

近傍解の評価値の改善量の期待値に基づく 近傍探索法

重 弘 裕 二^{†1} 増 田 達 也^{†1}

本稿では、遺伝的アルゴリズムにおける交叉のような操作を用いず、近傍操作のみを用いて、大規模な組合せ最適化問題に対して効率良く解探索を行う方法を、確率論的観点から考察する。その元となる発想は以下の通り。1) 単位近傍操作の反復からなる多数の近傍操作を解に適用する。2) 近傍操作により得られる解の評価値の確率分布を推定する。3) 最良解の評価値の改善量の期待値を最大化する近傍操作を選択する。これらの発想と確率論の基礎から、解探索のための手法が導かれる。また、巡回セールスマン問題に対する計算機実験により、提案する手法の正当性が確認される。

A Neighborhood Search Method Based on the Expectation of the Amount of Improvement of Neighborhood Solution

YUJI SHIGEHIRO ^{†1} and TATSUYA MASUDA ^{†1}

In this paper we consider, from the point of view of probability theory, an effective search method for large combinatorial optimization problems, only by means of neighborhood operations, not by means of such operation as crossover in genetic algorithm. The fundamental idea on which our method is based is the following: 1) Many different neighborhood operations, which consist of iterations of unit neighborhood operations, are applied to solutions. 2) The probability distribution of evaluation value of the neighborhood solution is estimated. 3) The neighborhood operation, which maximizes the expectation of the amount of improvement of the best solution at each step, is selected to be applied. From these ideas and fundamentals of the probability theory, a method for searching solutions is deduced. The correctness of the proposed method is confirmed by computational experiments with a traveling salesman problem.

1. はじめに

本稿では、近傍操作のみを用いて、大規模な組合せ最適化問題に対して効率良く解探索を行う方法を、確率論的観点から検討する。近傍操作により得られる解の評価値の確率分布や、最良解の評価値の改善量の期待値について考察して、解探索手法を構成する。

2. 問題の定式化

解の集合（実行可能領域） F と、解から実数値への写像（目的関数） $f: F \rightarrow R$ が与えられたとき（ここで R は実数全体の集合を表す）、 F に含まれる解 $s \in F$ の中で、 f により対応付けられる値 $f(s)$ を最小化するようなものを探索するという問題（最適化問題）について考える。 $f(s)$ を求めることを評価と呼び、 $f(s)$ を s の評価値と呼ぶ。ここでは特に、解が離散値を含む配列、順列、組合せ、グラフ、ネットワークのようなデータ構造、もしくはそれらの合成により表現されるような問題（組合せ最適化問題）について考える。なお、解の探索に要する時間計算量は、解の評価回数を基準に判断されることが多く、ここでもそれに従う。

近傍操作¹⁾とは、ある解 s を元にして別の解 s' を生成する操作である。ここでは具体的に、あらかじめ定められた手続きに従って、解 s を表現するデータ構造の構成要素の一部に変更を加え、その変更結果が表現する解を s' と考える。また、解 s に近傍操作を適用して生成された解 s' は、 s の近傍解と呼ばれる。例えば、解が順列で表現されている場合、定められた確率に従って順列中から 2 つの要素を選び、それらを入れ替えるという近傍操作が考えられる。このように、以下では、ある解に近傍操作を適用すると、近傍操作の手続きによって定まる確率に従って、さまざまな近傍解が得られるものと考えられる。

解 s に近傍操作を適用した結果、すなわち s を表現するデータ構造の構成要素に変更を加えた結果、より評価値の小さな近傍解 s' が得られたとする。探索の目標が解の評価値の最小化であることを考えると、このとき近傍操作は、 s に変更を加えることによって s をより目標に近づけた、すなわち s を改善したと考えることができる。この改善の量は評価値の差 $f(s) - f(s')$ で表されるが、これを近傍解改善量と呼ぶ（近傍解 s' の評価値の方がより小さくない場合は値が非正となるが、この場合も $f(s) - f(s')$ を近傍解改善量と呼ぶ

