

組合せ最適化問題に対する 局所探索法の確率的解析モデル

加 地 太 一*

1 はじめに

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。そして、この問題は、一般に有効な時間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、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。そして、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。そのメタヒューリスティクスの枠組みの基本となるアルゴリズムとして、局所探索法 (Local Search, LS) [7] があり、このアルゴリズムは組合せ最適化問題の近似解を求めるための一つの代表的なツールでもある。

局所探索法 (および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。

局所探索法、およびメタヒューリスティクスの性能を評価するために、通常実験的解析がなされる。それには、よりリアルな情報を用いた解析を通してメ

*小樽商科大学商学部社会情報学科

タヒューリスティクスの性能を明らかにしていく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たい。

その理論的解析の一つとして、Eikelder等[2]による巡回セールスマン問題(Travelling Salesman Problem, TSP)に対する局所探索法の確率的解析の研究がある。ただし、Eikelder等の場合、2-opt近傍[7]の限定版モデルで構築しており汎用的な解析の利用は行えない。そこで、著者等は、AR(1)モデルを用いて、問題の近傍、および問題自身を選ぶことなく、局所探索法の重要なファクターである近傍を汎用的に解析する研究を行った[3]。その結果、近傍に関する良好な推定値をいくつかの事例で導出することが確認された。

本論文では、著者等による近傍構造の汎用的解析モデルを用いて、どの問題に対しても対応可能な局所探索法の確率的解析を目指す。具体的には、Eikelder等の確率的解析法をフレームワークとして、著者等の汎用的解析のモデルを組み込むことによりその解析が実現される。今回は、この近傍モデルにおいても微調整を加え、より精度の高い結果を目指したい。そして、この解析において、局所探索法により得られる解の値、および要求される反復数の推定値に基づきアルゴリズムの振る舞いを検討することが可能となる。

最後に、TSPに対して解析した結果を示し汎用性の確認を試みしてみる。この時、実用的な問題を対象として、より汎用性があることをここでは示したい。

2 巡回セールスマン問題

本論文では、組合せ最適化問題の代表的問題の一つである巡回セールスマン問題(Travelling Salesman Problem, TSP)を扱うこととする。その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わけである。ここで、都市

数を n とすれば、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計算機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、そこから各種の難しい問題にTSPで研究開発された手法が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。

そして、この問題は、グラフの辺 (i, j) を通過したらば1、そうでないならば0とする決定変数 x_{ij} を用いて、

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

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

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

$$2 \leq |K| \leq n-1$$

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

のような形式でTSPは定式化される。(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。また、(3)式で同様に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ている。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。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ている。

3 局所探索法

本論文では、局所探索法 (Local Search, LS) [7] を対象として確率的解析モデルを構築する。その局所探索法は最大の値を求める問題の場合、標高 (コスト関数) の高い位置へ移動する山登りに例えて考えることができる。現在の場所から限られた視野の範囲 (近傍) の中で、決して下がることなく、高いほうへ移動する。さらに移動した位置から、また、限られた視野の範囲の中で、高いほうと進んでいくことを繰り返し、もはや上れなくなった段階でその場所を答えとする方法である。この方法はアニーリング法、Tabu Searchなどのメタヒューリスティクスの基盤となるアルゴリズムであり、反復して解を改善していくメタヒューリスティクスの枠組みでもある。

さて、そのアルゴリズムの概要を考えていきたい。まず、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。近傍 $N(x)$ とは可能解 x に対して少し変更を加えることで得られる解の集合をいう。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するアルゴリズム

ムを局所探索法という。

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。

また、近傍 $N(x)$ の改善解は、一般に複数存在するので、どの解を次の解とするかについては、様々な戦略が可能である。本論文では、 $N(x)$ 内の解をすべて調べて最良解に移動する最良移動戦略を用いた局所探索法を対象とする。

4 AR(1)プロセスと確率的近傍構造モデル

本節では、著者等が提案した近傍の確率的モデルの導出に関して紹介する。この近傍モデルは、本論文で導出する局所探索法 (Local Search, LS) の解析に必要な情報を導くものである。まず、多くの組合せ最適化問題の解空間の構造がAR(1)プロセス (first order autoregressive process) [4] で支配されるという仮定 [6] を用いて解空間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、汎用的に構築可能な近傍モデルを提案する。

