論文であつかう最適化問題とは、最も適切な計画、設計、方策などを作成し、または選択する問題を対象とするものである。最適化は極めて普遍的な問題であり、歴史的にも人類の活動とともに始まったともいえる。その中で、いくつかの問題が数理的に取り扱われたのも新しい話ではない。ここでは特に、対象が組合せ的・離散的な条件の下での最適化である組合せ最適化問題を取り扱う。対象が組合せ的・離散的であるとき、独自の視点が要求される。すなわち、これらの問題は全ての可能解を列挙し、その中から最適解を導き出すという自明なアルゴリズムが存在するが、実用性の観点からは無意味である。組合せ的爆発により、もはや計算機が扱える範囲を超えてしまうからである。したがって、すべてを列挙することなく最適なものをついかに効率よく見出すかがポイントとなる。

組合せ最適化問題では厳密解を求める場合、膨大な数の可能解の中から何らかの方法で最適解を探索するというアプローチがとられる。最適解を見失うことなく、探索領域をついかに限定するかが重要であって、この目的に動的計画法 (Dynamic Programming) や分枝限定法 (Branch-and-Bound) などが用いられていた。

しかし、組合せ最適化問題の多くは本質的に複雑度が高く、厳密な最適解を効率よく求めるのは困難である。だが、最適値に近い値をもつ可能解であれば効率よく求め得る可能性があり、実用上大きな意味がある。近似最適解をう

まく求めるには、問題の解や構造に関する知識をいかに利用するかがポイントになるのでヒューリスティック解法と呼ばれる。さらに、近年ではそのヒューリスティックな知識を組み合わせにより高度なアルゴリズムを構成するためのメタ戦略の研究が盛んに行われている [6]。その中には Local Search 法, Simulated Annealing 法, 遺伝アルゴリズム, Tabu Search 法など、最近話題のアプローチも含まれている。しかし、これらのアルゴリズムの優劣, および, 性能, 特性などは数値実験などにより判別され経験的な評価の域をでていない。

本論文ではこれらのアルゴリズムの優位性を明確にするため, 理論的にその求まる解の特性を考察する。ここでは, 各種のメタヒューリスティックアルゴリズムのベースとなっている Local Search アルゴリズムについて, 代表的な組合せ最適化問題である巡回セールスマン問題を対象として検討したい。この研究に関して Eikelder 等 [2] は得られる解の値, および要求される反復数の理論的な期待値を検討しアルゴリズムの振る舞いを示した。ここで, Local Search で重要なファクターである近傍構造は TSP でよく用いられる 2-opt 近傍を採用して分析を試みている。しかし, そこで必要な確率計算を理論的に容易に計算するためかなり限定した 2-opt 近傍を設定し理論的な値を計算しており, 実際に利用される近傍を使用したアルゴリズムとは異なる値が導出されるものと考えられる。そこで, 本研究では実際に使われている 2-opt 近傍を反映したモデルを提唱し, より現実に近い理論値の導出を試みる。

2 トラベリングセールスマン問題

トラベリングセールスマン問題 (TSP) は典型的な *NP* 完全な組合せ最適化問題であり, 各種のヒューリスティックアルゴリズムの優位性を比較するための試金石の問題である。TSP 問題はグラフ $G(V, E)$ に対して, n 個の都市 (頂点) をおのおの一回訪問する条件のもとで, 最小距離を与える巡回路 (ツアー) を発見する問題である。ここで, V は n 個の都市を表す頂点集合, お

よび E は各都市の経路を表す辺集合とし、各辺には都市 i, j 間の距離コスト d_{ij} が割り当てられる。すなわち、 d_{ij} を要素とする行列 D で表される完全グラフ上の最小ハミルトン閉路を探索する問題である。TSP 問題の典型的な応用としては、電子部品のプリント基盤への自動装着システムにおける実装順序の最適化に利用されている。他にも配送計画、スケジュールなど各種の計画問題への利用が計られている。

3 TSP に対する 2-opt 近傍と Local Search

TSP に代表される NP 困難である離散的最適化問題は一般に以下のように与えられる。

$$\begin{cases} \min & f(x) \\ \text{subject to} & x \in X \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 x は n 次元ベクトルからなる解を表わし、 X は実行可能解の集合を表わす離散的な性質を持つ集合を意味する。また、関数 $f(x)$ は目的関数と呼ぶ。TSP では $f(x)$ の最小化についての問題を考える。