^{†1} 大阪工業大学
Osaka Institute of Technology

ことにする。) 解 s に近傍操作を適用して得られる近傍解は確率的に定まるので、近傍解改善量の値も確率的に定まる。すなわち近傍解改善量は確率変数^{2),3)}である。

以下では、未知の近傍解改善量の確率分布を推定するために、以下の仮定を設ける。

仮定 1 任意の解 s とその近傍解 s' の近傍解改善量の平均は(ほぼ)等しい。同様に分散も(ほぼ)等しい。従って、 s' とその近傍解 s'' の近傍解改善量の平均や分散も(ほぼ)等しく、 s と s'' の近傍解改善量の平均や分散も(ほぼ)等しい。 s'' の近傍解を s''' 、 s''' の近傍解を s'''' 、... とするとき、 s'''' 、 s'''' 、... の近傍解改善量の平均や分散も s のそれと(ほぼ)等しい。

さらに、確率計算の容易化のため以下の仮定を設ける。

仮定 2 解の近傍解改善量は正規分布に従う。

また、解に関して可能な手続きを以下に限定する。

ランダム解を生成 解を表現するデータ構造の構成要素をランダムに設定することにより、新たな解を生成する。

近傍操作を適用 与えられた解に近傍操作を適用し、新たな解を生成する。

評価 与えられた解を評価し、評価値を得る。

この前提の中では、解の探索とは、これら 3 つの手続きを順序良く実行することである。また、解の探索について考えるということは、順次

- 「どの手続き」を行えば良いか、
- (解を対象とする手続きの場合はさらに)「どの解」を対象として行えば良いか

について、近傍解改善量の確率分布に基づいて決定する方法を考えるということである。

3. 提案手法

3.1 概要

本研究の目的は、前述した前提の下、定められた評価回数の中で、より評価値の小さな解を探索する方法を導き出すことであるが、その最初の段階として本稿では、図 1 に示すような局所探索法(もしくは温度 $\rightarrow 0$ とした Simulated Annealing 法¹⁾)の枠組みに沿って考察を進めるものとする。例えば複数の解を保持する⁴⁾ こと等に関する考察は今後の課題としたい。具体的には、局所探索法に倣って

- ランダム解を生成するのは最初に 1 度だけとする。
- 既に評価を行った解に対しては、その時点で評価値が最小の解を除き、近傍操作を適用しない。

局所探索法(評価回数は n)

- 1: $s_1 \leftarrow$ (ランダム解を生成); $v_1 \leftarrow$ (s_1 を評価)
- 2: $i = 1, 2, \dots, n-1$ に対して
- 3: $s'_i \leftarrow$ (s_i に近傍操作を適用); $v'_i \leftarrow$ (s'_i を評価)
- 4: $v'_i \leq v_i$ のとき $\{ s_{i+1} = s'_i; v_{i+1} = v'_i \}$
- 5: そうでないとき $\{ s_{i+1} = s_i; v_{i+1} = v_i \}$
- 6: s_n を探索結果とする

図 1 提案する手法で基礎とする局所探索法

Fig. 1 Local search method on which our method is based.

という制約を考える。すると、検討の余地があるのは、連続して近傍操作を適用する(近傍操作を適用した結果得られた解に対して、評価を行わずに、さらに近傍操作を適用する)ことであろう。

そこで本稿では、単位となる近傍操作が与えられるものとし、その近傍操作を複数回繰り返す操作全体を近傍操作と考え、局所探索法の枠組みに沿って解の探索を行う方法について考察する。以後、混乱を避けるため、単位となる近傍操作を単位近傍操作と呼び、単に近傍操作と記述した場合は単位近傍操作を複数回(1 回以上)繰り返す操作を指すものとする。局所探索法において近傍操作を適用するとき、毎回、異なる近傍操作(異なる回数の単位近傍操作の繰り返しからなる操作)を適用できるものとし、以下では、適用する近傍操作を選ぶ方法(近傍操作を構成する単位近傍操作の繰り返し回数を決める方法)について考える。

