離散最適化基礎論 第 10 回
計算量 (3)：反復回数の上界と下界

岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2014 年 1 月 10 日

最終更新：2014 年 1 月 10 日　11:25

目次

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. 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：計算量の評価

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))

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

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

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))

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

局所探索法の計算量評価

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)

スケジュール

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)

注意

来週はセンター試験準備で一回休み

目次

近傍探索における移動戦略

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　←ここにあいまいさ
      $x \leftarrow x'$
   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

$f(x') < f(x)$ を満たす $x' \in N(x)$ が複数あるとき，どうするか？

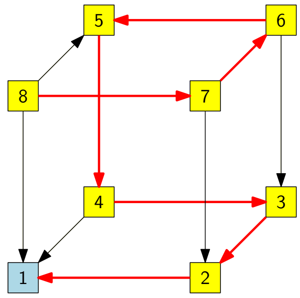
複数存在する候補の中のどれを選ぶのか，というバリエーションがある

その選び方が「近傍探索における移動戦略」である
(ピボット戦略，ピボット規則と呼ばれることもある)

移動戦略 (1)：即時移動

即時移動戦略

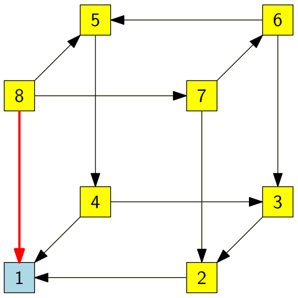
$x' \in N(x)$ で $f(x') < f(x)$ を満たすものが見つかったらすぐに，
その x' を選ぶ



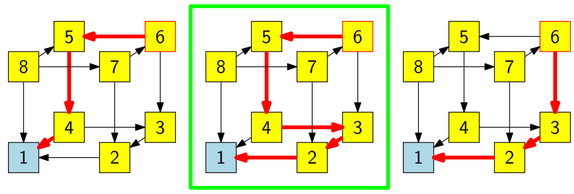
移動戦略 (2)：最良移動

最良移動戦略

$x' \in N(x)$ で $f(x') < f(x)$ を満たすものがある場合，
$f(x')$ が最も小さいものを選ぶ

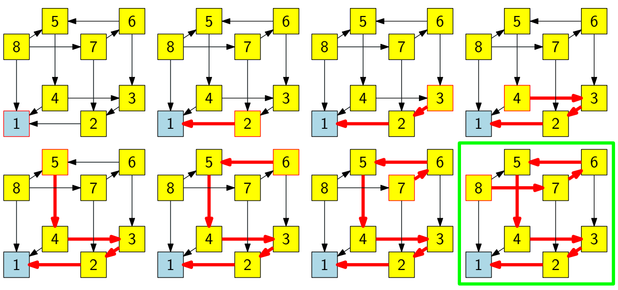


即時移動による最悪反復回数



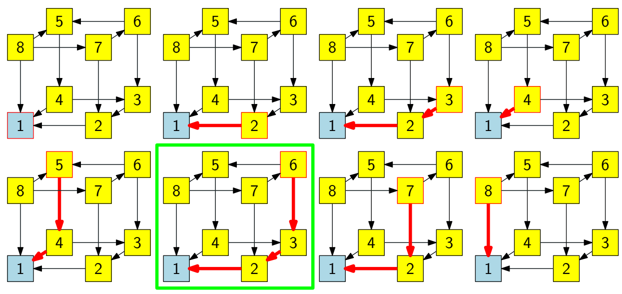
最悪反復回数を考えるとき，
即時移動は「都合の悪い移動」と同じ

即時移動による最悪反復回数 (続き)



即時移動による最悪反復回数 $= 7$

最良移動による最悪反復回数



最良移動による最悪反復回数 $= 3$

即時移動による最悪反復回数：もう少し形式的な定義

即時移動による最悪反復回数とは？

離散最適化問題

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

と近傍関数 $N\colon S \to 2^S$ に対して，即時移動による最悪反復回数は

$$\max \left\{ \ell \text{ の長さ} \;\middle|\; \begin{array}{l} x \in S, \\ z \text{ は } x \text{ からたどり着ける } N \text{ に関する局所最適解}, \\ \ell \text{ は } x \text{ から } z \text{ へ至る経路} \end{array} \right\}$$