この問題の近似解導出の基本解法として Local Search がある。Local Search のアルゴリズムの構造は近傍を基礎として構築され、その効率は近傍の構造に強く依存していることが経験的に知られている。実行可能解の集合 X を与えたとき、近傍 \mathcal{N} は以下の写像と定義される。

$$\mathcal{N} : X \rightarrow 2^{|X|} \quad (2)$$

すなわち、実行可能解の集合から、そのべき集合（部分集合の集合）への写像が近傍である。また、実行可能解 $x \in X$ で、 $f(x) \leq f(y), \forall y \in \mathcal{N}(x)$ を満たすものを（近傍 \mathcal{N} に対する）局所最適解（locally optimal solution, local opt）と呼ぶ。

本問題で扱う巡回セールスマン問題に対する代表的な近傍構造として

2-opt 近傍があげられる。順列 r に対応する巡回路に含まれる枝の集合を $\mathcal{T}(r)$ とし、 $G = (V, E)$ の Hamilton 閉路の集合を \mathcal{H} とすると、TSP に対する 2-opt 近傍 \mathcal{N}_2 は以下のように定義される。

$$\mathcal{N}_2(r) = \{r' \in \mathcal{H} : \mathcal{T}(r') = \mathcal{T}(r) \setminus \{e_1, e_2\} \cup \{e_3, e_4\}, \\ e_1, e_2 \in \mathcal{T}(r), e_3, e_4 \in E \setminus \mathcal{T}(r)\} \quad (3)$$

上記の近傍 \mathcal{N}_2 に基づき Local Search アルゴリズムを構成する。Local Search アルゴリズムは、何らかの方法で得られた可能解 x に対してその近傍 $\mathcal{N}(x)$ を定義し（本問題では \mathcal{N}_2 を使用する）、 $\mathcal{N}(x)$ 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するアルゴリズムである。Local Search は Tabu Search, Simulated Annealing などの他の発展的なメタヒューリスティックスの基盤となるアルゴリズムでもある。その一般的アルゴリズムは図 1 となり、以下の関数 $imp(x)$ を用いることによって記述する。ただし、今回採用する移動関数は $imp(x)$ 関数で示されるように近傍の中で最良のものへ移動するものとする。

Procedure Local Search

```

1: begin
2:    $x :=$  some initial feasible solution ;
3:    $x' = imp(x)$  ;
4:   while  $f(x') < f(x)$  then begin
5:      $x = x'$ 
6:      $x' = imp(x)$  ;
7:   end ;
8: end,
```

図 1. Local Search アルゴリズム

$$\text{imp}(x) = \{s' \in \mathcal{N}(x) : f(s') \leq f(s), \text{ for all } s \in \mathcal{N}(x)\} \quad (4)$$

ここで、探索が停止すると、そのときの x は近傍 $\mathcal{N}(x)$ 内に x より良い解がないという意味で、局所最適解 (local optimal solution) となる。

4 局所解の確率分布

本章では、TSP (最小化問題) に対して、2-opt 近傍構造を用いたローカルサーチアルゴリズムを実現したときの局所解の評価値における確率分布、および、局所解を得るのに要するステップ数の確率分布について Eikelder 等が示したこと [2] を要約する。TSP 上の強多峰性の評価値空間 (rugged fitness landscapes) を解析するために、その各点の評価値を確率変数と仮定し、構造のモーメントを導出することが適当である。そのために、まずグラフ $G(V, E)$ の各辺のコストを平均 μ , 分散 σ_i^2 の独立な確率変数 e_{ij} とみなすことによりグラフ構造を定義する。ただし、このとき互いに独立であるためにユークリッドの距離の公理系には従わないのは自明であろう。結果として、 n 個の独立した確率分布 e_{ij} の総和がツアー t のコストと考えられ、かつ同様に確率変数となり $f(t)$ で表す。中心極限定理より、 $f(t)$ は平均 $\mu = n\mu_i$, 分散 $\sigma^2 = n\sigma_i^2$ の正規分布をもつ。これに相応する確率密度を ω_{tour} と表すことにする。このグラフ上で、ツアー t を考えその近傍を t_1, \dots, t_b とする。ここで、 b は近傍集合の大きさであり、2-opt の場合 $b = n \cdot (n-3) / 2$ である。以後の解析の計算に必要となる基本的な確率として次のステップ確率がある。

$$g(c_0, c) = \Pr \{ \forall i \in \{1, \dots, b\} \ f(t_i) > c \mid f(t_0) = c_0 \} \quad (5)$$