3.2 単位近傍操作の繰り返しからなる近傍操作

単位近傍操作を N で表し、解 s に N を適用して得られた解を $N \cdot s$ で表す。さらに、解 s に N を 2 回連続して適用した結果得られた解(s の近傍解 $(N \cdot s)$ に対してさらに N を適用して得られた解)を $N \cdot (N \cdot s) = (NN) \cdot s = N^2 \cdot s$ のように表し、「2 回連続して近傍操作を適用する」という操作を N^2 で表す。同様に「 n 回連続して近傍操作を適用する」という操作を N^n で表す。便宜的に、 N^0 は何もしないという操作を表すものとする(すなわち $N^0 \cdot s = s$ である)。

前述のように、近傍解改善量は確率変数である。ここでは、 n 回の単位近傍操作の繰り返しからなる近傍操作 N^n を適用したときの近傍解改善量の平均と分散について考える。解 s_0 に近傍操作 N^n を適用して得られた解を t とし、その近傍操作における n 回の単位近傍操作それぞれの適用ごとに得られた解を s_i とすると、 $i = 1, 2, \dots, n$ に対して

$$s_i = N \cdot s_{i-1}$$

$$t = s_n$$

である。また、その近傍操作 N^n を適用したときに近傍解改善量 Y が得られたとし、その近傍操作における n 回の単位近傍操作それぞれの適用ごとに近傍解改善量 X_i が得られたとすると、 $i = 1, 2, \dots, n$ に対して

$$X_i = f(s_{i-1}) - f(s_i)$$

$$Y = f(s_0) - f(t)$$

である。

以下、確率変数の期待値を $E[\]$ により表す。仮定 1 より X_i ($i = 1, 2, \dots, n$) の平均や分散が全て等しいとし、それぞれ

$$\mu = E[X_i]$$

$$\sigma^2 = E[(X_i - \mu)^2]$$

とする。 Y は X_i により

$$Y = f(s_0) - f(t) = f(s_0) - f(s_n) = \sum_{i=1}^n \{f(s_{i-1}) - f(s_i)\} = \sum_{i=1}^n X_i$$

と表されるが、 X_i^2 の期待値は

$$\begin{aligned} E[X_i^2] &= E[\{\mu + (X_i - \mu)\}^2] = E[\mu^2] + E[2\mu \cdot (X_i - \mu)] + E[(X_i - \mu)^2] \\ &= \mu^2 + (2\mu \cdot E[X_i] - 2\mu^2) + \sigma^2 = \mu^2 + \sigma^2 \end{aligned}$$

であり、また、異なる X_i, X_j には相関がないので、 $i \neq j$ に対して

$$E[X_i \cdot X_j] = E[X_i] \cdot E[X_j] = \mu^2$$

であることを考え合わせると、 Y の平均と分散は、それぞれ

$$E[Y] = E\left[\sum_{i=1}^n X_i\right] = \sum_{i=1}^n E[X_i] = n\mu$$

$$\begin{aligned} E[(Y - n\mu)^2] &= E\left[\left\{\left(\sum_{i=1}^n X_i\right) - n\mu\right\}^2\right] \\ &= E\left[\left(\sum_{i=1}^n X_i\right)^2\right] - 2 \cdot E\left[\sum_{i=1}^n X_i\right] \cdot (n\mu) + (n\mu)^2 \\ &= (n^2\mu^2 + n\sigma^2) - 2n^2\mu^2 + n^2\mu^2 = n\sigma^2 \end{aligned}$$

となる。すなわち、 n 回の単位近傍操作の繰り返しからなる近傍操作 N^n を適用したときの近傍解改善量の平均や分散はそれぞれ、単位近傍操作 N を適用したときの近傍解改善量の平均や分散の n 倍となる。

3.3 近傍解改善量の平均や分散の推定

近傍操作 N^n を適用したときの近傍解改善量の平均や分散は、単位近傍操作 N を適用したときの近傍解改善量の平均や分散から、前述のよう推定できる。ここでは、解探索の過程において得られる情報のみから（余分な解の評価を行うことなく）、それらを推定する方法について考える。