まず、組合せ最適化問題のすべての実行可能解 x の集合を X としよう。そして、与えられた解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。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。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) と呼ぶこととする。この評価値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) の系列を考える。

そして、この系列が時系列モデルの一つのタイプであるAR(1)プロセ

ス [4] [6], すなわち 1 次の自己回帰モデルとしてモデル化することが可能と考える。要するに, 組合せ最適化問題の評価値ランドスケープ上のランダムウォーク x_1, x_2, \dots, x_N は, AR(1)プロセスとして,

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

の再帰方程式で表すことが実現できる。ここで, F_t は解 x_t のコストを確率変数と考えたものである。また, t は評価値系列のステップを表す。この再帰的な性質が多く of 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に見られ, 統計的な性質を導き出すことが可能であろう [3] [6]。ただし, Δ は平均 0, 分散 σ_Δ^2 をもつ白色雑音で, 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。

また, 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 [4]。

そして, 定常過程の定義から,

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

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

が成立する。ただし, μ は解コストの平均 (アンサンブル平均) であり, 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いる [4]。この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

$$R(r) = Cov(F_t, F_{t+r}) = E[(F_t - \mu)(F_{t+r} - \mu)] \quad (10)$$

により定義すると、

$$Cov(F_i, F_j) = R(|i - j|) \quad (11)$$

であり、定常過程ではステップ差のみに依存する関数となる。また、もちろん

$$R(0) = Var(F_t) = \sigma^2 \quad (12)$$

である。そして、自己相関関数は

$$\rho(r) = \frac{Cov(F_t, F_{t+r})}{\sqrt{Var(F_t) Var(F_{t+r})}} \quad (13)$$

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

$$\hat{R}(r) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-r} (F_t - \bar{F}) \cdot (F_{t+r} - \bar{F}) \quad (14)$$

$$\hat{\rho}(r) = \hat{R}(r) / \hat{R}(0) \quad (15)$$

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 [4]。これらの見積もりによって、以後用いられる自己共分散値 $R(r)$ 、自己相関関数値 $\rho(r)$ が決定されるものとする。

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 ρ は、近傍解同士の共通する属性の比率が高いことから、近似的

に ρ に近い、かつ ρ 以下の定数と仮定する。そこで、

$$\nu = \rho^\xi \tag{16}$$

とし、 ρ の値から微妙に減衰した値を用いることとする。

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徴的な統計量が推定可能となり、以後で述べる近傍モデル構築に必要な基本統計量として活用できうるものとする。

次に、AR(1)モデルから得られる情報に基づき、複雑な近傍を表すモデルを構築する。そのモデルを構築するにあたり、解コストの同時分布にガウス性が伴う仮定を利用する。ちなみに、多くの組合せ最適化問題においてその解空間にガウス性が見られることが知られてもいる [6]。

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 は近傍解の個数である。以後、 F_0 を解 x_0 のコストの確率変数とすると、その近傍解コストの確率変数は F_1, \dots, F_b であり、それぞれがとる値は c_0, c_1, \dots, c_b で表す。ここで、任意の解 x_0 がコスト c_0 を持つときの解 x_0 の近傍の構造を確率的に考察する。すなわち、 $F_0 = c_0$ が与えられた条件のもとで、 (F_1, \dots, F_b) の条件付き多変量分布の確率密度関数 $h(c_1, \dots, c_b | c_0)$ を導出することによりその近傍の構造を明らかにしたい。このとき、 $\mathbf{X} = (F_1, \dots, F_b, F_0)$ の同時確率分布が多変量正規分布を示す ($\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$) と仮定したならば、 $h(c_1, \dots, c_b | c_0)$ は多変量正規分布 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ となることが言われている [5]。