これはツアー t_0 がコスト c_0 を持つときその近傍のすべてがコスト c より大である確率を示す。また $g(c_0, c_0)$ はツアー t_0 が局所解である確率に等しい。この $g(c_0, c)$ の計算の導出については次章の AR (1) モデルにより解析を試みる。この $g(c_0, c)$ を用いて Local Search にもとづく多くの確率が導出される。ま

ず、任意に抽出したツアーが局所解である確率を A とすると以下となる。

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} g(c, c) \omega_{tour}(c) dc. \quad (6)$$

これより、局所解が c である確率は

$$A^{-1}g(c, c) \omega_{tour}(c) \quad (7)$$

となる。次に、Local Search によってコスト c_0 の解からコスト c の解へ移動する確率について考えたい。そこで、まず、コスト c_0 のツアーが c 以下のツアーへ移動する分布関数を考察する。ただし、初期ツアー t_0 はコスト c_0 をもち、その近傍としてツアー t_1, \dots, t_b をもつ。また、 S' を局所解の集合とする。ここで、 $c < c_0$ に対して以下の式によりその分布関数は計算可能である。

$$\begin{aligned} \Pr \left\{ \min_{1 \leq i \leq b} f(t_i) \leq c \mid (f(t_0) = c_0) \wedge (t_0 \notin S') \right\} \\ = \frac{1 - g(c_0, c)}{1 - g(c_0, c_0)} \end{aligned} \quad (8)$$

この分布関数の微分より考えたい確率密度を容易に示せる。それは以下となる。

$$\begin{aligned} P(c, c_0) &= \frac{\partial}{\partial c} \Pr \left\{ \min_{1 \leq i \leq b} f(t_i) \leq c \mid (f(t_0) = c_0) \wedge (t_0 \notin S') \right\} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial c} g(c_0, c) \\ &= \frac{\partial}{\partial c} \frac{1 - g(c_0, c)}{1 - g(c_0, c_0)} \end{aligned} \quad (9)$$

上記は局所解でないコスト c_0 をもつツアーが与えられたとき、Local Search の一反復後にコスト c に達する密度関数を表現する。

さらに、 k 反復後の局所解の確率密度を再帰的に計算することにより求める。そこで、いくつかの諸記号を定義する。まず、 $\rho_k(c)$ を高々 k 回のステップでコスト c の局所解に達する密度関数とする。また、 $\eta_k(c)$ を k ステップまで局所解に達せず $k+1$ ステップでコスト c となる密度関数としよう。ただし、上記で想定したランダムグラフ上ではすべての c に対して $\rho_0(c) = 0$ であり、 $\eta_0 = \omega_{tour}$ となる。それぞれ、以下の再帰式により表現される。

$$\rho_{k+1}(c) = \rho_k(c) + g(c, c) \eta_k(c) \quad (10)$$

$$\eta_{k+1}(c) = \int_c^\infty \eta_k(c_0) (1 - g(c_0, c)) P(c_0, c) dc_0 \quad (11)$$

これらより、最終解の局所解密度が

$$\rho_{fin} = \lim_{k \rightarrow \infty} \rho_k \quad (12)$$

で計算される。ただし、 $\lim_{k \rightarrow \infty} \eta_k = 0$ であり上式は収束され一定の値に近づく。最後に、局所解に達するステップ数を確率変数 steps と捉えれば、

$$Pr \{ \text{steps} = k \} = \int_{-\infty}^\infty g(c, c) \eta_{k-1}(c) dc \quad (13)$$

となる。

5 AR(1) プロセスによるステップ過程の解析

Eikelder 等は(5)式のステップ確率を計算するために、実際の2-opt 近傍を限定したモデルを提唱し導出を試みた。本章ではそれに対して、TSP の探索過程における AR(1) landscape 構造のモデル化の考え [4] をもとに、(5)式のステップ確率の具体的導出を試みた。以下にその導出の過程を述べる。

すべての可能なツアー t の集合を T としよう。そして、与えられたツアーからある基本操作で別のツアーを導出することを移動と呼び、その移動の集合によって、任意のツアーに対して近傍集合が定義できる。各ツアー t に対してツアー t の長さ、または評価値 (コスト) を $f(t)$ で表すこととする。その写像 $f: T \rightarrow R$ を TSP の評価値 landscape と呼ぶこととする。landscape という言葉は理論生物学に端を発し、組合せ的対象から実数値への写像に関する問題に広がりつつある。最近、Weiberger [5] は不偏的ランダムウォークの概念が landscape 構造を調査するための適切な手法であることを示した。ここで、“landscape は統計的に isotropic である” という重要な付加的条件を課するこ