提案する探索法では「あらかじめ評価値のわかっている解に近傍操作を適用し、得られた近傍解を評価する」ことを繰り返すため、そのたびに、解の評価値の差を求めれば、近傍解改善量の観測値を得ることができる。そのようなして、 n 回の近傍操作の適用から、 n 個の近傍解改善量 Y_i ($i = 1, 2, \dots, n$) が得られたとする。また、その n 回のうちの i 回目の近傍操作は n_i 回の単位近傍操作の繰り返し $N^{(n_i)}$ であったとする。さらに、その n_i 回の単位近傍操作のうちの j 回目 ($j = 1, 2, \dots, n_i$) が適用されたときの近傍解改善量を i と j の組 (i, j) を用いて $X_{(i,j)}$ と表す。提案する探索法において現れる解は全て、最初の解から単位近傍操作を繰り返して得られる解であるので、仮定 1 より全ての $X_{(i,j)}$ ($i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, n_i$) の平均や分散は等しいとし、それぞれ、前節同様に

$$\mu = E[X_{(i,j)}]$$

$$\sigma^2 = E[(X_{(i,j)} - \mu)^2]$$

とする。前節のように

$$Y_i = \sum_{j=1}^{n_i} X_{(i,j)}$$

であるので、 Y_i や Y_i^2 の期待値は、前節同様の考察から

$$E[Y_i] = n_i \mu$$

$$E[Y_i^2] = E\left[\left(\sum_{j=1}^{n_i} X_{(i,j)}\right)^2\right] = n_i^2 \mu^2 + n_i \sigma^2$$

とわかる。

さて、提案する探索法において近傍操作を適用するたびに、 n_i と Y_i の値、およびそれらの 2 乗の値を積算し、それらの総和

$$s_{n1} = \sum_{i=1}^n n_i, \quad s_{n2} = \sum_{i=1}^n n_i^2, \quad S_{Y1} = \sum_{i=1}^n Y_i, \quad S_{Y2} = \sum_{i=1}^n Y_i^2$$

を求めたとする。 S_{Y1} と S_{Y2} は確率変数であり、その期待値は

$$E[S_{Y1}] = E\left[\sum_{i=1}^n Y_i\right] = \sum_{i=1}^n E[Y_i] = \sum_{i=1}^n (n_i \mu) = \left(\sum_{i=1}^n n_i\right) \cdot \mu = s_{n1} \cdot \mu$$

$$E[S_{Y2}] = E\left[\sum_{i=1}^n Y_i^2\right] = \sum_{i=1}^n (n_i^2 \mu^2 + n_i \sigma^2) = s_{n2} \cdot \mu^2 + s_{n1} \cdot \sigma^2$$

となる。また

$$S_{Y1} = \sum_{i=1}^n Y_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{n_i} X_{(i,j)}$$

であり、すなわち S_{Y1} は s_{n1} 個の異なる $X_{(i,j)}$ の総和であるから、 S_{Y1}^2 の期待値は

$$E[S_{Y1}^2] = E\left[\left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{n_i} X_{(i,j)}\right)^2\right] = s_{n1}^2 \cdot \mu^2 + s_{n1} \cdot \sigma^2$$

となる。従って、これらの式を連立させて解くと、 s_{n1} 、 s_{n2} 、 $E[S_{Y1}]$ 、 $E[S_{Y2}]$ 、 $E[S_{Y1}^2]$ から μ や σ^2 の値を求めることができる。その結果に基づき、ここで M と T を

$$M = \frac{S_{Y1}}{s_{n1}}$$

$$T = \frac{s_{n1}^2 \cdot S_{Y2} - s_{n2} \cdot S_{Y1}^2}{s_{n1}^3 - s_{n1} \cdot s_{n2}}$$

