離散最適化基礎論 第 5 回
性能保証 (1)：厳密近傍

岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2013 年 11 月 8 日

最終更新：2013 年 11 月 8 日　17:39

目次

離散最適化問題とは ?: 一般論

離散最適化問題 (discrete optimization problem) とは？

離散最適化問題は以下に挙げる S, f を使って表される最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条　件} & x \in S \end{array}$$

のことで，ただし，
- S は 有限 集合
- $f\colon S \to \mathbb{R}$ は関数

である

離散最適化問題とは ?: 一般論 続き

離散最適化問題 (discrete optimization problem) とは？

離散最適化問題は以下に挙げる S, f を使って表される最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条　件} & x \in S \end{array}$$

のことで，ただし，...

用語
- S：許容集合 (feasible set)
  - 「入力」と「何が許容解であるかという条件」によって定まる
- S の各要素：許容解 (feasible solution)
- f：目的関数 (objective function)
  - 「目的」によって定まる

最適解

最適解 (optimal solution) とは？

離散最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条　件} & x \in S \end{array}$$

の最適解とは 許容解 $x \in S$ で，次を満たすもののこと

任意の許容解 $x' \in S$ に対して，$f(x) \leq f(x')$

注意
- 最適解は複数存在するかもしれない
- $S \neq \emptyset$ ならば，最適解は必ず存在する
  (「連続最適化」では，これが成り立つとは限らない)

最適値

最適値 (optimal value) とは？

離散最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条　件} & x \in S \end{array}$$

の最適値とは，最適解の目的関数値のこと

「最適解」と「最適値」は異なる概念であり，明確に使い分ける

事実 (演習問題)

$x_1, x_2 \in S$ が最適解 $\Rightarrow f(x_1) = f(x_2)$

最適解の目的関数値は常に等しい (最適値はただ 1 つしか存在しない)

近傍関数と近傍

近傍関数 (neighborhood function) とは？

離散最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条　件} & x \in S \end{array}$$

に対する近傍関数とは，関数 $N\colon S \to 2^S$ で，
任意の $x \in S$ に対して $x \in N(x)$ を満たすもののこと

復習：2^S は S の部分集合を全部集めた集合 (S の冪集合 (べき集合))

近傍 (neighborhood) とは？

N に関する許容解 $x \in S$ の近傍とは $N(x)$ のこと

局所最適解

局所最適解 (local optimal solution) とは？

離散最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条　件} & x \in S \end{array}$$

とそれに対する近傍関数 $N\colon S \to 2^S$ を考えたとき，
$x \in S$ が N に関する局所最適解であるとは，次を満たすこと

任意の $x' \in N(x)$ に対して，$f(x) \leq f(x')$

局所最適解と対比させて，最適解のことを大域最適解と言うことがある

注意

N に関する局所最適解がただ 1 つしか存在しない $\Rightarrow$ それは最適解

局所探索法を評価する観点

局所探索法 (local search)：一般的枠組み

0. 許容解 $x \in S$ を適当に見つける (この x を**初期解**と呼ぶ)
1. 以下を繰り返し
   1. $N(x)$ に x よりもよい解 x' が存在するならば (すなわち，ある $x' \in N(x)$ が存在して $f(x') < f(x)$ ならば) $x \leftarrow x'$
   2. そうでなければ繰り返しを終了
2. x を出力 (この x は N に関する局所最適解 (定理 1.1))

局所探索法の出力は N に関する局所最適解

局所探索法を評価する観点

- **性能保証** (performance guarantee)
  局所最適解が最適解に (目的関数値で) どれだけ近いか？
- **計算量** (computational complexity)
  局所探索法がどれだけ速く局所最適解に収束するか？

局所探索法を評価する観点：性能保証

局所探索法 (local search)：一般的枠組み

0. 許容解 $x \in S$ を適当に見つける (この x を**初期解**と呼ぶ)
1. 以下を繰り返し
   1. $N(x)$ に x よりもよい解 x' が存在するならば (すなわち，ある $x' \in N(x)$ が存在して $f(x') < f(x)$ ならば) $x \leftarrow x'$
   2. そうでなければ繰り返しを終了
2. x を出力 (この x は N に関する局所最適解 (定理 1.1))

