5V－07

大谷構造を持つ最適化問題の多点探索法について

吉澤大樹　　橋本周司

早稲田大学理工学研究科　　早稲田大学理工学部

1. はじめに

最適化問題において，対象となる解の候補が多大な場合，確率最適化法が用いられる．例えば，遺伝的アルゴリズム(GA)[Holland1992]は，工学的分野において成果を挙げ，定着した確率最適化法のひとつである．

最適化法の効率に関する基本的原理は，No Free Lunch Theorems [Wolpert1995]として示された．一般的な問題全体を想定した場合，最適化法が探す目的関数の値の期待値は，どの最適化法も同じであるため，対象とする問題の探索空間の地形(landscape)に目を向ける必要がある．

巡回セールスマン問題，フローショップスケジューリング問題などの組合せ最適化問題や，多数のGAが得意とする問題において，その探索空間の地形は大谷構造と呼ばれる特徴を持つことが知られている．[Boese1994] [山田 1998] [Jones1995]

大谷構造とは，(仮に，局所解を多数持つような複雑な構造であっても，)大域的に見ると最適解を谷底とする1つの大きな谷を持つような構造のことである．

本研究では，その大谷構造をモデル化し，少数の解候補から最小値を探索する手順について統計的解析をする．

2. モデル化

本研究に先立って，巡回セールスマン問題の探索空間の地形を調べた．まず，乱数によって配置された点間のユークリッド距離を利用して，都市数9の巡回セールスマン問題 1000 問を用意する．次に，探索空間にバンド距離(bond distance)[Kirkpatrick1985]という位相を導入し，これにより，解候補である巡回路間の距離を決める．そして，各解候補の最適解からの探索空間上の距離と，誤差 e (最適経路との経路長の差)との関係を調べた．

図1は，最適解から距離 d にある解候補の誤差の平均 $\bar{e}$ を表したものであり，図2は，各距離ごとに誤差の分散 σ_e^2 を表したものである．複雑な探索空間を持つTSPも，図1に表れたように大谷構造を持つことが判る．本研究では，大谷構造を持つ目的関数を，大谷成分の

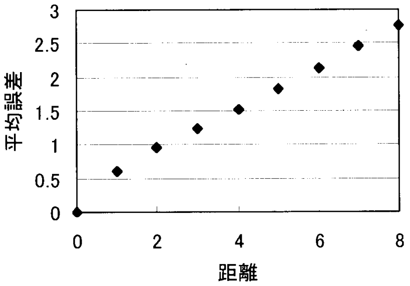

図1．TSPにおける最適解からの距離 d と誤差の平均 $\bar{e}$

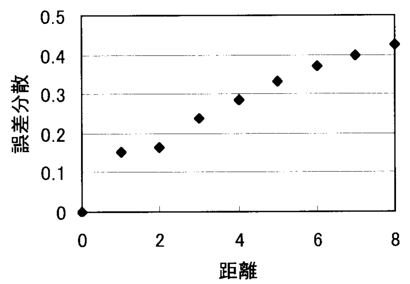

図2．TSPにおける最適解からの距離 d と誤差の分散 σ_e^2

関数とノイズ成分の関数の和ととらえる．TSPにおいては，図1が大谷成分で，図2がノイズ成分の大きさを表している．

以下の解析では，定義域を1次元にとり，大谷成分の関数は2次関数，ノイズ成分として一定の幅の平均0で独立な一様乱数を用いた．違うノイズ成分を用いることや，定義域を2次元以上にすることは，同様の手法で可能である．遺伝子長がnであるGAのハミング距離空間上の，1次関数的大谷構造は，n次元ユークリッド空間上の2次関数と対応している．また，それ以外の構造であっても，スケーリングによって対応することができる．

3. 実験

定義域を−100〜+100とし，大谷成分は2次係数 0.1 の2次関数，幅が−1〜+1 の一様乱数によって決まるノイズ成分の状態が異なる大谷構造を持つ 10,000,000 問について，各問題の 32768 通りの解候補から異なる12点を選ぶ．

一般に，2次関数上の異なる3点 (x_1,y_1) , (x_2,y_2), (x_3,y_3) が与えられた場合，式(1)によって，極値 x_{min} を決定でき