と定義すると、それらの期待値は

$$E[M] = E\left[\frac{S_{Y1}}{s_{n1}}\right] = \frac{E[S_{Y1}]}{s_{n1}} = \frac{s_{n1} \cdot \mu}{s_{n1}} = \mu$$

$$E[T] = E\left[\frac{s_{n1}^2 \cdot S_{Y2} - s_{n2} \cdot S_{Y1}^2}{s_{n1}^3 - s_{n1} \cdot s_{n2}}\right] = \frac{s_{n1}^2 \cdot E[S_{Y2}] - s_{n2} \cdot E[S_{Y1}^2]}{s_{n1}^3 - s_{n1} \cdot s_{n2}} = \sigma^2$$

である。すなわち M は μ の、 T は σ^2 の不変推定量である。従って、これらは推定量としての規範³⁾の一つを満たしており、この M と T をそれぞれ μ と σ^2 の推定量として用いることができる。

3.4 平均や分散が変化する場合の推定

探索の過程とともに平均や分散の値が徐々に変化していく可能性を考えると、パラメータ r ($0 < r < 1$) を用いて

$$S_{Y1} = Y_n + r \cdot Y_{n-1} + r^2 \cdot Y_{n-2} + r^3 \cdot Y_{n-3} + \dots = \sum_{i=1}^n \{r^{(n-i)} \cdot Y_i\}$$

のように、新しく Y_i 等の値が得られるたびに、それ以前の値の影響を少しずつ減少させるものとしたい。この場合

$$\begin{cases} s_{n1} = \sum_{i=1}^n \{r^{(n-i)} \cdot n_i\}, & s_{n2} = \sum_{i=1}^n \{r^{(n-i)} \cdot n_i^2\} \\ s_{n3} = \sum_{i=1}^n \{r^{2(n-i)} \cdot n_i\} \\ S_{Y1} = \sum_{i=1}^n \{r^{(n-i)} \cdot Y_i\}, & S_{Y2} = \sum_{i=1}^n \{r^{(n-i)} \cdot Y_i^2\} \end{cases} \quad (1)$$

に対して

$$E[S_{Y1}] = \sum_{i=1}^n \{r^{(n-i)} \cdot E[Y_i]\} = \sum_{i=1}^n \{r^{(n-i)} \cdot n_i \mu\} = s_{n1} \cdot \mu$$

$$E[S_{Y2}] = \sum_{i=1}^n \{r^{(n-i)} \cdot (n_i^2 \mu^2 + n_i \sigma^2)\} = s_{n2} \cdot \mu^2 + s_{n1} \cdot \sigma^2$$

$$E[S_{Y1}^2] = E\left[\left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{n_i} \{r^{(n-i)} \cdot X_{(i,j)}\}\right)^2\right] = s_{n1}^2 \cdot \mu^2 + s_{n3} \cdot \sigma^2$$

となるので、

$$M = \frac{S_{Y1}}{s_{n1}} \quad (2)$$

$$T = \frac{s_{n1}^2 \cdot S_{Y2} - s_{n2} \cdot S_{Y1}^2}{s_{n1}^3 - s_{n2} \cdot s_{n3}} \quad (3)$$

とすれば、この M と T をそれぞれ μ と σ^2 の推定量として用いることができる。

3.5 最良解改善量の期待値

ここまで述べてきたように、解探索の過程において、単位近傍操作 N を適用したときの近傍解改善量の平均や分散を推定することができ、さらにそれらから、近傍操作 N^n を適用したときの近傍解改善量の平均や分散をも推定することができる。ここでは、それらの推定量に基づき、近傍操作 N^n ($n = 1, 2, \dots$) の優劣を評価する基準について考える。

探索の過程において、その時点で評価値が最小の解を暫定最良解⁴⁾と呼ぶ。ある解 s に近傍操作を適用した結果、それ以前の暫定最良解 s_b より評価値の小さな近傍解 s_b' が得られ、新たにその s_b' が暫定最良解になったとする。このとき、探索の手続きが暫定最良解を改善したと考え、この改善の量 $f(s_b) - f(s_b')$ を最良解改善量と呼ぶ。解探索の目標は「定められた評価回数の中で、より評価値の小さな解を探索すること」である。従って「近傍操作 N^n を適用するたびに最良解改善量が少しでも大きくなることを目指す」のは、1つの妥当な考え方であろう。そこで本稿では、最良解改善量の期待値を近傍操作 N^n の優劣の評価に用いることとする。

