アルゴリズム 65－3
（1998. 10. 28）

探索・最適化アルゴリズムの問題依存性について

吉澤大樹　　橋本周司
早稲田大学理工学研究科

探索・最適化アルゴリズムの研究の成果は一般に，従来法との実験による比較で示されるため，各アルゴリズムの関係を統一的に理解するには見通しが悪い．そこで，探索・最適化アルゴリズム全般の理論による形式化が期待されている．また，探索・最適化アルゴリズムの能力の問題依存性に対する認識は共通のものになっていないのが現状である．本研究では，この問題依存性の数学的構造を示した．すなわち標準問題を導入することにより，すべての探索・最適化アルゴリズムの能力が，標準問題に対し同じであるということを示した．これは，問題依存性の意義を明らかにするものであり，探索・最適化アルゴリズムの能力を論じる上での共通の基盤になりうるものである．

Dependency on Problems of Search and Optimization Algorithms

Hiroki Yoshizawa　　Shuji Hashimoto
Graduate School of Science and Engineering, Waseda University
Email: hiroki@shalab.phys.waseda.ac.jp

In general, since abilities of search and optimization algorithms are evaluated by comparing the results of experiments, relations among each algorithms are disorganized and difficult to understand. Researchers don't have the recognition of dependencies on problems of the algorithms in common and a formulation of theories are needed. Introducing standard problems, the paper has shown a mathematical structure for the dependency on problems and that the abilities of search and optimization algorithms are the same for these problems. This proves the meaning of the dependencies on problems and can be a basis for a study on abilities of search and optimization algorithms.

1．はじめに

探索・最適化アルゴリズム（以下，探索法）とは，例えば組合せ最適化問題のような膨大な解の候補を持つ問題において，より良い解を探し出すことを目的としたアルゴリズムである．とくに，ランダムサーチ，全探索，山登り法，ニューラルネットワーク，遺伝的アルゴリズム（GA）など

は，解く問題の種類を問わない汎用探索法である．これらの探索法にも様々なバリエーションがある．探索法の研究の歴史は，探索法の改良の歴史ともいえる．より早く，より良いを求める工夫を探し，探索法に様々なバリエーションが生まれてきたのである．そして現在もそのような立場の研究は続けられている．一方，理論研究においては，問題や探索法を特性によって分類し，例えば評価値の変化がない問題など，実用上有用なクラスのみを分析してきた．[1] [2] [3] [4]

各探索法には得意な問題，不得意な問題があって，問題によって探索法の能力の強弱が入れ替わることもあり，一概にどの探索法が優れているかということを簡単には言えないことが分かってきた．これを探索能力の問題依存性と呼ぶ．

その一方で，例えば遺伝的アルゴリズムは，それ以前の探索法が苦手とした問題を解決したりできるので，より強力な探索法であると考えるひとも少なくない．ローカルミニマムへの収束を妨げる機能のついたニューラルネットワークは，その機能の無いものよりは優れていると考えがちである．そして，多くの実験結果がこのような考え方を支持する結果を示すのである．

つまり，探索能力には問題依存性があるものの，探索法には優劣があって，問題依存性はむしろ例外的なものであると理解している人が少なくないのである．しかし，これは正しい理解ではない．

まず，これが誤解であることを，探索法の優劣についての最も単純な例であるランダムサーチと全探索について示す．また，このような誤解が生まれる理由は，問題依存性がどのような数学的構造を持っているかが明示されていないためであると考えられる．そこで次に，探索法全般の問題依存性の数学的構造を示す．

2．ランダムサーチと全探索

探索の手掛かりがない空間を探索する場合，解の候補をランダムに抽出する方法がある．これを**ランダムサーチ**という．良い解が見つかるかは運任せであるが，解の候補が有限ならば，繰り返せば見つからない確率が０に収束するので，いつかは見つかる．しかし，同じ解を何度も調べる場合があり，効率が悪いようにも思える．

一方，**全探索**は，一度調べたところは２度と調べないですべての候補を調べる方法である．調べた場所を記憶したり，あるいは，そのメモリーを省くために探索の順序を計画したりと苦労が必要である．逆にランダムサーチはその労力を怠っているため能力が低いものと見なされている．