An Analysis of Multi-Point Search Algorithms
for the Problems that have Big Valley Structure
Hiroki Yoshizawa, Shuji Hashimoto
Waseda University

$$x_{\min} = \frac{y_1\left(x_2^2 - x_3^2\right) + y_2\left(x_3^2 - x_1^2\right) + y_3\left(x_1^2 - x_2^2\right)}{2\left\{y_1\left(x_2 - x_3\right) + y_2\left(x_3 - x_1\right) + y_3\left(x_1 - x_2\right)\right\}} \tag{1}$$

$$X_{\min} = \frac{\sum_i y_i\left(\sum_i x_i^2 \cdot \sum_i x_i^3 - \sum_i x_i \cdot \sum_i x_i^4\right) + \sum_i y_i x_i\left(\sum_i \cdot \sum_i x_i^4 - \left(\sum_i x_i^2\right)^2\right) + \sum_i y_i x_i^2\left(\sum_i x_i \cdot \sum_i x_i^2 - \sum_i \cdot \sum_i x_i^3\right)}{2\left\{\sum_i y_i\left(\left(\sum_i x_i^2\right)^2 - \sum_i x_i \cdot \sum_i x_i^3\right) + \sum_i y_i x_i\left(\sum_i \cdot \sum_i x_i^3 - \sum_i x_i \cdot \sum_i x_i^2\right) + \sum_i y_i x_i^2\left(\left(\sum_i x_i\right)^2 - \sum_i \cdot \sum_i x_i^2\right)\right\}} \tag{2}$$

る．3つ以上の点の組，(x_i,y_i)に対しては，最小2乗法によって決定された2次関数を推定された大谷構造とし，その極値 $X_{\min}$ は式(2)によって求めることが出来る．

実験として，表１の３つの方法で最小値を推定した結果が表２である．また，同様の方法で，４８点による推定と１９２点による推定も行った．(表３，表４)

表1．最小値の推定方法

方法1	12点の探索点を3点ずつ4組に分ける． それぞれ3点から式(1)により推定． 4組の平均を求める．
方法2	2組に分け,各6点から式(2)より推定． 2組の平均を求める．
方法3	12点から，式(2)より推定．

表2．12点探索

	誤差の平均	誤差の分散
方法1	0.469215	2571.216278
方法2	-0.000493	1.182603
方法3	-0.000005	0.038946

表3．48点探索

	誤差	分散
3点ずつ	5.097381	14991.250101
12点ずつ	0.000000	0.019454
48点	0.000003	0.015013

表4．192点探索

	誤差	分散
3点ずつ	3.728439	27921.573205
24点ずつ	0.000005	0.007921
192点	0.000005	0.007283

4．考察

最小2乗法を用いた場合は，予想されるとおり，ノイズに対する耐性が見られた．3点から代数的に求める方法では，分散が非常に大きかった．この理由は，乱数によって3点がほぼ水平に並ぶと，非常に大きな誤差を持ってしまうからである．ただし，この頻度は小さい．1000,000回を対象にしてxのきざみを1とした度数分布のグラフを作ると図3のようになる．このように，期待値や最頻値が的確で分散が大きいということは，デメリットばかりでなく，多点探索法にとっては望ましい面もある．

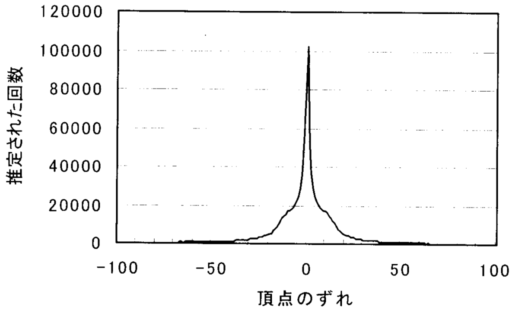

図3．方法1による頂点のずれ

5．まとめと展望

本研究では，モデル化された大谷構造に対し，少数の解候補から最小値を探索することを目的とした統計的解析をした．得られた知見により，大谷構造を持つ問題を効率的に最適化することが可能になる．具体的には，GAなどの初期集団の重心を決定したり，あるいは探索の初期段階で集団の重心を効果的に推移させたりすることができる．このような利用の場合は，分散が小さい手法が望まれるだろう．また，2体による交叉に代わる，3体以上による新しいオペレータの開発も見込まれる．このような場合は，分散が大きい手法が望まれることもある．

以上のようなことは，これまでにも発見的に行われてきたが，本研究の成果は，このような試みに，方向性や根拠を与えるものである．

参考文献

[Boese1994]Boese, K.D., Kahng, A.B. and Muddu, S.: A New Adaptive Multi-start Technique for Combinatorial Global Optimization, *Operations Research Letters*, Vol.16, (1994).

[Holland1992]Holland, J. H.: Adaptation in Natural and Artificial Systems, MIT Press (1992)

[Jones1995]Jones and Forrest : Fitness Distance Correlation as a Measure of Problem Difficulty for GAs, *6th ICGA*, (1995).

[Kirkpatrick1985]Kirkpatrick and Toulouse: Configuration Space Analysis of Travelling Salesman Problems, Journal de Physique 46, pp.1277-1292 (1985).

[Wolpert1995]Wolpert, D.H. and Macready, W.G.: No Free Lunch Theorems for Search, Santa Fe Institute Report, SFI-TR-95-02-110, Santa Fe Institute (1995).

[山田 1998]山田武士 and Colin, R.R.: フローショップスケジューリング問題の地形解析と遺伝的局所探索による解法，情報処理学会論文誌，Vol.39, No.7, pp.2112-2123 (1998).