以下、確率を $P(\cdot)$ により表す。近傍操作 N^n を適用しようとしている解 s_0 の評価値を $v_0 = f(s_0)$ とし、 s_0 に N^n を適用して得られた近傍解 $N^n \cdot s_0$ の評価値を $V = f(N^n \cdot s_0)$ とする (V は確率変数である)。また、暫定最良解 s_b の評価値が $v_b = f(s_b)$ であったとする (提案する探索法では、近傍操作を適用しようとしている解 s_0 が暫定最良解 s_b であるが、ここでは、そのような限定を設けずに考察を進める)。

まず、評価値 V の確率密度関数 p_V について考える。近傍解改善量を Y とすると、

$Y = v_0 - V$ であるので、 Y の確率密度関数 p_Y に対して

$$p_Y(v) dv = P(v \leq Y < v + dv) = P(v \leq v_0 - V < v + dv)$$

であるが、 $v = v_0 - u$ と置換すると

$$p_Y(v_0 - u) du = P(u - du < V \leq u) = p_V(u) du$$

となる。すなわち V の確率密度関数 p_V は p_Y を用いて

$$p_V(v) = p_Y(v_0 - v)$$

と表すことができる。

次に、最良解改善量について考える。近傍操作を適用して得られた評価値 V の実際の値 (観測値) が v であったとすると、 $v \geq v_b$ のときは暫定最良解が変化しないことを考慮して、最良解改善量は

$$g(v) = \begin{cases} v_b - v & (v < v_b) \\ 0 & (v \geq v_b) \end{cases}$$

と表すことができる。従って、最良解改善量の期待値は

$$E[g(V)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(v) \cdot p_V(v) dv = \int_{-\infty}^{v_b} (v_b - v) \cdot p_Y(v_0 - v) dv \quad (4)$$

のように、 v_b 、 v_0 、 p_Y から求めることができる。 v_b と v_0 については、探索の過程において値を知ることができる。 p_Y については、仮定 2 より、推定した平均と分散により定まる正規分布の確率密度関数とする^{*1}。

3.6 提案する探索法

近傍操作 N^n ($n = 1, 2, \dots$) の近傍解改善量の平均と分散を推定し、近傍操作 N^n の中で最良解改善量の期待値が最大となるものを選択して適用するという考え方にに基づき、最適化問題に対する新たな解の探索手法を構成することができる。特に本稿では、図 1 に示した局所探索法に以下のような変更を加えることにより新手法を構成する。

3.6.1 統計量の収集

式 (2) と式 (3) により単位近傍操作 N の平均と分散を推定するためには、式 (1) に示す 5 つの総和 s_{n1} 、 s_{n2} 、 s_{n3} 、 S_{Y1} 、 S_{Y2} の値が必要となるので、局所探索法の過程においてそれらの値を計算する。以下、図 1 の 3 行目で i 回目の近傍操作を適用した後の s_{n1} 、 s_{n2} 、

*1 もし単位近傍操作 N の近傍解改善量 $X_{(i,j)}$ が正規分布に従うのであれば、近傍操作 N^n の近傍解改善量 $Y_i = X_{(i,1)} + X_{(i,2)} + \dots + X_{(i,n_i)}$ も正規分布に従う。

s_{n3}, S_{Y1}, S_{Y2} の値をそれぞれ a_i, b_i, c_i, d_i, e_i として求めることとする。

まず、最初にこれらの値を

$$a_0 = 0; b_0 = 0; c_0 = 0; d_0 = 0; e_0 = 0$$

のように初期化しておく。3 行目で評価値 v_i の解 s_i に i 回目の近傍操作を適用するとき、後述のように近傍操作の選択を行った結果、 n_i 回の単位近傍操作の繰り返しからなる近傍操作 $N^{(n_i)}$ が選択されたとする。その近傍操作を s_i に適用して評価値 v'_i の解 s'_i が得られたとすると、近傍解改善量は $y_i = v_i - v'_i$ であり