このように，適切な苦労をすれば，その苦労に見合うだけの探索の効率の上昇が期待できるように考えられてきた．これが今日のバラエティー豊かな探索法が生まれた原動力である．

一見，全探索は完璧で隙の無いアルゴリズムに思える．探索効率の上昇も，必要なメモリ，あるいは苦労に対する正当な報酬であると感じられる．しかし，この考え方は，正しくないということが分かる．探索問題の１つであるかくれんぼ型問題を例にこれを示す．

かくれんぼ型問題

例として隠れる場所の数すなわち探索空間の大きさが６のかくれんぼ型問題を定義する．

探索空間　：　{A，B，C，D，E，F}

最適解　：　探索空間上を自由に移動できる１点．

探索者　：　探索点．１つとする．

ルール　①（一定時間待ってから）探索者が探索空間上の１点を指定する．

②指定された点が最適解であるか．

Ｙｅｓ → 探索終了．

Ｎｏ → ①へ．

探索問題　：　最適解が今どこにあるか．

探索法　：　指定する点をどのように決定するかのアルゴリズム．

探索終了までにかかる回数の期待値は，ランダムサーチが６回，全探索が３．５回であるように考えられる．しかしこれは，最適解がおとなしく動かなかった場合である．探索者が全探索を実行することが分かっている場合は，１度指定された点に，次の指定までに移動すれば，６回に５回は６回連続で見つからないので回数の期待値が３１回にまで上がってしまう．逆にこのように移動することを探索者が知っていれば，２回同じところを指定するだけで良い．期待値は１．８３回である．

仮に最適解側がどんな戦略をたてても探索者にその戦略を知られてしまう場合，最適解側はどんな戦略をたてればよいだろうか．それは，ランダムに次に隠れる場所を決める戦略である．これならば，どんな対抗策を用意されようが，６回に１回見つかる程度で済む．逆に探索者の戦略が最適解に知られている場合，探索者はランダムに次に探す場所を決めるとよい．どんなに意表をついた移動をされても，６回に１回見つけられることが期待できるからである．

このように，はじめ効率が悪いと考えられたランダムな決定戦略は，最適解側が用いれば，あらゆる探索者の戦略に対し一定の能力を与えることとなり，探索者が用いれば，どんな最適解側の戦略に対しても一定の成果が期待されるということが分かった．

これによって，全探索が必ずしもランダムサーチよりも優れている訳ではないことが示された．それだけではなく，２つが完全に対等の能力を示す見方があることがわかった．これは，評価値が分布しているような型の探索問題についても，同様の議論が成り立つ．また，全探索以外の探索法についても，同様の議論が成り立つ．これらを形式的にまとめておく．

３．数学的構造の解析

３．１　探索法の要素

探索法とは，解候補の集合である探索空間から，探索点（あるいは集団）というサンプリング窓を用いて目的に応じた解をみつけるための，探索点の制御戦略である．ここでは，時間的空間的に離散化された探索を考える．以下に，本論文における用語を定義しておく．

定義01 解候補 x　　ある集合（探索空間 X）の元．

定義02 探索コスト	ある時刻において，解候補ごとに決まる実数. これの設定されていない問題においては, 任意の解候補に対して一定の値とする.
定義03 評価関数 f	解候補をある順序集合に移す関数.
定義04 評価値 e	評価関数 fの値域である順序集合（評価値集合 E）の元.

ここでの評価値は，探索コストの効果が加味されたものとする．探索コストと探索によって得られるものが，時間とお金のように異質のものの場合はその比率が，お金とお金のように同質のものの場合はその差が，評価の対象とされる場合が多い．それらの効果を評価値の算出に加味することによって，同じ枠組みに還元できる.

定義05 探索問題	探索空間，評価値集合，評価関数で構成されるもの.
定義06 探索点	探索空間の部分集合（以下，集団）の元.
定義07 集団サイズ N	集団の濃度.
定義08 集団決定関数	時刻 t までの集団と評価値から, 時刻 $t+1$ の集団を決定する関数.
定義09 探索法	評価値集合，評価関数，集団，集団決定関数で構成されるもの.
定義10 最適解 x_{max}	任意の $e \in E$に対して， $f(x_{max}) \geqq e$ が成立する $x_{max} \in X$.
定義11 探索空間の構造	時刻ごとの評価関数 fの性質.