とが必要である。

ランダムに選んだ点(ツアー)を出発点としてランダムに選ばれた近傍点(近傍ツアー)に移動し、この点から再びランダムに選ばれた近傍点に移動することなどを繰り返すことによって得られた評価値 (fitness) の系列を考える。この評価値の系列の統計が、選ばれた出発点にかかわらず同じであるとき、考えている landscape は統計的に等方的なランドスケープ (statistically isotropic landscape) であるという。TSP ではこの性質がみたまわると考えられるので、この考え方を利用し、TSP ランドスケープの構造を分析することが可能である。

我々はまた、landscapes の集合体 (landscapes ensemble) に着目して考察を進める。TSP の統計的解析において、平均について二つの異なるタイプ、すなわち、各事例ごとのランダムウォークによって得られた時系列上でとられるサンプル平均と、異なる多数の事例の上でとられるアンサンブル平均がある。今後の議論では、エルゴード性が成り立ち、これら二つの平均は一致するものと仮定する。この前提のもとに、TSP landscape の統計的特性の分析を試み、ステップ確率 $g(c_0, c)$ の表示式の導出を目指す。

TSP の探索過程のステップ t_k における評価値 $f(t_k)$ がつくる時系列は、あるランダムウォークの結果であると考えることができ、定常確率過程 (stationary process) [1] を形成する。定常過程の定義から、 $f(t_k)$ は定数の平均値 μ と分散 σ^2 を持つ。すなわち、

$$E[f(t_k)] = \mu \quad \text{for all } k \quad (14)$$

$$E[(f(t_k) - \mu)^2] = \sigma^2 \quad \text{for all } k \quad (15)$$

が成立する。また定常性により、 $Cov(f(t_i), f(t_j))$ はステップ差 $|i - j|$ にのみ依存する。共分散関数 (covariance function) を

$$R(h) = Cov(f(t_h), f(t_0)) = E[(f(t_h) - \mu)(f(t_0) - \mu)] \quad (16)$$

により定義すると、

$$\text{Cov}(\underline{f}(t_i), \underline{f}(t_j)) = R(|i - j|) \quad (17)$$

であり、また勿論

$$R(0) = \text{Var}(\underline{f}(t_k)) = \sigma^2 \quad (18)$$

である。これより自己相関関数 (autocorrelation function) は

$$\rho(h) = \frac{R(h)}{R(0)} \quad (19)$$

によって定義される。

定常確率過程の一つの部分タイプとして AR(1)プロセス (autoregressive process of order one) [5] と呼ばれる定常過程がある。それは次の方程式をみたす過程である。

$$X_t = z_L X_{t-1} + N_t \quad (20)$$

ただし、 N_t は無相関確率変数の定常系列である。Weinberger [5] は、“AR(1)プロセスが、N-K 問題や TSP を含めて、landscape の広いクラスの上でランダムウォークの統計をうまく捕らえるであらうと考えることには十分納得のいく理由がある”と述べている。また、Gaussian かつ Markov である定常確率過程は、その自己相関関数は指数的な減衰を持つことが分かっており、更に、Gaussian process がその平均と自己相関関数によって完全に特徴付けられるという理由によって、すべてのこのような Markov process は AR(1)でなければならない。

TSP landscape の相関構造 (correlation structure) を定量化するために、我々は Stadler, P. F 等の論文 [4] にならって、確率過程 $\underline{f}(t_k)$ は次の再帰方程式で支配されるものとする。

$$\underline{f}(t_k) = \mu + \rho(1)[\underline{f}(t_{k-1}) - \mu] + \Delta \quad (21)$$