$$a_i = r \cdot a_{i-1} + n_i; b_i = r \cdot b_{i-1} + n_i^2; c_i = r^2 \cdot c_{i-1} + n_i$$

$$d_i = r \cdot d_{i-1} + y_i; e_i = r \cdot e_{i-1} + y_i^2$$

として、逐次 a_i, b_i, c_i, d_i, e_i の値を求めることができる。

3.6.2 近傍操作の選択

局所探索法において近傍操作を適用するとき、最良解改善量の期待値が最も大きくなるような近傍操作 $N^{(n_i)}$ を選ぶ。まず、図 1 の 3 行目で i 回目の近傍操作を適用する前に、前述のように収集した統計量と式 (2)、式 (3) を用いて、単位近傍操作 N の平均、分散の推定値をそれぞれ

$$\mu_i = \frac{d_{i-1}}{a_{i-1}}; \sigma_i^2 = \frac{a_{i-1}^2 \cdot e_{i-1} - b_{i-1} \cdot d_{i-1}^2}{a_{i-1}^3 - b_{i-1} \cdot c_{i-1}}$$

と求める。次に、式 (4) に従って、各近傍操作 N^n ($n = 1, 2, \dots$) の最良解改善量の期待値 $g_{(n,i)}$ を、解 s_i の評価値 v_i を用いて

$$g_{(n,i)} = \int_{-\infty}^{v_i} (v_i - v) \cdot p_{Y_n}(v_i - v) dv$$

と求める。ただしここで、近傍解改善量の確率密度関数 p_{Y_n} は、各近傍操作 N^n に対してそれぞれ、平均 $n\mu_i$ 、分散 $n\sigma_i^2$ の正規分布とする。こうして求まる $g_{(n,i)}$ が最も大きくなるような近傍操作 $N^{(n_i)}$ を選び、図 1 の 3 行目で s_i に適用する。

4. 評価

提案する手法を Haskell⁵⁾ により実現し、ランダムに生成した 10,000 都市の巡回セールスマン問題に適用した。その際、正規分布と定積分の計算には GSL⁶⁾ と FFI⁷⁾ を利用した。巡回セールスマン問題の解は都市の順列により表現し、順列の順に都市を巡回したときの都市間のユークリッド距離の総和を評価値とし、順列中の 2 都市を交換する操作を単位近傍操作 N とした。式 (1) の r の値は 0.99 とした。簡単のため、図 1 の 3 行目で解 s_i

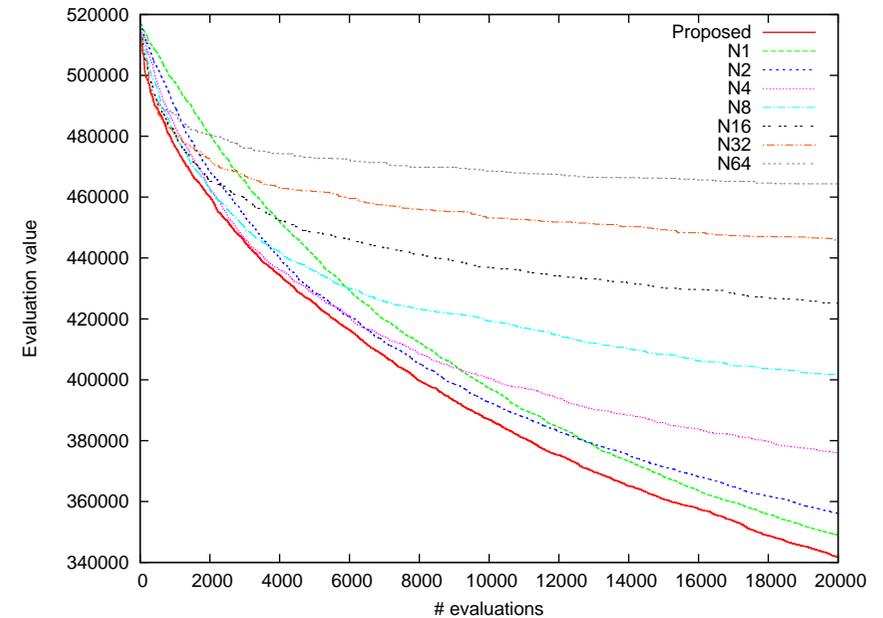


図 2 実験結果
Fig. 2 Experimental results.