この平均ベクトル \mathbf{m}' と共分散行列 Σ' を導き、分布の構造を特定する。そのために、同時確率分布 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ のモデルを詳細にしておく必要がある。まず、

$$\mathbf{X}_1 = {}^t(F_1, \dots, F_b), \quad \mathbf{X}_2 = (F_0) \tag{17}$$

とおく。そして、それに対応する平均ベクトルの各要素を

$$\mathbf{m}_1 = {}^t(m_1, \dots, m_b), \quad \mathbf{m}_2 = (m_0) \tag{18}$$

とする。また、 Σ_{11} 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、 Σ_{12} と $\Sigma_{21} = (r_{i0})$ は F_0 と $F_i, i=1, \dots, b$ との共分散を表すものとする。これらは、AR(1)モデルの特性から導き出した基礎的な統計量を用いて決定することが可能である。

以上の定義から、同時確率分布 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ のモデルの各要素である \mathbf{X} , \mathbf{m} , Σ は、

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{X}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{m}_2 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \tag{19}$$

とした分割形式で表される。

以上の前提の上で、 $h(c_1, \dots, c_b | c_0)$ の分布を導出し近傍の確率分布を特定したい。すなわち、 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ の仮定のもと、 \mathbf{X}_2 の要素が $F_0 = c_0$ として与えられた \mathbf{X}_1 の条件付き確率分布 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ の \mathbf{m}' と Σ' は

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m}_1 + \Sigma_{12} \Sigma_{22}^{-1} (c_0 - \mathbf{m}_2) = (\mathbf{m}'), \tag{20}$$

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

となることが知られている [5]。この平均ベクトル \mathbf{m}' と共分散行列 Σ' を導き、 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ をもって近傍構造モデルを特定する。

5 局所探索法の解析フレームワーク

局所探索法 (Local Search, LS) の確率的解析を行うために、Eikelderのモデルは用いることとする [2]。そこで、このフレームワークの概要を本節で説明する。

まず、この解析の計算に必要な重要な確率として以下のステップ確率が

ある。

$$g(c_0, c) = Pr \{ \forall i \in \{1, \dots, b\} F_i > c \mid F_0 = c_0 \}. \quad (22)$$

これは解 x_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。この確率によって局所探索法により得られる解の値、および要求される反復数などを確率的に解析することが可能となる。

さらに、このステップ確率 $g(c_0, c)$ を用いて、コスト c_0 の解からその近傍解コストの最小値であるコスト c の解へ移動する確率密度が、

$$P(c_0, c) = \frac{-\frac{\partial}{\partial c} g(c_0, c)}{1 - g(c_0, c_0)} \quad (23)$$

の式で導出される。

このステップ確率 $g(c_0, c)$ 、および $P(c_0, c)$ を用いて、 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たい。そこで、 $\rho_{k+1}(c)$ を、高々 $k+1$ 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。 $\eta_{k+1}(c)$ 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、すべての c に対して $\rho_0(c) = 0$ であり、 η_0 は平均、分散を(7)式、(8)式とするガウス分布の確率密度に対応する。

これらの密度関数は、

$$\rho_{k+1}(c) = \rho_k(c) + g(c, c) \eta_k(c) \quad (24)$$

$$\eta_{k+1}(c) = \int_c^\infty \eta_k(c_0) (1 - g(c_0, c_0)) P(c_0, c) dc_0 \quad (25)$$

の再帰式により計算される。

以上より、最終解の局所解密度が

$$\rho_{fin} = \lim_{k \rightarrow \infty} \rho_k \quad (26)$$

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、

$$Pr \{ \underline{steps} = k \} = \int_{-\infty}^{\infty} g(c, c) \eta_{k-1}(c) dc \tag{27}$$

となる。

6 局所探索法の確率的解析モデルの構築

Eikelderモデルを用いて局所探索法 (Local Search, LS) の確率的解析を行うための問題は、ステップ確率(22)式を導出することに帰着される。ステップ確率が計算できれば、結果として(23)式から(27)式までの計算が可能となり、局所探索法により得られる解の値、および要求される反復数の推定がおこなえる。