ただし、 Δ は平均 zero 分散 d^2 をもつ白色雑音である。便宜上、隣接関係にあ

るツアーの評価値の相関係数 $\rho(1)$ を ρ で表すことにし、新しい確率変数 ξ を

$$\xi = \Delta + (1 - \rho)\mu \quad (22)$$

によって導入すると、上記方程式(21)は標準形の AR(1)方程式

$$\underline{f}(t_k) = \rho \underline{f}(t_{k-1}) + \xi \quad (23)$$

に書き換えることができる。このとき擾乱項 ξ の平均と分散は、それぞれ

$$E[\xi] = (1 - \rho)\mu \quad (24)$$

$$Var(\xi) = Var(\Delta) = d^2 \quad (25)$$

である。このような landscape を AR(1) landscape と呼ぶ。この AR(1)方程式 (23) から今後必要となるすべての統計量を、相関係数 ρ を含む形で、具体的に導出することができる。主要な結果を列挙すると、

$$E[\underline{f}(t_k)] = \mu = \frac{1}{1 - \rho} E[\xi] \quad \text{for all } k \quad (26)$$

$$Var(\underline{f}(t_k)) = \sigma^2 = \frac{1}{1 - \rho^2} Var(\xi) \quad \text{for all } k \quad (27)$$

共分散関数 (covariance function) $R(h)$ については、

$$R(h) = Cov(\underline{f}(t_{k-h}), \underline{f}(t_k)) = \sigma^2 \rho^h \quad (28)$$

$$R(0) = \sigma^2 \quad (29)$$

$$R(1) = \sigma^2 \rho \quad (30)$$

また、自己相関関数 (autocorrelation function) $\rho(h)$ は、

$$\rho(h) = \frac{R(h)}{R(0)} = \rho(1)^h = \exp(-h/\lambda) \quad (31)$$

$$\rho(1) = \rho \quad (32)$$

となる。特に(31)式は、“AR(1)プロセスでは自己相関関数が指数関数的減衰を

する” というこのプロセス固有の性質を表している。ただし、 λ は相関長 (correlation length) を表すパラメタである。

ここで、更に過程 $f(t_k)$ はガウスかつマルコフ的 (Gaussian and Markovian) であるとする。このとき $f(t_k)$ と $f(t_k - 1)$ の同時確率分布は 2 変量正規分布に従う。この 2 変量正規分布はそれぞれの確率変数の平均と分散および相関係数によって一意に定まり、(26), (27), (32)式より、それは

$$N(\mu, \mu, \sigma^2, \sigma^2, \rho) \quad (33)$$

と表すことができる。この 2 変量正規分布と、その $f(t_{k-1})$ に関する周辺分布を用いて、条件 $f(t_{k-1})$ を与えたときの $f(t_k)$ の条件付確率分布を計算することができる。結果として正規分布 $N(\mu_n, \sigma_n^2)$ が導かれる。但し、

$$\mu_n = \mu + \rho(c_0 - \mu) \quad (34)$$

$$\sigma_n^2 = (1 - \rho^2) \sigma^2 \quad (35)$$

である。また、この確率分布は k には無関係であることに注意しよう。

この条件付確率分布を用いて点 t_0 の評価値が c_0 のとき、この点の任意の近傍点の評価値が c より大である確率を求めることができる。 $k = 1$ に対する条件付分布の正規分布表現 $N(\mu_n, \sigma_n^2)$ を用いると、求めようとする確率は次のように積分表示できる。

$$Pr \{ \underline{f}(t_i) > c \mid \underline{f}(t_0) = c_0 \} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_n} \int_c^\infty \exp\left(-\frac{(\xi - \mu_n)^2}{2\sigma_n^2}\right) d\xi \quad (36)$$

ここで、

$$\begin{aligned} x &= \frac{\xi - \mu_n}{\sqrt{2}\sigma_n} \\ x' &= \frac{c - \mu_n}{\sqrt{2}\sigma_n} \\ &= \frac{c - \mu - \rho(c_0 - \mu)}{\sqrt{2}\sqrt{1 - \rho^2}\sigma} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{c - \rho c_0 - (1 - \rho)\mu}{\sqrt{1 - \rho^2} \cdot \sigma} \end{aligned}$$

と置くと、この積分式は次のように変形できる。

$$\begin{aligned}
 \text{pr} \{ \underline{f}(t_i) > c \mid \underline{f}(t_0) = c_0 \} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} \exp(-x^2) dx \\
 &= \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(x) \\
 &= \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{c - \rho c_0 - (1 - \rho) \mu}{\sqrt{1 - \rho^2} \cdot \sigma} \right) \\
 &= \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(K_0 \left(\frac{c - \rho c_0}{1 - \rho} - \mu \right) \right) \quad (37)
 \end{aligned}$$

ただし、

$$K_0 = \frac{1}{\sqrt{2} \sigma} \sqrt{\frac{1 - \rho}{1 + \rho}}$$

であり、 $\operatorname{erfc}(x)$ は誤差関数を表す。

ここで、この(37)式が t_0 のすべての近傍に対して独立して成立するものと仮定し、 N をツアー t_0 の近傍の大きさとする。そうすると、

$$g(c_0, c) = \left[\frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(K_0 \left(\frac{c - \rho c_0}{1 - \rho} - \mu \right) \right) \right]^N \quad (38)$$