最悪の場合の近似の度合いで，性能保証を評価する

$$\text{近似比} = \max_{x:\text{局所最適解}} \frac{f(x)}{f(\text{最適解})}$$

- 近似比 ≥ 1
- 近似比が小さいほどよい

今日の目標

今日の目標

厳密近傍の定義と性質を理解する
- 定義：局所最適解が必ず最適解となる
- つまり：局所探索法により，最適解が必ず見つかる

厳密近傍の例

目次

厳密近傍

厳密近傍 (exact neighborhood) とは？

離散最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条　件} & x \in S \end{array}$$

に対する近傍関数 $N \colon S \to 2^S$ が**厳密** (exact) であるとは，
N に関する任意の局所最適解が最適解であること
つまり，任意の x に対して，次が成り立つこと

任意の $x' \in N(x)$ に対して $f(x) \leq f(x')$	ならば	任意の $x' \in S$ に対して $f(x) \leq f(x')$

厳密近傍：例 1

整列問題 (降順)

- 許容解は $\{1, 2, \ldots, n\}$ 上の順列

$$S = \{\pi \mid \pi \text{ は } \{1, 2, \ldots, n\} \text{ 上の順列}\}$$

- 目的関数 f は次で定義

$$f(\pi) = \sum_{i=1}^{n} i \cdot \pi_i$$

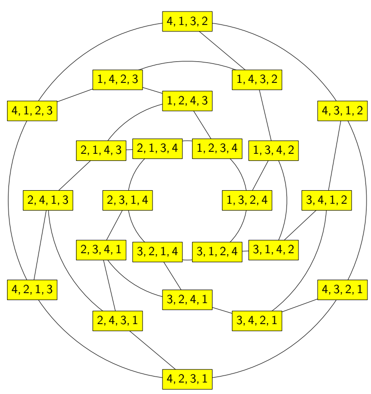
局所操作：隣接する 2 要素の入れ替え (隣接互換)

$\boxed{\pi = (3, 2, 5, 1, 4)} \longrightarrow \boxed{\pi' = (3, 2, 1, 5, 4)}$

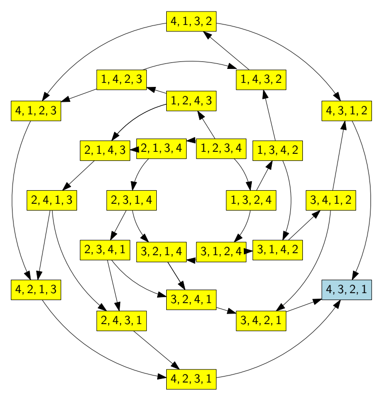
$f(\pi) = 46$　　$f(\pi') = 50$

この局所操作が誘導する近傍関数を N とする

整列問題：近傍グラフ



整列問題：遷移グラフ



整列問題：1 つの局所最適解

補題 5.1
許容解 $(n, n-1, \ldots, 2, 1)$ は N に関する局所最適解である

証明：$\pi = (n, n-1, \ldots, 2, 1)$ とする

- π に局所操作を適用して得られる許容解を考える
- π における π_j と π_{j+1} を交換して得られた解を π' とする $(j \in \{1, \ldots, n-1\})$
- $f(\pi') = f(\pi) + 1 > f(\pi)$ (計算の詳細は次のページ)
- したがって，π は N に関する局所最適解である □

整列問題：1 つの局所最適解 (計算の続き)

$$
\begin{aligned}
f(\pi') &= \sum_{i=1}^{n} i \cdot \pi'_i \\
&= \sum_{i=1}^{n} i \cdot \pi_i \\
&\quad -j \cdot \pi_j - (j+1) \cdot \pi_{j+1} + j \cdot \pi_{j+1} + (j+1) \cdot \pi_j \\
&= f(\pi) + \pi_j - \pi_{j+1} \\
&= f(\pi) + (n-j+1) - (n-j) \\
&= f(\pi) + 1
\end{aligned}
$$