しかし、Eikelder等は、2-opt近傍の限定版モデルでこのステップ確率を構築しており、様々な近傍、各種の問題に対してステップ確率を導出できるわけではない。そこで、本論文では、問題の近傍、および問題自身を選ぶことなく汎用的に対応可能な前述のAR(1)プロセスを用いた著者等による近傍モデル [3] を用いて、このステップ確率(22)式を導出する。そして、様々な問題に対応可能な局所探索法の解析モデルを構築するものである。

汎用的な近傍確率モデルは、AR(1)プロセスからの基本統計量を用いて導出した近傍の確率密度関数であり、(20)式と(21)式をパラメータとする多変量正規分布 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ となる。この $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ に対応する確率密度関数 $h(c_1, \dots, c_b | c_0)$ を用いて、

$$g(c_0, c) = \int_c^{\infty} \cdots \int_c^{\infty} h(c_1, \dots, c_b | c_0) dc_1 \cdots dc_b \tag{28}$$

とすればステップ確率が導出される。かつ、この汎用的な近傍モデルを用いることにより、特定の問題、特定の近傍に限定することなくステップ確率が計算される。

しかし、(28)式の多重積分の計算は数値計算的にも容易でない。そこで、多次元変数を単一化して一重積分に簡単化したステップ確率の導出を示しておく。まず、Tongの定理 (Theorem 3.3.3) [5] を用いることにより、近傍を表

す b 変量確率ベクトル $\tilde{\mathbf{X}} = (\tilde{F}_1, \dots, \tilde{F}_b) \sim \mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ を独立した $b+1$ 変量標準正規分布を表わす確率ベクトル $\mathbf{Y} = (y_0, y_1, \dots, y_b) \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_{b+1})$ で構成できる。すなわち, $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{C}\mathbf{Y} + \mathbf{m}'$ で変換できる。ただし, \mathbf{C} は $b \times (b+1)$ の行列

$$\mathbf{C} = \alpha \begin{bmatrix} \beta & 1 & 0 \\ \vdots & & \ddots \\ \beta & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (29)$$

であり, ここで,

$$\alpha = \sigma\sqrt{1-\nu} \quad (30)$$

$$\beta = \sqrt{(\nu - \rho^2)/(1-\nu)} \quad (31)$$

であるものとする。

この $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{C}\mathbf{Y} + \mathbf{m}'$ と \mathbf{Y} の独立した標準正規分布性からステップ確率(28)式を

$$\begin{aligned} g(c_0, c) &= Pr\{\forall i \in [1, \dots, b] \tilde{F}_i > c\} = Pr\{\forall i \in [1, \dots, b] y_i > -\beta y_0 + (c - m')/\alpha\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} Pr\{\forall i \in [1, \dots, b] y_i > -\beta y_0 + (c - m')/\alpha \mid y_0 = s\} Pr\{y_0 = s\} ds \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) Pr\{\forall i \in [1, \dots, b] y_i > -\beta s + (c - m')/\alpha\} ds \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\beta s + (c - m')/\alpha}^{\infty} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt\right)^b ds \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \left(\frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(-\frac{\beta}{\sqrt{2}}s + \frac{1}{\alpha\sqrt{2}}(c - m')\right)\right)^b ds \end{aligned} \quad (32)$$

と導出することができる。

また, (23)式は

$$\begin{aligned} P(c_0, c) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}(1-g(c_0, c_0))} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{s^2}{2}} \\ &\quad \cdot \frac{b}{\sigma\sqrt{(2-2\nu)\pi}} \left(\frac{\operatorname{erfc}(u)}{2}\right)^{b-1} e^{-u^2} ds \end{aligned} \quad (33)$$

と計算される。ただし,

$$u = -s \sqrt{\frac{\nu - \rho^2}{2 - 2\nu}} + \frac{1}{\sigma \sqrt{2 - 2\nu}} (c - \rho c_0 + (\rho - 1)\mu) \quad (34)$$

である。ここで、パラメータとなる解コストの平均 μ と標準偏差 σ が解空間の特徴を表す値となり、 b が近傍の大きさ、そして、解 x_0 のコストとその近傍解コストとの相関係数 ρ と近傍解コスト同士の相関係数 ν が解空間上における近傍構造の特徴を表す値に対応する。