「長さ」,「経路」,「たどり着ける」という語句は，
遷移グラフにおいて解釈するものとする

最良移動による最悪反復回数：もう少し形式的な定義

最良移動による最悪反復回数とは？

離散最適化問題

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

と近傍関数 $N\colon S \to 2^S$ に対して，最良移動による最悪反復回数は

$$\max \left\{ \ell \text{ の長さ} \;\middle|\; \begin{array}{l} x \in S, \\ z \text{ は } x \text{ からたどり着ける } N \text{ に関する局所最適解}, \\ \ell \text{ は } x \text{ から } z \text{ へ至る最良移動によって得られる経路} \end{array} \right\}$$

「長さ」,「経路」,「たどり着ける」という語句は，
遷移グラフにおいて解釈するものとする

最悪反復回数に関する観察

許容集合 S と目的関数 f を持つ離散最適化問題と任意の近傍関数を考える

観察 10.1 (演習問題)

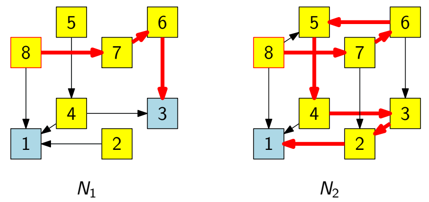
即時移動による最悪反復回数 $\geq$ 最良移動による最悪反復回数

観察 10.2 (演習問題)

近傍関数 N_1, N_2 が，任意の $x \in S$ に対して $N_1(x) \subseteq N_2(x)$ を満たす $\Rightarrow$

N_1 における即時移動による最悪反復回数 $\leq$ N_2 における即時移動による最悪反復回数

観察 10.2 に対する例



備忘録 (演習問題 1.8)

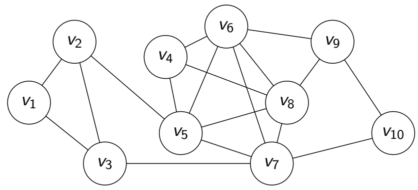
近傍関数 N_1, N_2 が，任意の $x \in S$ に対して $N_1(x) \subseteq N_2(x)$ を満たす $\Rightarrow$

N_2 に関する局所最適解は N_1 に関する局所最適解

目次

グラフ等分割問題

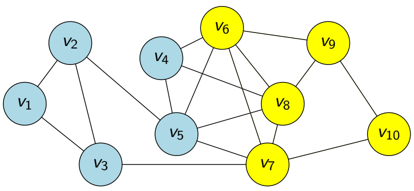
偶数個の頂点を持つ無向グラフ G



頂点集合 V，辺集合 E

グラフ等分割問題

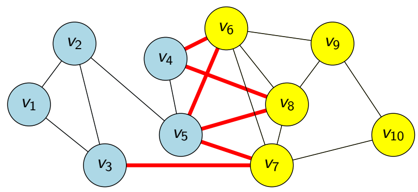
頂点集合 V を二等分割



V を A と B に分割

グラフ等分割問題

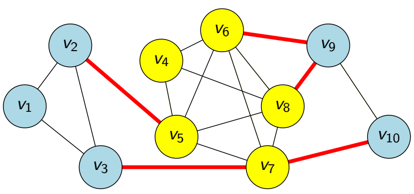
A と B を跨る 辺 の数を最小化



A と B を跨る 辺 の数 $= 6$

グラフ等分割問題

A と B を跨る 辺 の数を最小化



A と B を跨る 辺 の数 $= 5$

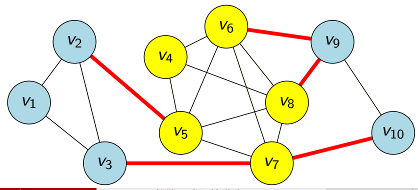
グラフ等分割問題

グラフ等分割問題

入力
- 無向グラフ G (頂点数は偶数)

