

離散最適化基礎論 第7回
性能保証 (3)：巡回セールスマン問題と近似比岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2013年12月6日

最終更新：2013年12月11日 15:58

岡本 吉央 (電通大)

離散最適化基礎論 (7)

2013年12月6日

1 / 45

局所探索法の評価観点：復習

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
- ▶ $f: S \rightarrow \mathbb{R}$ は関数

である

岡本 吉央 (電通大)

離散最適化基礎論 (7)

2013年12月6日

3 / 45

局所探索法の評価観点：復習

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)

岡本 吉央 (電通大)

離散最適化基礎論 (7)

2013年12月6日

5 / 45

局所探索法の評価観点：復習

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 $N: S \rightarrow 2^S$ で、
任意の $x \in S$ に対して $x \in N(x)$ を満たすものこと復習： 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

岡本 吉央 (電通大)

離散最適化基礎論 (7)

2013年12月6日

7 / 45

局所探索法の評価観点：復習

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

岡本 吉央 (電通大)

離散最適化基礎論 (7)

2013年12月6日

2 / 45

局所探索法の評価観点：復習

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

 $x_1, x_2 \in S$ 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)

岡本 吉央 (電通大)

離散最適化基礎論 (7)

2013年12月6日

6 / 45

局所探索法の評価観点：復習

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 $N: S \rightarrow 2^S$ 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

岡本 吉央 (電通大)

離散最適化基礎論 (7)

2013年12月6日

8 / 45

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 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) どれだけ近いのか?
- ▶ 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?

今日の目標

今日の目標

巡回セールスマン問題の 2opt 近傍に関する近似比を詳細に調べる

- ▶ 三角不等式を満たす場合の上界: $4\sqrt{n}$

巡回セールスマン問題：前回の復習

定理 6.2 (Papadimitriou, Steiglitz '78)

任意の定数 $\alpha \geq 1$ に対して,
巡回セールスマン問題に対するある入力が存在して,
2opt 近傍に関する局所探索法の近似比が α より大きい

演習問題 6.6 (Papadimitriou, Steiglitz '78)

任意の偶数 $n \geq 8$ に対して,
巡回セールスマン問題に対する都市数 n のある入力が存在して,
2opt 近傍に関する局所探索法の近似比が n より大きい

つまり、都市数 n が大きくなると、近似比もそれに比例して大きくなる

- ▶ 実は近似比が n^{100} や 100^{100^n} よりも大きくなる例も作れる

三角不等式を満たす場合における最適値の単調性

X : 都市の集合, $Y \subseteq X$

補題 7.1

X 上の距離が三角不等式を満たすとき

$$Y \text{ 上の最短巡回路の長さ} \leq X \text{ 上の最短巡回路の長さ}$$

証明：次を証明すれば十分 □

演習問題

X 上の距離が三角不等式を満たすとき

$$X - \{x\} \text{ 上の最短巡回路の長さ} \leq X \text{ 上の最短巡回路の長さ}$$

がすべての $x \in X$ に対して成り立つ

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 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

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

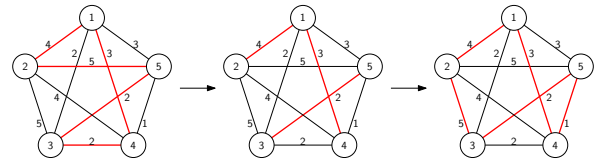
- ▶ 近似比 ≥ 1
- ▶ 近似比が小さいほどよい

巡回セールスマン問題に対する 2opt 操作

巡回セールスマン問題に対する 2opt 操作

τ : 現在保持している巡回路

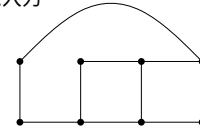
- 1 τ が使っている辺を 2 つ取り除く
- 2 τ が使っていなかった辺を 2 つ追加して、新たな巡回路を得る



2opt 操作が誘導する近傍を 2opt 近傍と呼ぶ

巡回セールスマン問題と三角不等式

定理 6.2 の証明で考えた入力



- ▶ これは都市数 8 の入力を無向グラフで表現したもの
- ▶ 描いてある辺の費用は ϵ ($\epsilon > 0$ は非常に小さな正実数)
- ▶ 描いてない辺の費用は $1 + \epsilon$

これは三角不等式を満たしていない!