と求まる。

次に、(11)式で用いられる $P(c_0, c)$ に関する計算を示しておく。

$$r = K_0 \left(\frac{c - \rho c_0}{1 - \rho} - \mu \right)$$

とおき、また、

$$\frac{d}{dx} \operatorname{erfc}(x) = \frac{d}{dx} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt \right) = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}$$

であるので、

$$\frac{\partial g(c_0, c)}{\partial c} = -\frac{K_0 N}{1-\rho} \left(\frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\gamma) \right)^{N-1} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\gamma^2} \quad (39)$$

と計算でき、(11)式における $(1-g(c_0, c_0))P(c_0, c)$ を以下のように記述できる。

$$(1-g(c_0, c_0))P(c_0, c) = \frac{K_0 N}{1-\rho} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\gamma) \right)^{N-1} \cdot e^{-\gamma^2} \quad (40)$$

6 自己相関関数の導出

AR(1)モデルでは自己相関関数が(3)式の関係を満たした。以下に(38)式および(40)式の計算で必要となる TSP における自己相関関数の導出を示す。まず、2つのツアー t と t' を考える。この2つのツアーは AR(1)モデルに従ったとき、ランダムウォーク上で互いに1ステップでの移動の関係にある。また、 b をツアー t と t' で異なるエッジ数とする。AR(1) landscape 上において、

$$E[f(t)] = E[f(t')] = \mu \quad (41)$$

$$\operatorname{Var}(f(t)) = \operatorname{Var}(f(t')) = \sigma^2 \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \rho &= \rho(1) \\ &= \frac{E[(f(t) - \mu)(f(t') - \mu)]}{\sigma^2} \\ &= 1 - \frac{E[(f(t) - f(t'))^2]}{2\sigma^2} \\ &= 1 - \zeta \end{aligned} \quad (43)$$

が成立する。

$$\begin{aligned} \therefore E[(f(t) - f(t'))^2] &= E[(f(t) - \mu) + \mu - f(t')]^2 \\ &= E[(f(t) - \mu)^2] + E[(f(t') - \mu)^2] - 2E[(f(t) - \mu)(f(t') - \mu)] \\ &= 2\sigma^2 - 2E[(f(t) - \mu)(f(t') - \mu)] \end{aligned}$$

一方, ζ が十分に小さいとすると,

$$\begin{aligned}
 \lambda &= -\frac{1}{\log \rho} \\
 &= -\frac{1}{\log(1-\zeta)} \\
 &= \frac{1}{\zeta} \left(1 + \frac{\zeta}{2} + \frac{\zeta^2}{3} + \dots\right)^{-1} \\
 &\doteq \frac{1}{\zeta} \left(1 - \frac{\zeta}{2} + O(\zeta^2)\right) \\
 &= 1/\zeta + O(1) \\
 &= \frac{2\sigma^2}{E[(\underline{f}(t) - \underline{f}'(t))^2]} + O(1) \tag{44}
 \end{aligned}$$

となる。さらに, 2つのツアー t と t' を構成する辺の長さをそれぞれ c_k と c'_k とし, それらの独立性を考慮すれば,

$$\begin{aligned}
 E[(\underline{f}(t) - \underline{f}'(t))^2] &= E\left[\left(\sum_{k=1}^b (c_k - c'_k)\right)^2\right] \\
 &= \sum_{k=1}^b \sum_{l=1}^b E[(c_k - c'_k)(c_l - c'_l)^2] \\
 &= \sum_{k=1}^b E[(c_k - c'_k)^2] \\
 &= \sum_{k=1}^b \{E[(c_k - \mu_l)^2] - 2E[(c_k - \mu_l)(c'_k - \mu_l)] + E[(c'_k - \mu_l)^2]\} \\
 &= \sum_{k=1}^b 2\text{Var}(c_k) \\
 &= 2b\sigma_l^2 \tag{45}
 \end{aligned}$$

であるので, (44)式は次のように求まる。

$$\lambda = \frac{2\sigma^2}{2b\sigma_l^2} + O(1) = \frac{n}{b} + O(1) \tag{46}$$