以上より、ステップ確率(22)式が数値計算的に計算可能となる。あわせて、必要な値である(23)式も求まる。それらの値が導出できることにより、(24)式から(27)式まで順次計算でき、汎用的に利用可能な局所探索法の確率的解析が可能となる。

7 数値実験

前節では、AR(1)プロセスを利用した近傍構造モデルにより、局所探索法 (Local Search, LS) の汎用的確率的解析について論じた。本節では、その解析モデルからも求まる推定値の実験的検証を試みる。ここでは、巡回セールスマン問題 (Travelling Salesman Problem, TSP) での実用性の高い問題の一例を取り上げ、汎用性に対する検証の一つとしてみたい。すなわち、解空間においてガウス性の強い問題を実験として対象とするのではなく、実用性の高い問題を取り上げることにより、広く組合せ最適化問題で対応可能なことを示していきたい。

具体的には、重要な仮定の一つである解空間がAR(1)プロセスに従っているかを示すため、自己相関関数の振る舞いを確認してみる。そして、提案された確率的解析モデルの検証を行うため、局所探索法により求まる解のコスト、要求されるステップ数の推定に関する実験を行う。

この数値実験で使用する計算環境は、CPUがXeon W3670 3.2 GHz, OSとし

てLinux, アルゴリズムの実装にはC, C++を採用している。ベンチマーク問題は、実用性の高い問題としてTSPLIBのベンチマーク問題であるeil101.tspを取り上げる [1]。また、今回採用する近傍は2-opt [7] を用いることとする。

まず、解空間上の評価値系列の特徴を確認しておきたい。すなわち、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。すなわち、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てモデルとして採用できるかを確認したい。

近傍として2-optを定義し、その近傍に基づきランダム移動を行い評価値系列データを生成する。このeil101.tspに対する評価値系列データの自己相関関数を示したのが図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(5)式により計算した自己相関関数の変化である。すなわち、この問題の評価値系列における自己相関関数の値の変化が示される。このときの評価値系列のサンプルパスの長さ、すなわち(4)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、対象問題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よいであろう。そして、組合せ最適化問題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考えて良いであろう。

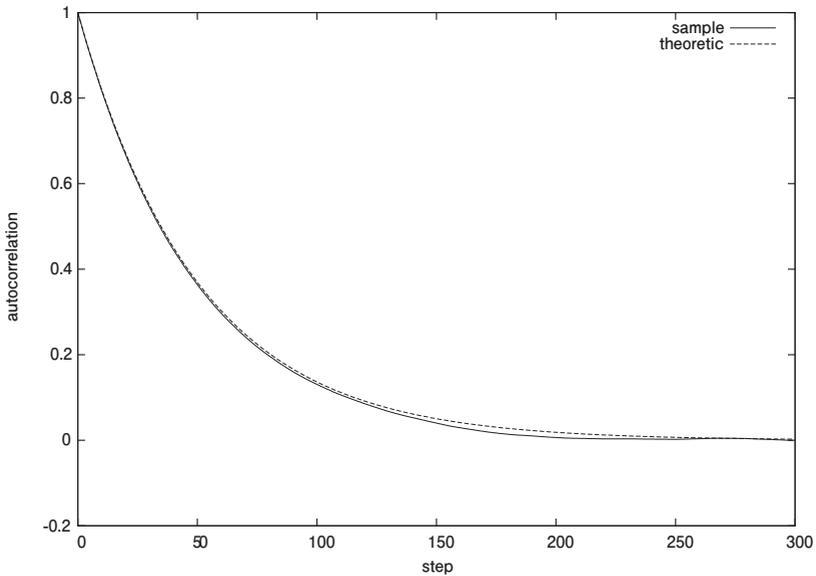


図 1：自己相関関数の振る舞い

次に、このAR(1)プロセスの仮定の上で、局所探索法に対する確率的解析の実験について示していきたい。局所探索法に対する性能評価では、どのくらいの質のよい解を求めることができるか、解を求めるためにどのくらいの時間が必要かという2点が重要な評価点となる。そこで、今回はその性能を理論的に解析するため、確率的モデルを構築し、求まる解の値、要するステップ数を推定する。