距離が三角不等式を満たすとは?

対称正方形行列 D が三角不等式を満たすとは、

$$d(i, j) \leq d(i, k) + d(k, j)$$

が任意の添え字 i, j, k に対して成り立つこと

目次

- ① 局所探索法の評価観点：復習
- ② 近似比の上界：三角不等式を満たす場合
- ③ 局所探索法の計算量：復習と予備的考察
- ④ 今日のまとめ

今日の目標は次の定理を証明すること

定理 7.2 (Chandra, Karloff, Tovey '99)

巡回セールスマン問題において、距離が三角不等式を満たす任意の入力に対して、 2opt 近傍に関する局所探索法の近似比は $4\sqrt{n}$ 以下ただし、 n は都市数

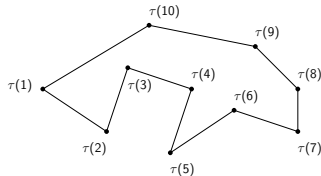
証明の着想：補題

記法

- ▶ opt : 最適値
- ▶ $\tau = (\tau(1), \tau(2), \dots, \tau(n))$: 局所最適解
- ▶ $E_i = \left\{ (\tau(j), \tau(j+1)) \mid d(\tau(j), \tau(j+1)) > \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}} \right\}$
- ▶ 注意: $E_1 \subseteq E_2 \subseteq \dots \subseteq E_n$

補題 7.3

任意の $i \in \{1, \dots, n\}$ に対して、 $|E_i| \leq i - 1$



補題 7.3 が正しいと仮定して、定理 7.2 を証明する (2)

つまり

$$\tau \text{ の長さ} \leq \sum_{i=1}^n \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}} = 2 \cdot \text{opt} \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{i}}$$

ここで、

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{i}} \leq \int_0^n \frac{1}{\sqrt{x}} dx = [2\sqrt{x}]_0^n = 2\sqrt{n}$$

なので、

$$\tau \text{ の長さ} \leq 4\sqrt{n} \cdot \text{opt}$$

つまり、近似比は $4\sqrt{n}$ 以下 □

残されたこと

補題 7.3 の証明

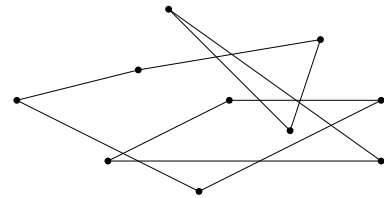
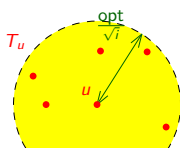
補題 7.3 の証明 (2)

巡回路 τ の辺には自然に向きがついているとみなす

- ▶ 記法：弧 a の始点 $t(a)$ 、終点 $h(a)$

E_i の任意の弧 a の始点 $u = t(a)$ を見てみる

- ▶ 記法: $T_u = \left\{ t(a') \mid a' \in E_i, d(u, t(a')) \leq \frac{\text{opt}}{\sqrt{i}} \right\}$



補題 7.3 が正しいと仮定して、定理 7.2 を証明する (1)

補題 7.3 より、

- ▶ $|E_1| \leq 0$ (つまり、 $E_1 = \emptyset$)
- ▶ したがって、 τ において最も長い辺の長さ $\leq 2 \cdot \text{opt}$
- ▶ $|E_2| \leq 1$
- ▶ したがって、 τ において 2 番目に長い辺の長さ $\leq \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{2}}$
- ▶
- ▶ $|E_i| \leq i - 1$
- ▶ したがって、 τ において i 番目に長い辺の長さ $\leq \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}}$

つまり

$$\tau \text{ の長さ} = \sum_{i=1}^n (\tau \text{ において } i \text{ 番目に長い辺の長さ}) \leq \sum_{i=1}^n \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}}$$

補題 7.3 の証明 (1)