整列問題：他に局所最適解は存在しない

補題 5.2
$(n, n-1, \ldots, 2, 1)$ 以外の許容解は N に関する局所最適解ではない

証明：π を $(n, n-1, \ldots, 2, 1)$ 以外の許容解とする

- このとき，ある $j \in \{1, \ldots, n-1\}$ が存在して，$\pi_j < \pi_{j+1}$
- π における π_j と π_{j+1} を交換して得られた解を π' とする
- $f(\pi') = f(\pi) - 1 < f(\pi)$ (演習問題)
- したがって，π は N に関する局所最適解ではない □

整列問題：まとめ

補題 5.1
許容解 $(n, n-1, \ldots, 2, 1)$ は N に関する局所最適解である

補題 5.2
$(n, n-1, \ldots, 2, 1)$ 以外の許容解は N に関する局所最適解ではない

つまり，局所最適解はただ 1 つしか存在しない．よって，...

定理 5.3
整列問題に対する近傍関数 N は厳密

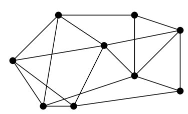
目次

全域木

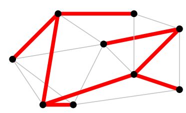
$G = (V, E)$：無向グラフ

G の全域木とは？
G の全域木 (spanning tree) とは，
G の部分グラフ T で，次を満たすもののこと

- その頂点集合は V (全域性)
- 連結であり (連結性)，閉路は含まない (非閉路性)



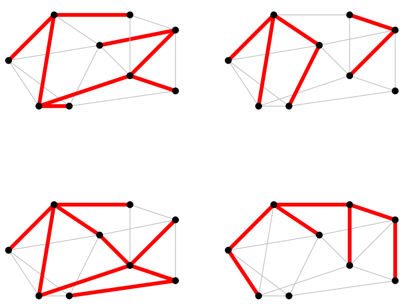
G



G の全域木

T の辺集合を $E(T)$ で表す

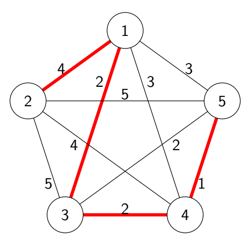
G の全域木はどれ？



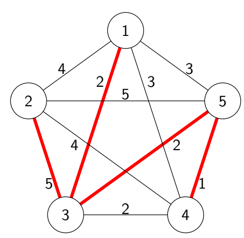
最小全域木

$G = (V, E)$：連結無向グラフ，$c(e)$：各辺 $e \in E$ に対する非負重み

G の最小全域木とは？
G の最小全域木とは，G の全域木でその辺の重み和が最小のもののこと



重み $= 4 + 2 + 2 + 1 = 9$



重み $= 5 + 2 + 2 + 1 = 10$

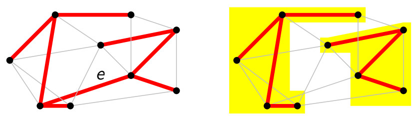
各辺 e の重みが $c(e)$ であるとき，全域木 T の重みを $c(T)$ で表す

全域木の性質

$G = (V, E)$：連結無向グラフ，T：G の全域木，e：T の辺

事実

- T の辺の数は $|V| - 1$
- T から e を除去して得られるグラフ $T - e$ は非連結

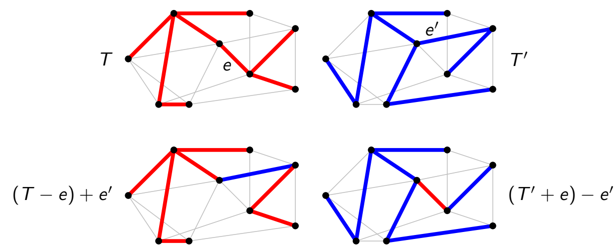


全域木の交換可能性

$G = (V, E)$：連結無向グラフ，T, T'：G の異なる全域木

定理 5.4 (全域木の交換可能性)

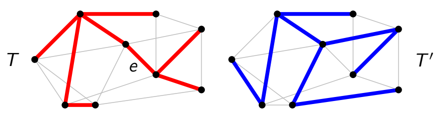
任意の $e \in E(T) - E(T')$ に対して，ある $e' \in E(T') - E(T)$ が存在して $(T - e) + e'$ と $(T' + e) - e'$ も G の全域木