許容解
- G の頂点集合の二等分割 $\{A, B\}$

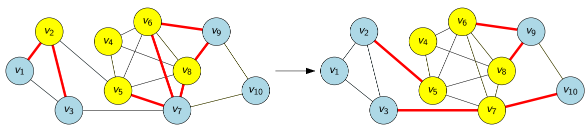
目的
- A と B を跨る辺の数の最小化



グラフ等分割問題に対する交換操作

グラフ等分割問題に対する交換操作

$\{A, B\}$：現在保持している二等分割
1. 頂点 $a \in A$ と頂点 $b \in B$ を選ぶ
2. a を A から B に動かし，b を B から A に動かす

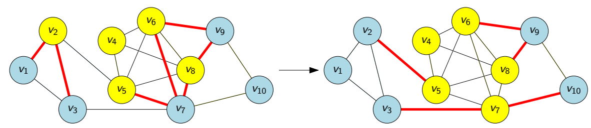


即時移動による最悪反復回数は？

m：入力グラフの辺数

命題 10.3

グラフ等分割問題に対する交換近傍において，
即時移動による最悪反復回数は高々 m である．



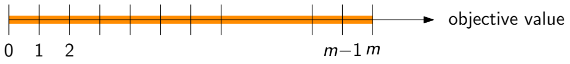
ポイント：交換操作によって，目的関数値は必ず 1 以上減る

命題 10.3 の証明

入力グラフの頂点集合に対して，任意の二等分割 $\{A, B\}$ を考える
- A と B を跨る辺の数 $\leq m$
- A と B を跨る辺の数 ≥ 0
- 交換操作による，目的関数値の減少幅 ≥ 1
- したがって，

$$\text{即時移動による最悪反復回数} \leq \frac{m-0}{1} = m$$

□

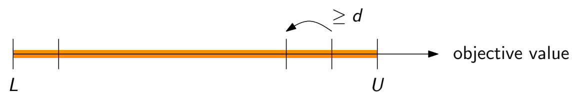


命題 10.3 の証明から見えること

即時移動による最悪反復回数を見積るときには次が重要
- 目的関数値の上界
- 目的関数値の下界
- 局所操作による，目的関数値の減少幅

同じように考えると…
- $L \leq$ 目的関数値 $\leq U$ が必ず成り立ち，
- 「局所操作による目的関数値の減少幅 $\geq d$」が必ず成り立つとき，

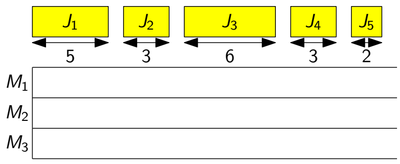
$$\text{即時移動による最悪反復回数} \leq \frac{U-L}{d}$$



目次

最終完了時刻最小化スケジューリング問題

m 個の同一な機械 $M_1, \ldots, M_m$，n 個のジョブ $J_1, \ldots, J_n$,
各ジョブ J_i の処理時間 p_i

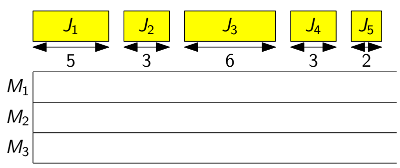


行うこと：すべてのジョブを機械で処理する

$$p_1 = 5, \ p_2 = 3, \ p_3 = 6, \ p_4 = 3, \ p_5 = 2$$

最終完了時刻最小化スケジューリング問題

決めること (スケジューリング，scheduling)
- 各ジョブをどの機械に割り当てるか？
- 各機械で，割り当てられたジョブをどの順に処理するか？



ジョブの中断はないものとする (non-preemptive scheduling)

最終完了時刻最小化スケジューリング問題

目的：最終完了時刻の最小化

このスケジュールにおける最終完了時刻 $= 7$

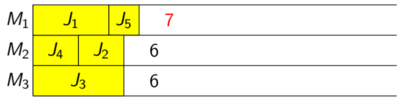
最終完了時刻最小化スケジューリング問題

最終完了時刻最小化スケジューリング問題

入力
- m 個の同一な機械 $M_1, \ldots, M_m$
- n 個のジョブ $J_1, \ldots, J_n$
- 各ジョブ J_i の処理時間 p_i

許容解
- スケジュール (機械へのジョブの割当，処理順)

目的
- 最終完了時刻の最小化



最終完了時刻最小化スケジューリング問題に対する移動操作

$m =$ 機械の台数，$n =$ ジョブの個数

最終完了時刻最小化スケジューリング問題に対する移動操作

$(A_1, A_2, \ldots, A_m)$：現在保持しているジョブの割当
($A_i =$ 機械 i に割り当てられたジョブの集合)