記法

- ▶ opt : 最適値
- ▶ $\tau = (\tau(1), \tau(2), \dots, \tau(n))$: 局所最適解
- ▶ $E_i = \left\{ (\tau(j), \tau(j+1)) \mid d(\tau(j), \tau(j+1)) > \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}} \right\}$
- ▶ 注意: $E_1 \subseteq E_2 \subseteq \dots \subseteq E_n$

補題 7.3

任意の $i \in \{1, \dots, n\}$ に対して、 $|E_i| \leq i - 1$

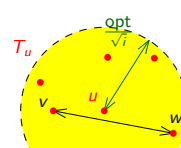
背理法で証明：ある i に対して、 $|E_i| \geq i$ であると仮定して矛盾を導く

補題 7.3 の証明 (3) : T_u の性質 (1)

$v, w \in T_u$ を任意に選ぶ ($v \neq w$)

- ▶ $d(v, w) \leq d(v, u) + d(u, w) \leq \frac{\text{opt}}{\sqrt{i}} + \frac{\text{opt}}{\sqrt{i}} = \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}}$
- 三角不等式

すなわち、 T_u の任意の 2 都市間の距離は $\frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}}$ 以下



補題 7.3 の証明 (4) : T_u の性質 (2)

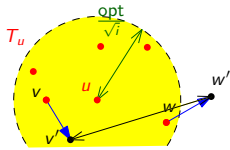
$v, w \in T_u$ を任意に選ぶ ($v \neq w$)

- ▶ v' : v を始点とする E_i の弧の終点
- ▶ w' : w を始点とする E_i の弧の終点

このとき, τ が 2opt 近傍に関する局所最適解であることから,

$$d(v', w') \geq \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}}$$

これらの説明を次でもう少し詳しく



補題 7.3 の証明 (6) : T_u の性質 (4)

なぜそうなるのか? (続き)

- ▶ したがって,

$$\begin{aligned} \tau \text{ の長さ} &\leq \tau' \text{ の長さ} \\ &= \tau \text{ の長さ} - d(v, v') - d(w, w') + d(v, w) + d(v', w') \\ \therefore d(v', w') &\geq d(v, v') + d(w, w') - d(v, w) \\ &\geq \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}} + \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}} - \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}} \\ &= \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}} \end{aligned}$$

注 : $(v, v'), (w, w') \in E_i$, かつ, $v, w \in T_u$

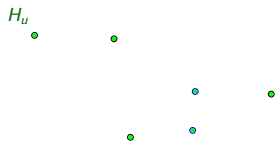
補題 7.3 の証明 (8) : T_u の要素数に関する観察 (続き)

観察 7.4

$$|T_u| < \sqrt{i}$$

観察 7.4 の証明 (続き) :

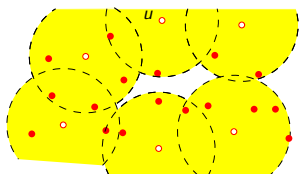
- ▶ よって, H_u 上の最短巡回路の長さ $\geq 2 \cdot \text{opt}$
- ▶ 補題 7.1 から, 全体の最短巡回路の長さ $\geq 2 \cdot \text{opt}$
- ▶ これは, 全体の最短巡回路の長さ = opt であることに矛盾 \square



補題 7.3 の証明 (10) : 部分集合の構成 (1)

E_i の弧の始点全体の集合 X の部分集合 Y を次のように作る

- 1 X の任意の都市 u を選んで, Y に入れる
- 2 u からの距離が $\frac{\text{opt}}{\sqrt{i}}$ 以下である都市をすべて X から除去する
- 3 これを $X = \emptyset$ となるまで繰り返す

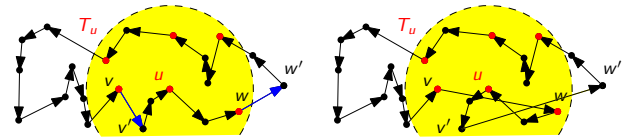


補題 7.3 の証明 (5) : T_u の性質 (3)

なぜそうなるのか?