求まる解の値、要するステップ数の推定は、最終的には(26)式、および(27)式で求まるが、近傍構造モデルから導出された各々の値、すなわち、 μ , σ , ρ , ν の結果から導き出された値であることは言うまでもない。ちなみに、eil101.tspにおいて、 $\mu=3400.0$, $\sigma=138.0$, $\rho=0.98$ となる。また、(16)式の ξ を1.22とすることにより $\nu=0.9756$ として計算を行う。そして、近傍の大きさ b の値は頂点数を n とすれば2-opt近傍で $n \cdot (n-3)/2$ となる。

図2は、(26)式によって求まった局所探索法により求まる解のコストの確率

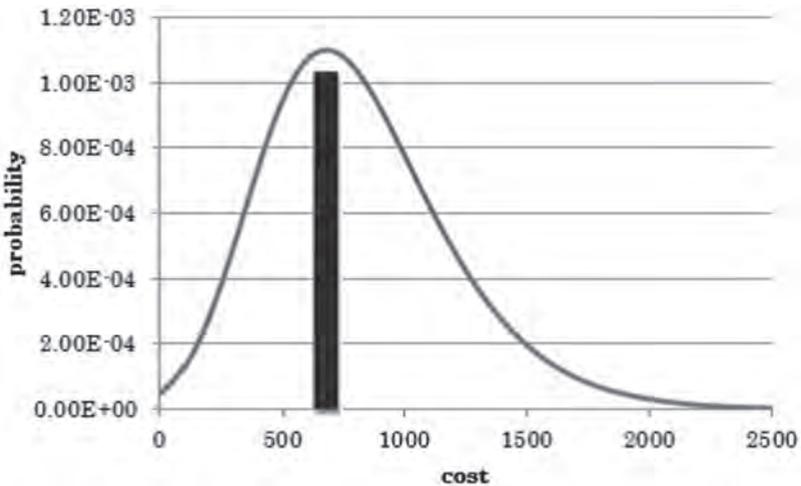


図2：求まる解の確率分布

分布を表している。横軸が、eil101.tspに対して局所探索法が求め得る解のコストに対応し、縦軸がそのコストを得るであろう確率密度を示している。また、縦棒は、実際に、eil101.tspの問題を局所探索法で1000回解いてみた結果を示している。この結果より、本論文での確率解析において、局所探索法により得られる解の値は十分信頼のおける推定ができるものと言えるであろう。

図3は、(27)式で求まる局所探索法での要求されるステップ数の確率分布である。同様に、横軸が、eil101.tspに対して局所探索法が要求するステップ数に対応し、縦軸がその要求するステップ数の確率密度に対応することとなる。縦棒は、実際に、eil101.tspに対して局所探索法を1000回解いてみた場合、必要としたステップ数を示す。このステップ数の解析における結果は、実際の値が確率分布とずれ、実際の要するステップ数がより多く必要となる結果となった。しかし、他の実験でも同様な結果を示し、要するステップ数の大まかな傾向は捉えられるものである。