に適用する近傍操作は $N^1, N^2, N^4, N^8, N^{16}, N^{32}, N^{64}$ に限定した。それら全てに対して最良解改善量の期待値を求めた上で、その値が最も大きなものを s_i に適用した。探索の初期において N の平均や分散を計算することができない場合は、 N^{64} を s_i に適用した。また比較のため、前述の近傍操作のいずれか 1 つのみを用いる通常の局所探索法を、同じ問題に適用した。

実験結果を図 1 に示す。図の横軸と縦軸はそれぞれ、評価回数と評価値 (図 1 の i と v_i) を表す。Proposed は提案手法、N1, N2, ... はそれぞれ N^1, N^2, \dots を用いた局所探索法による結果を表す。なお、グラフの傾きは、評価回数当たり平均してどの程度最良解の評価値が改善されているかを表しており、最良解改善量の期待値の大きさに対応している。

図 1 より、明らかに以下に述べることを見て取ることができる。

- (1) 局所探索法の結果からわかるように、近傍操作 N^n による最良解改善量の期待値は、評価値が小さくなるのに伴い小さくなる。

- (2) 近傍操作 N^n による最良解改善量の期待値は、単位近傍操作の繰り返し回数 n に対してある程度規則的な特徴を示す*1。
- (3) 最良解改善量の期待値が最も大きな近傍操作 N^n は、評価値に伴い変化する。各評価値においてグラフの傾きを見ると、Proposed のグラフの傾きは、 $N1, N2, \dots, N64$ のグラフの中で傾きの大きなものと同程度である。これは、提案手法が各評価値において、最良解改善量の期待値が大きな近傍操作を選択して解探索を行っていることを意味している。このことより、ここまで述べてきた近傍解改善量の平均や分散の推定法、ならびに最良解改善量の期待値の推定法の正当性が確認できる。
- (4) 提案手法は局所探索法よりも速く、評価値の小さな解に到達する。

5. ま と め

大規模な組合せ最適化問題に対し、近傍操作のみを用いて効率良く解探索を行う方法について、確率論的観点から考察した。計算機実験の結果、近傍解改善量の平均や分散の推定法、ならびに最良解改善量の期待値の推定法の正当性を確認し、また、提案する探索法の有効性を確認した。

参 考 文 献

- 1) 柳浦睦憲, 茨木俊秀: 組合せ最適化, 朝倉書店 (2001).
- 2) 繁樹算男: ベイズ統計入門, 東京大学出版会 (1985).
- 3) 森棟公夫, 照井伸彦, 中川 満, 西埜晴久, 黒住英司: 統計学, 有斐閣 (2008).
- 4) 重弘裕二, 増田達也: 近傍解コストの分布に基づく最適化手法の提案と評価, 情報処理学会研究報告, 2006-MPS-59, Vol.2006, No.56, pp.81-84 (2006).
- 5) Jones, S.P.: *Haskell 98 Language and Libraries: The Revised Report*, Cambridge University Press (2003).
- 6) Gough, B.: *GNU Scientific Library Reference Manual*, Network Theory Ltd. (2009).
- 7) Chakravarty, M. M.T.: The Haskell 98 Foreign Function Interface 1.0, The University of New South Wales (online), available from (<http://www.cse.unsw.edu.au/~chak/haskell/ffi/>) (accessed 2012-01-28).

*1 探索初期において、 N の近傍解改善量の平均がほぼ 0 であれば、 N^n の近傍解改善量の標準偏差は \sqrt{n} に比例することから、最良解改善量の期待値も \sqrt{n} に比例すると考えられる。