ここでいう関数の性質とは，探索法の選択によって，ある時刻に集団の平均評価値を上昇させることが可能な情報のことである.

定義12 動的問題	各解候補の評価値が時刻によって変わりうる探索問題.
定義13 静的問題	各解候補の評価値が時刻によって変わらない探索問題.

ここで注意すべきは，従来の見方のように動的問題と静的問題は別のクラスとして区分されるものではなく，評価値が変わりうる動的問題の中に，変化量が0の変化をする静的問題が属しているという点である.

定義 14 標準問題	各解候補の評価値が，時刻ごとに独立に値が決まる動的問題で, 各評価値は同じ期待値を持つものである．乱数の上限，下限が異なってもすべて標準問題に属する.

これは探索空間の構造に対する知見を得られない問題である.

3．2 定理

ここに，かくれんぼ型問題のところで示された内容を，以上の定義によって定義されるような探索法全般における定理と系として，簡単な証明とともに示す．

定理 ： 標準問題に対する任意の探索法の能力

標準問題に関して，任意の探索法の任意の探索点が最適解と一致する確率，及び集団の期待される平均評価値はそれぞれ全て等しい．この意味で任意の探索法の能力は等しい．

系１ ： ランダムサーチの完全汎用性

ランダムサーチは任意の問題に関して，（任意の探索点が最適解と一致する確率，及び集団の期待される平均価値がそれぞれすべて等しいという意味で）一定の能力が期待される．

系２ ： 集団サイズと探索能力

標準問題において，任意の探索点が最適解と一致する確率，及び集団の期待される平均評価値という観点から考えると，集団サイズの大小も探索能力に関係が無い

定理の証明 ：

探索空間の濃度をＶ，最適解がｏ個とすると，任意の探索点が最適解と一致する確率は，探索法に拠らず常に oV^{-1} である．集団の期待される平均評価値は，$(N\Sigma V^{-1}e_i)/N = V^{-1}\Sigma e_i$ で，探索法によらず一定である．ここで添字ｉは各解候補に対応している． e_i はｉ番目の解候補に対応する評価値で，Σではｉについてすべての和をとっている．

系１の証明 ：

定理の証明に同じ．

系２の証明 ：

定理の証明より，集団サイズＮに拠らない．

補足すると，系２より，任意の探索点が最適解と一致する確率，及び集団の期待される平均価値という観点から考えると，集団サイズの大小も探索能力に関係が無いのだが，人間が実際に要求しているのが集団中の最適解の場合は，集団に多様性がある方，すなわち集団サイズが大きく重なりが少ない方が有利とはいえる．

また，標準問題の構成方法から考えて，あるいはかくれんぼ型問題のところで考察した通り，標準問題でないならば能力に差を出すことができるということも言えるし，能力に差が出るのは標準問題ではないからであるということも言える．標準問題は，それらの能力の差が生まれる原因となる探索空間の構造を測る基準となるものである．また，ランダムサーチは，探索法がどれだけ探索空間の構造を利用できたかの基準となるものである．

４．議論

これらの定理や系は，にわかには受け入れがたい内容を含む．主たる疑問は，以下の２点であろう．１つは，普通の問題の評価値は動かないので，標準問題は特殊な例であり，一般性を失っているのではないかということ．もう１つは，実用上の問題との関係である．つまり，探索法の改良で計算回数と精度が同時に向上したという実験報告も多く，例えばＧＡは強力な探索法で汎用性も高いと認められているということとの関係である．

４．１　動的問題

解候補の評価値が時刻によって変わるような動的問題は，あまり理論では扱ってこなかったので，標準問題は，問題の一般性を失うのではないかという疑問も湧いてくる．ところで，ＧＡは生物界のように変化する環境を持つ動的問題にも対応している．このように実用において動的問題を扱うことは特異なことではなく，静的問題は移動量０の動的問題と考えれば，むしろ動的問題の方が一般的であると言える．物理で例えれば，等速直線運動と静止の関係のようなものである．