以上、本論文で提案する確率的解析モデルは、特に、求まる解の値に関しては精度の高い結果が得られるものとなった。また、要するステップ数において

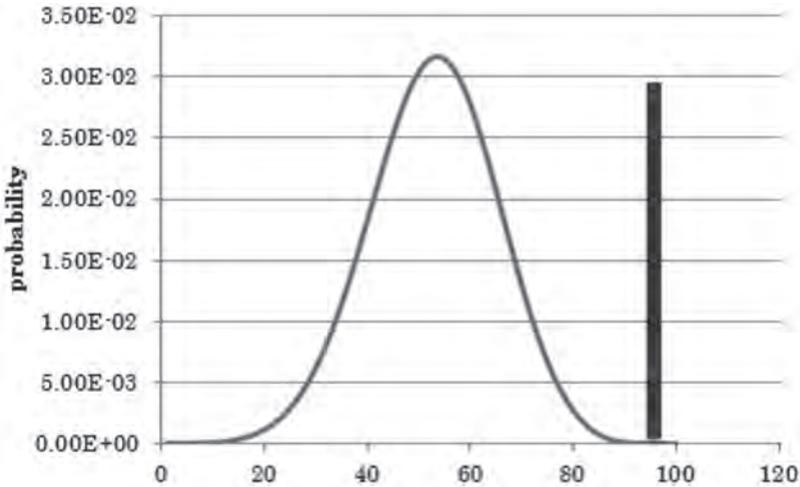


図3：要するステップ数の確率分布

は、大枠を捉える解析能力を秘めるものであると言える。これらの結果から、本論文で紹介した汎用的近傍構造モデルを利用した確率的解析モデルは、問題を選ぶことなく解析できる可能性をもつアプローチであると考えられる。

8 おわりに

局所探索法、およびそれを枠組みとするメタヒューリスティクスに対する解析手法として、実験的解析、理論的解析があり、より実用的な立場から実験的解析が主流となっている。しかし、実験的解析には多くの自由度が存在し、その解析の基準が整わない一因となっている。また、メタヒューリスティクス手法において、とにかく実験したならば良い結果が出てきたというレベルで終わらせるのでは、今後のメタヒューリスティクス手法の発展は疑わしいであろう。そこで、なぜ、メタヒューリスティクス手法は良い結果を導くのかを解明し、多くの特性、性質などを明らかにするため、理論的解析からのアプローチも欠かせないものとする。本論文は、確率的解析の欠点でもある限定されるモデ

ルに対して、より汎用的に利用できるための考え方を示して今後の展開へのつながりとなることを期待するものである。

本論文では、AR(1)プロセスの仮定を用いた著者等による近傍構造の汎用的解析モデルを用い、どの問題に対しても対応可能な局所探索法の確率的解析モデルを構築した。具体的には、Eikelder等の確率的解析法をフレームワークとして、著者等の汎用的解析のモデルを組み込むことによりその解析が実現される。

結果として、今回取り扱った実際的な問題に対するランドスケープでは、仮定とするAR(1)プロセスの傾向が認められ、基盤となる近傍モデルの有効性が示されるものとする。そして、提案する確率的解析モデルを用い、局所探索法により得られる解の値、および要求されるステップ数の推定値に基づきアルゴリズムの振る舞いを検討した結果、得られる解の値に関しては精度の高い結果が得られ、要するステップ数に関しては大枠を捉える解析能力があることが判明した。以上から、汎用的近傍構造モデルによる確率的解析モデルは、局所探索法に対して十分汎用的な確率的解析モデルとして提案できるものである。

今後は、さらに様々な近傍、問題に対して実験を行い、よりこの確率的解析モデルの汎用性を示していきたい。また、要するステップ数の推定の精度を上げるため、モデルの問題点、改良を追求し、より汎用性の高い解析モデルの構築を目指したい。

参考文献

- [1] 相吉英太郎, 安田恵一郎: メタヒューリスティクスと応用, オーム社 (2007).
- [2] Eikelder, H. M. M., Verhoeven, M. G. A., Vossen, T. W. M. and Aarts, E. H. L.: A Probabilistic Analysis of Local Search, In Osman, I. H. and Kelly, J. P. (ed.): Meta-Heuristics: Theory & Applications, Kluwer, pp. 605-618 (1996).
- [3] 加地太一: AR(1)モデルによる組合せ最適化問題の近傍に対する解析, 日本OR学会論文誌, **51**, pp.112-135 (2008).
- [4] Priestley, M. B.: Spectral Analysis and Time Series, Academic Press (1981).
- [5] Tong, Y. L.: The Multivariate Normal Distribution, Springer-Verlag (1990).
- [6] Weinberger, E.: Correlated and Uncorrelated Fitness Landscapes and How to Tell the Difference, Biological Cybernetics, **63**, pp.325-336 (1990).
- [7] 柳浦陸憲, 茨木俊秀: 組合せ最適化, 朝倉書店 (2001).