全域木の交換可能性：証明 (1)

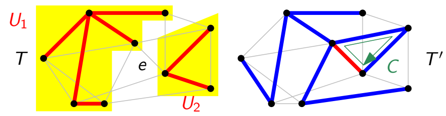
$e \in E(T) - E(T')$ を任意に選ぶ

- $T - e$ は非連結で，頂点集合 V を連結な部分 U_1, U_2 に分ける
- $T' + e$ を考える
  - $T' + e$ の辺数は $(|V| - 1) + 1 = |V|$　　$(\because e \notin E(T'))$
  - よって，$T' + e$ は全域木ではない
  - よって，$T' + e$ は閉路を含む　　(← なぜ？)
  - その閉路を C とする



全域木の交換可能性：証明 (2)

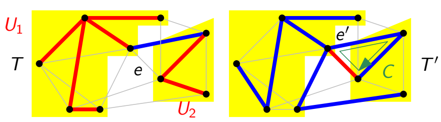
- 閉路 C は e 以外に U_1 と U_2 を結ぶ辺を持つ　　(← なぜ？)
- その辺を e' として選ぶ
- このとき，$(T - e) + e'$ と $(T' + e) - e'$ が G の全域木であることを示す



全域木の交換可能性：証明 (3)

<u>証明したいこと 1</u>：$(T - e) + e'$ は G の全域木である

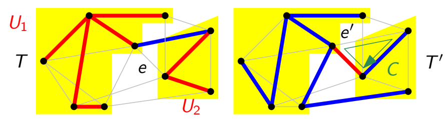
- 連結性
  - e' は U_1 と U_2 を結ぶので，$(T - e) + e'$ は連結
- 非閉路性：背理法
  - $(T - e) + e'$ に閉路があると仮定する
  - その閉路は e' を通らないといけない　　$(\because T - e$ に閉路はない$)$
  - その閉路は e' 以外に U_1 と U_2 を結ぶ辺を持つ
  - $T - e$ が U_1 と U_2 を分けることに矛盾



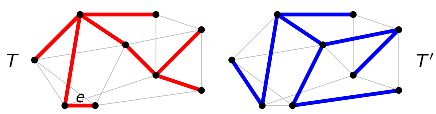
全域木の交換可能性：証明 (4)

<u>証明したいこと 2</u>：$(T' + e) - e'$ は G の全域木である

- 連結性
  - e' は閉路 C 上の辺なので，除去しても連結性を保つ
- 非閉路性：
  - $T' + e$ には閉路が C 以外に存在しない　　(← なぜ？)
  - e' は C 上の辺なので，$(T' + e) - e'$ に閉路はない　　□



全域木の交換可能性：例



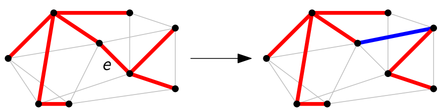
最小全域木問題に対する局所操作

$G = (V, E)$：連結無向グラフ

最小全域木問題に対する交換操作

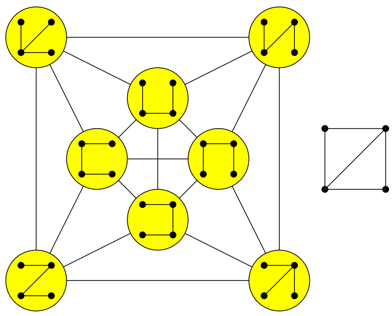
T：現在保持している G の全域木

1. T のある辺 e を選び，$T - e$ を考える
2. T に含まれない辺 e' を選び，全域木 $(T - e) + e'$ を作る

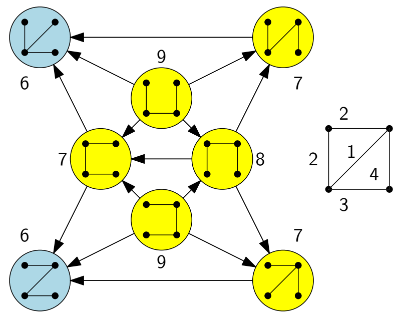


うまく e' を選ばないと $(T - e) + e'$ が G の全域木にならないので注意

最小全域木問題：近傍グラフ



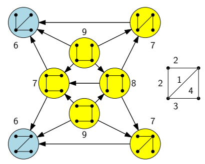
最小全域木問題：遷移グラフ



最小全域木問題：交換近傍の厳密性

定理 5.5 (最小全域木問題に対する交換近傍の厳密性)