探索能力の問題依存性という観点から考え直してみると，静的問題は，全探索がランダムサーチより有利になるように，問題依存性が完全には成り立たない特別な構造を持った問題であることが分かる．やはり，動的問題が一般的カテゴリであり，静的問題はそれに内包される特別な例であると考える方が良いのが分かるであろう．

４．２　実用上の能力の差について

探索法は，探索空間の構造によってランダムサーチよりも効率が上がったりも下がったりもする．

ランダムサーチよりも効率が上がる構造を，その探索法が前提としている探索空間の構造と呼ぶことにする．実用上の問題は標準問題ではないので，特定の構造を必ず持っている．ある探索法，例えばＧＡが実用上汎用性を感じるのは，ＧＡが前提としている探索空間の構造が，多くの実用上の問題に当てはまっているのではないだろうかと予想できる．

多くの実用上の問題に当てはまっているとはどういうことか．その問いに対しては，探索法の暗黙の前提という概念を提示することによって答えたい．

探索法の暗黙の前提

①評価関数は静的，あるいは準静的である．

②評価値の探索空間上での位置関係に，最適化に役立つ情報がある．

準静的とは，評価値の変動がある範囲に収まることで，一番緩い条件としては，直前の時刻の評価値との相関が正であることが挙げられる．

従来の理論研究が，動的問題と静的問題を別のクラスとして，動的問題をほとんど取り扱わなかったのは①のせいであろう．そのため両者を内包する一般的な枠組みを作れなかったと言えるだろう．

②は，準連続的とも表現できる．評価値が大きいところの近くは，小さいところの近くよりも，評価値が大きい可能性が高いであろうという予測である．ここで注意すべきは，例えば，ランダムサーチでは，解候補の互いの距離がすべて１と見なせるように，解候補の位置関係は探索法が規定しているということである．

探索問題を解く際，知りうるのは，いくつかの解候補の位置とその評価値のみである．それだけが手がかりであるので，位置と評価値とに関係が無いとは，探索に役立つ情報が無いということである．評価値の大きいところの近くの評価値が小さいように，関係が逆転している場合，その問題をうまく解ける探索法とは，よい解候補が見つかった場合，近くを探さずに遠くを探す方法だから，準連続的で素直な問題を説くのに役立たない．

探索法は，問題が探索に役立つ情報を持つという前提の下につくられている．ＧＡのような汎用探索法が，実用上でランダムサーチよりも効果が上がるということは，実用上の問題が，暗黙の前提をある程度満たしているということである．

標準問題は暗黙の前提の枠の外にあるが，枠の中のことを考える際にも，外側をしっかり組み立てておくことによってはじめて，扱う問題の全体を見通すことができるのである．

５．結論

本論文において，標準問題を提示した．この標準問題を通して，探索・最適化アルゴリズムの探索能力の問題依存性を正確な形で理解できるようになった．すなわち，全ての探索法は標準問題に対して同一の能力を発揮し，ある問題に対して効率の良い探索法には必ず苦手な問題を構成できる．つまり，探索法の効率は完全に問題に依存している訳である．これは，問題依存性の意義を明らかにするものであり，探索・最適化アルゴリズムの能力を論じる上での共通の基盤になりうるものである．見方を変えれば限定された問題の範囲では必ず効率の良い探索が実現できることを保証するものである．

また，標準問題は動的問題であるゆえ，動的問題への視野を広げることができた．

ある特定の問題に関して，探索空間の構造を明らかにすることによって，問題全体における位置づけを理解できるようになる．また，特定の探索法に関して，その探索法が前提とする問題空間の構造を明らかにすることによって，探索法全体の中でどのような特徴を持っているのかという位置づけを理解できるようになる．そして，標準問題とランダムサーチがこれらの位置づけの基準となるものなのである．このように本論文の観点は，探索問題や探索法を包括的に扱うことを可能にするものである．

参考文献

[1]多田和夫, “探索理論” ,日科技連出版, (1973).

[2]Rudolf Ahlswede and Ingo Wegener, “Search Problems”, A Wiley-Interscience Publication, (1987).

[3]茨木俊秀, “離散最適化とアルゴリズム” ,岩波書店,(1993).

[4]茨木俊秀, 福島雅夫, “最適化の手法” ,共立出版,(1993).