- ▶ τ における辺 (v, v') と (w, w') を (v, w) と (v', w') に替えた巡回路 τ' を考える
- ▶ τ' の長さ = τ の長さ - $d(v, v')$ - $d(w, w')$ + $d(v, w)$ + $d(v', w')$
- ▶ τ' は τ に 2opt 操作を施すことで得られるので,

$$\tau \text{ の長さ} \leq \tau' \text{ の長さ}$$



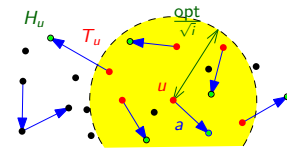
補題 7.3 の証明 (7) : T_u の要素数に関する観察

観察 7.4

$$|T_u| < \sqrt{i}$$

観察 7.4 の証明 : 背理法で証明

- ▶ $|T_u| \geq \sqrt{i}$ であると仮定
- ▶ H_u を T_u の都市を始点とする E_i の弧の終点全体の集合とする ($|H_u| = |T_u| \geq \sqrt{i}$)
- ▶ いままでの議論から, H_u の任意の 2 都市間の距離 $\geq \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}}$



補題 7.3 の証明 (9) : ここまでのまとめ

記法

- ▶ opt : 最適値
- ▶ $\tau = (\tau(1), \tau(2), \dots, \tau(n))$: 局所最適解
- ▶ $E_i = \left\{ (\tau(j), \tau(j+1)) \mid d(\tau(j), \tau(j+1)) > \frac{2 \cdot \text{opt}}{\sqrt{i}} \right\}$

証明したい補題 7.3

任意の $i \in \{1, \dots, n\}$ に対して, $|E_i| \leq i - 1$

- ▶ 背理法のための仮定 : ある i に対して, $|E_i| \geq i$
- ▶ 記法 : E_i の任意の弧 a の終点 $u = t(a)$ に対して, $T_u = \left\{ t(a') \mid a' \in E_i, d(u, t(a')) \leq \frac{\text{opt}}{\sqrt{i}} \right\}$
- ▶ 観察 7.4 : $|T_u| < \sqrt{i}$

補題 7.3 の証明 (11) : 部分集合の構成 (2)

観察 7.5

$$|Y| > \sqrt{i}$$

観察 7.5 の証明 :

- ▶ $|Y|$ はこの手続きの反復回数
- ▶ 第 2 ステップで除去される都市の数 $\leq |T_u| < \sqrt{i}$ (観察 7.4)
- ▶ $\therefore |X| = \text{第 2 ステップで除去される都市の数} \times \text{反復回数} < \sqrt{i} \cdot |Y|$
- ▶ 一方, $|X| = |E_i| \geq i$
- ▶ $\therefore i < \sqrt{i} \cdot |Y|$
- ▶ $\therefore |Y| > \sqrt{i}$ \square

補題 7.3 の証明 (12) : 部分集合の構成 (3)

構成した集合 Y の性質

- ▶ Y の任意の 2 都市の間の距離 $> \frac{\text{opt}}{\sqrt{i}}$
- ▶ $|Y| > \sqrt{i}$ (観察 7.5)

したがって、

$$Y \text{ 上の最短巡回路の長さ } > \sqrt{i} \cdot \frac{\text{opt}}{\sqrt{i}} = \text{opt}$$

したがって、補題 7.1 より、

$$\text{opt} = \text{全体の最短巡回路の長さ} \geq Y \text{ 上の最短巡回路の長さ} > \text{opt}$$

これは矛盾 □

補足：その他に知られていること (Chandra, Karloff, Tovey '99)

巡回セールスマン問題の 2opt 近傍において

距離が三角不等式を満たすとき

- ▶ 任意の入力に対して、局所探索法の近似比は $4\sqrt{n}$ 以下
- ▶ ある入力に対して、局所探索法の近似比は $\frac{1}{4}\sqrt{n}$ 以上

平面上の直線距離の場合

- ▶ 任意の入力に対して、局所探索法の近似比は $O(\log n)$
- ▶ ある入力に対して、局所探索法の近似比は $\Omega(\frac{\log n}{\log \log n})$

B. Chandra, H. Karloff, and C. Tovey, New results on the old k -opt algorithm for the traveling salesman problem. SIAM J. Comput. **28** (1999) 1998–2029.