最小全域木問題に対する交換近傍は厳密である



証明のアイディア：
- T を局所最適解，T' を最適解とする
- $\boxed{\text{証明の目標}}$：$c(T) \le c(T')$ （これを示せば十分）
- T と T' に対して定理 5.4 を使ってみる
- 実際は背理法を使う…

定理 5.5 の証明

- T を交換近傍に関する局所最適解とする
- 背理法：T が最適解ではないと仮定する
- T' は最適解で，$|E(T) \cap E(T')|$ が最大のものであるとする
  - T は最適解ではないので $T \neq T'$
- 定理 5.4 より，
  任意の辺 $e \in E(T) - E(T')$ に対して，
  ある辺 $e' \in E(T') - E(T)$ が存在して，
  $(T - e) + e'$ と $(T' + e) - e'$ も全域木
- $(T - e) + e'$ は T に対して交換操作を施すことによって得られ，
  T は交換近傍に関する局所最適解なので

$$c(T) \le c((T - e) + e')$$

すなわち，$c(e) \le c(e')$

定理 5.5 の証明 (続き)

- T' は最適解なので，

$$c(T') \le c((T' + e) - e'))$$

すなわち，$c(e') \le c(e)$
- したがって，$c(e) = c(e')$．
- したがって，$c(T') = c((T' + e) - e')$ であり，$(T' + e) - e'$ も最適解
- しかし，

$$|E(T) \cap E((T' + e) - e')| = |E(T) \cap E(T')| + 1 > |E(T) \cap E(T')|$$

- これは，T' の選び方に矛盾
- したがって，T は最適解である □

目次

今日のまとめ

厳密近傍
- 定義：任意の局所最適解が最適解
- 性質：局所探索法により最適解が見つかる

厳密近傍の例
- 整列問題における隣接互換近傍
- 最小全域木問題における交換近傍

補足

疑問

厳密近傍を持つ離散最適化問題はどんな問題なのか？

事実 (演習問題)

どんな離散最適化問題にも厳密近傍が存在する

??????????

どんな離散最適化問題も局所探索法により解ける？

これは正しいが，効率も気にしないといけない

局所探索法と厳密近傍

局所探索法 (local search)：一般的枠組み

0. 許容解 $x \in S$ を適当に見つける (この x を**初期解**と呼ぶ)
1. 以下を繰り返し
   1. $N(x)$ に x よりもよい解 x' が存在するならば
      (すなわち，ある $x' \in N(x)$ が存在して $f(x') < f(x)$ ならば)
      $x \leftarrow x'$
   2. そうでなければ繰り返しを終了
2. x を出力 (この x は N に関する局所最適解 (定理 1.1))

近傍関数 N が厳密ならば，出力 x は最適解

- 世の中には「多項式時間で最適解が見つけられない」と思われている問題が多く存在する (例えば，巡回セールスマン問題)
- それらが局所探索法で解けるのか？

巡回セールスマン問題と厳密近傍

事実 (Savage, Weiner, Bagchi, '76)

巡回セールスマン問題に対する任意の厳密近傍において，
その近傍の大きさは最悪の場合 $\binom{(n-2)!}{2}$ 以上 (n は都市数)

つまり，巡回セールスマン問題の厳密近傍の大きさは，
多項式で収まらない

事実 (Papadimitriou, Steiglitz '77)

$\mathrm{P} \neq \mathrm{NP}$ ならば，巡回セールスマン問題に対して
局所操作を多項式時間で行える厳密近傍は存在しない

つまり，局所探索法によって巡回セールスマン問題の最適解を
多項式時間で見つけられなそう