したがって、

$$\begin{aligned}
 \rho &= e^{-\frac{1}{\lambda}} \\
 &= \exp\left(-\frac{1}{\left(\frac{n}{b} + O(1)\right)}\right) \\
 &= \exp\left(-\left(\frac{n}{b}\right)^{-1} \left(1 + \frac{b}{n} O(1)\right)^{-1}\right) \\
 &= \exp\left(-\left(\frac{n}{b}\right)^{-1} \left(1 - \frac{b}{n} O(1)\right)\right) \\
 &= \exp\left(-\left\{\frac{b}{n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right)\right\}\right) \tag{47}
 \end{aligned}$$

となる。

7 数値計算

本章では理論値である(12)式の最終解の密度と(13)式の局所解に達するのに必要なステップ数を数値的に求め理論値の特性を明らかにする。ここで、最終解の密度を計算するために必要な(11)式、および、(13)式などに含まれる積分計算は数値積分により求めていく必要がある。代表的な数値計算の技法はすでに多くのモジュールが存在しそれを利用すればよい。しかし、それぞれのモジュールにおいて一長一短があり、問題の性質に合わせ適用し、場合によってはモジュールの修正が必要になることが多々ある。数値計算法は過去の研究の多くの遺産が存在するが、その適用には、試行錯誤的な労力が要求されることが多い。特に、今回の問題の被積分関数は指数関数的な減衰性を示すなど数値積分的に扱うのが困難な関数である。本問題は離散的に各コストの確率密度を求めるため、(11)式においてそれぞれのコストに対して異なる下限値が要求される。それによって、数値積分の刻み点は変動するので、刻み点を固定せず計算できる方式が望ましい。そこで、今回の問題では台形則を基本とする計算法を用いるこ

ととする。まず、比較的精度が高い Simpson 則 [3] により検討を行った。これは3次の多項式まで厳密な解を与え、滑らかな関数などには有用である。しかし、本問題の被積分関数では刻み幅を縮小していく段階で、良好な解への収束が保証されなかった。今回扱う被積分関数が指数関数的な減衰性をもち、その関数の扱う範囲が極めて大であるところに起因する。そこで、より精度が高く、高次の数値積分が可能である Romberg 積分 [3] で対応することとした。その特徴として、大きな刻み幅で精度の高い値が算出できるところにある。ただし、被積分関数値が0に近い積分範囲における相対誤差判定基準などに修正を加え、本問題に適するようにした。また、積分範囲は実際には ∞ をとっているが、扱う被積分関数においてある下限以下、上限以上では無視してよい値であるので、積分の範囲をその下限と上限に設定して計算している。さらに、計算に柔軟性を持たせるために、中点則により刻み点を求めており、それにより良好な結果が得られている。また、今回の密度計算においては再帰計算による反復を用いており、一反復前の計算値を離散的な座標点で記憶しておかねばならない。そして、その関数値を基本として新たな積分計算に入る。ただし、その積分計算において変動する各刻み点において、被積分関数の値は記憶した各座標点でのデータをもとに補間法 [3] によって求めることとする。ここで用いた補間法は多項式近似による補間法を採用している。および、今回の数値計算における座標点は0.1刻みとして設定している。

以上より求めた理論値を計算した値を示したい。今回、対象としたグラフは頂点数10であり、グラフ $G(V, E)$ の各辺のコストを平均0、分散1の独立な確率変数 e_{ij} とみなすことによりグラフ構造を定義した。したがって、中心極限定理より、ツアーは平均0、分散10の正規分布をもつ。まず、図2に(13)式の局所解に達するのに必要なステップ数の確率密度を示す。これによると、ほぼ、10数回で Local Search により局所解に達するものと計算されている。また、図3には Local Search により得られた最終解の密度を(12)式より導出した。ここでは、図2より分かるようにほぼ20回のステップ数で局所解にほぼ1に近い確率で到達するので、(12)式における ∞ を20として計算した。それによると、