局所探索法を評価する観点 (再掲)

局所探索法 (local search) : 一般的枠組み

- 許容解 $x \in S$ を適宜に見つける (この x を初期解と呼ぶ)
- 以下を繰り返し
 - ある $x' \in N(x)$ が存在して $f(x') < f(x)$ ならば
 $x \leftarrow x'$
 - そうでなければ繰り返しを終了
- 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) どれだけ近いのか?
- ▶ **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：計算量の評価

局所探索法 (local search) : 一般的枠組み

- 許容解 $x \in S$ を適宜に見つける (この x を初期解と呼ぶ) **時間 T_A**
- 以下を繰り返し **反復回数 k**
 - ある $x' \in N(x)$ が存在して $f(x') < f(x)$ ならば **時間 T_C**
 $x \leftarrow x'$
 - そうでなければ繰り返しを終了
- x を出力 (この x は N に関する局所最適解 (定理 1.1))

全体の計算時間

およそ $T_A + k \cdot T_C$

よって、局所探索法が多項式時間アルゴリズムになるには、次が必要

- ▶ T_A が多項式
- ▶ $k \cdot T_C$ が多項式

近似比の上界：三角不等式を満たす場合 (再掲)

今日の目標は次の定理を証明すること

定理 7.2 (Chandra, Karloff, Tovey '99)

巡回セールスマン問題において、
距離が三角不等式を満たす任意の入力に対して、
 2opt 近傍に関する局所探索法の近似比は $4\sqrt{n}$ 以下
ただし、 n は都市数

目次

- 局所探索法の評価観点：復習
- 近似比の上界：三角不等式を満たす場合
- 局所探索法の計算量：復習と予備的考察
- 今日のまとめ

局所探索法を評価する観点：計算量

局所探索法 (local search) : 一般的枠組み

- 許容解 $x \in S$ を適宜に見つける (この x を初期解と呼ぶ)
- 以下を繰り返し
 - ある $x' \in N(x)$ が存在して $f(x') < f(x)$ ならば
 $x \leftarrow x'$
 - そうでなければ繰り返しを終了
- x を出力 (この x は N に関する局所最適解 (定理 1.1))

計算量に影響を与える要因

- ▶ 反復回数 (局所操作回数)
- ▶ 反復継続条件の確認時間 ($\approx N(x)$ の要素数 (大きさ), $|N(x)|$)

局所探索法を評価する観点：計算量の評価

局所探索法 (local search) : 一般的枠組み

- 許容解 $x \in S$ を適宜に見つける (この x を初期解と呼ぶ) **時間 T_A**
- 以下を繰り返し **反復回数 k**
 - ある $x' \in N(x)$ が存在して $f(x') < f(x)$ ならば **時間 T_C**
 $x \leftarrow x'$
 - そうでなければ繰り返しを終了
- x を出力 (この x は N に関する局所最適解 (定理 1.1))

全体の計算時間

およそ $T_A + k \cdot T_C$

よって、局所探索法が最悪の場合指数時間かかるには、次が十分

- ▶ T_A が指数関数
- ▶ k が指数関数
- ▶ T_C が指数関数

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) 時間 T_A
- 1 以下を繰り返し 反復回数 k
 - 1 ある $x' \in N(x)$ が存在して $f(x') < f(x)$ ならば 時間 T_C
 $x \leftarrow x'$
 - 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))

ポイント 1

反復回数の評価

ポイント 2

反復継続条件の確認にかかる時間の評価
(近傍探索時間の評価)

目次

- 1 局所探索法の評価観点：復習
- 2 近似比の上界：三角不等式を満たす場合
- 3 局所探索法の計算量：復習と予備的考察
- 4 今日のまとめ

近傍探索時間の評価

- 8 計算量 (1) : 近傍探索の効率化 (12/13)
- 9 計算量 (2) : 大規模近傍 (12/20)

反復回数の評価

- 10 計算量 (3) : 反復回数の上界と下界 (1/10)

近似局所探索による反復回数の削減

- 11 計算量 (4) : 近似局所探索 (1/24)

局所探索法にこだわらない局所最適化の難しさ

- 12 計算量 (5) : クラス PLS と PLS 完全性 (1/31)
- 13 計算量 (6) : PLS 完全性 (2/7)