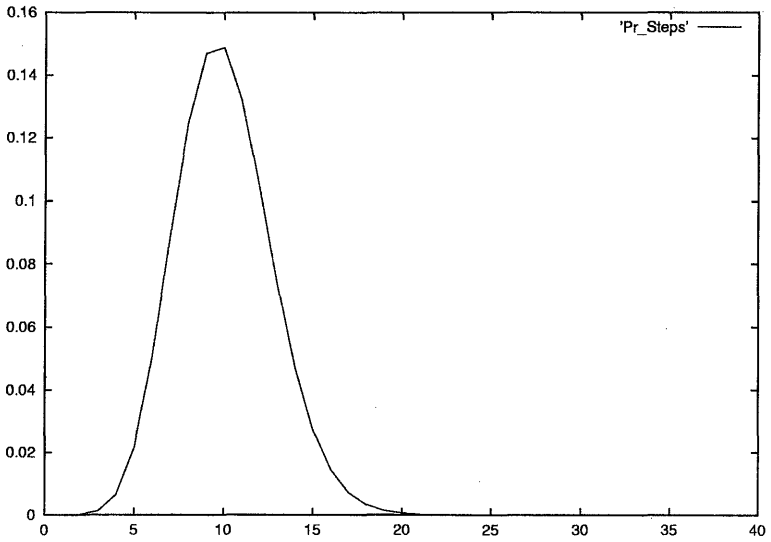


図2 ステップ数の理論的確率密度

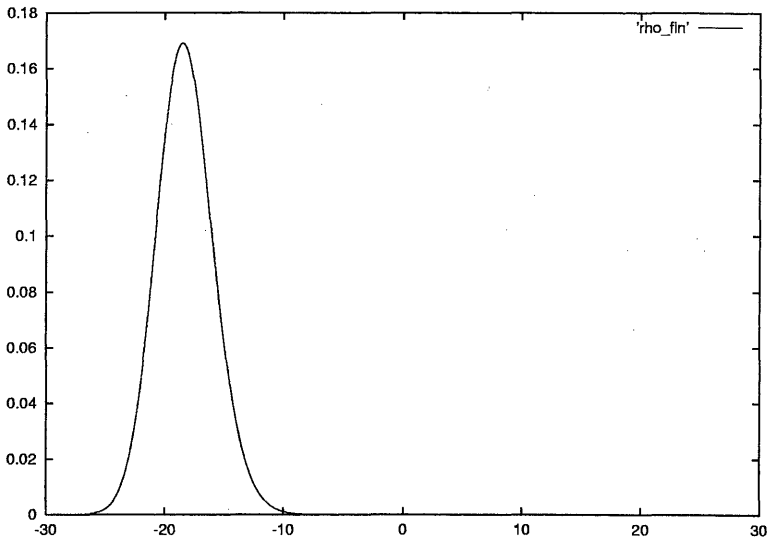


図3 最終解の理論的な局所解密度

-20前後のコスト値が平均してもとまる計算となった。

8 おわりに

本論文では Eikelder 等の限定された近傍構造のモデルによる理論的な分析に対して、通常の2-opt 近傍構造を AR(1) landscape の考えからモデル化しより現実に近い理論推定値を導出した。すなわち、TSP の構造を landscape 構造と考え、TSP の探索過程の実現値が時系列上の自己相関関数によって考察できることにより、Eikelder 等が近傍構造を限定しなければ求められなかったステップ確率の計算を可能にしている。ここで求めた値は、Local Search アルゴリズムで求まる解の値、および要求されるステップ数の理論的な期待値の値を検討している。それによりこのアルゴリズムの求めうる値の能力、また、必要な計算時間の予測が可能となり、今後、他のメタヒューリスティックアルゴリズムで同様な値を導出することにより、それらのアルゴリズムの性能を明確に分析することが可能となる。今回は理論的な値の導出のみを行ったが、さらに、Local Search アルゴリズムにより求まる実際の数値と今回求めた理論値とを比較し、この理論モデルの正当性を示したい。また、他のアルゴリズムの性能を明らかにするため、同様な理論値を求めるモデルを検討するとともに、これらにより得られた特性からさらに優れたアルゴリズムを展開することを試みたい。

参考文献

- [1] Karlin, S. and Taylor, H. M., A First Course in Stochastic Processes, Second Edition, Academic Press, 1975.
- [2] Osman, I. O. and Kelly, J. P. (ed.), Meta-Heuristics : Theory & Applications, Kluwer Academic Publishers, pp. 605-618, 1996.
- [3] Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A. and Vetterling, W. T., Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, 1988.
- [4] Stadler, P. F. and Schnabl, W., "The Landscape of the Traveling Salesman Problem", Physics Letters A, Vol. 161, Num. 4, pp. 337-344, 1992.
- [5] Weinberger, E., "Correlated and Uncorrelated Fitness Landscapes and How to Tell the Difference", Biological Cybernetics, Vol. 63, pp. 325-336, 1990.
- [6] 室田編, 離散構造とアルゴリズム 4, 近代科学社, 1995.