1. $i \in \{1, \ldots, m\}$ を 1 つ選び，$J \in A_i$ を 1 つ選ぶ
2. $i' \in \{1, \ldots, m\} - \{i\}$ を 1 つ選び，J を A_i から $A_{i'}$ に動かす

$$\begin{array}{l} A_1 = \{J_1, J_2, J_4\} \\ A_2 = \{J_3, J_6\} \\ A_3 = \{J_5, J_7\} \end{array} \longrightarrow \begin{array}{l} A_1 = \{J_1, J_4\} \\ A_2 = \{J_3, J_6\} \\ A_3 = \{J_2, J_5, J_7\} \end{array}$$

移動操作が導く近傍を移動近傍と呼ぶ (これは対称な近傍)

即時移動による最悪反復回数：上界

定理 10.4 (Brucker, Hurink, Werner '96)

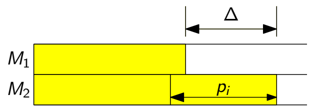
最終完了時刻最小化スケジューリング問題に対する移動近傍では，
機械の台数が 2 ならば，即時移動による最悪反復回数は $n(n+1)$ 以下

注意：グラフ等分割問題のときのような論法はそのまま使えなさそう
- 目的関数値の減少幅がとても小さい場合がある

なので，別の論法が必要になってくる

即時移動による最悪反復回数：上界 — 証明 (1)

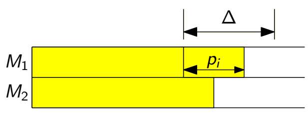
移動操作によって目的関数値が減少する場合はいつか？



2 つの機械の完了時刻の差を Δ とする
- ジョブ J_i の移動で目的関数値が減少 $\Leftrightarrow$ $p_i < \Delta$

即時移動による最悪反復回数：上界 — 証明 (2)

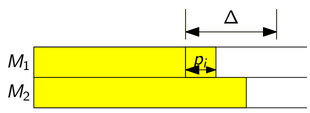
目的関数値が減少するとき，最終完了時刻を定める機械はどう変わるか？



ジョブ J_i の移動で目的関数値が減少 $\Leftrightarrow$ $p_i < \Delta$
- $p_i > \Delta/2 \Rightarrow$ 最終完了時刻を定める機械が変わる
(今後「大きな移動」と呼ぶ)

即時移動による最悪反復回数：上界 — 証明 (3)

目的関数値が減少するとき，最終完了時刻を定める機械はどう変わるか？



ジョブ J_i の移動で目的関数値が減少 $\Leftrightarrow$ $p_i < \Delta$
- $p_i \leq \Delta/2 \Rightarrow$ 最終完了時刻を定める機械は変わらない
(今後「小さな移動」と呼ぶ)

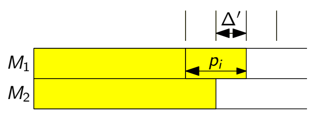
即時移動による最悪反復回数：上界 — 証明 (4)

ここまでのまとめ
- ジョブ J_i の移動で目的関数値が減少 $\Leftrightarrow$ $p_i < \Delta$
- $p_i > \Delta/2 \Rightarrow$ 最終完了時刻を定める機械が変わる
(今後「大きな移動」と呼ぶ)
- $p_i \leq \Delta/2 \Rightarrow$ 最終完了時刻を定める機械は変わらない
(今後「小さな移動」と呼ぶ)

今から行うこと
- 各ジョブに対して「大きな移動」と「小さな移動」の回数を数える

即時移動による最悪反復回数：上界 — 証明 (5)

各ジョブに対して大きな移動が何回あるか数える



主張 A

ジョブ J_i は，大きな移動を行った後，再び移動することはない

証明：大きな移動が 1 回あるとき，それ以後移動がないことを示す
- J_i を移動させるので，$p_i < \Delta$ が成り立つ
- よって，「移動後の Δ」を Δ' と書くと

$$\Delta' = 2p_i - \Delta < 2p_i - p_i = p_i$$

- つまり，$\Delta' < p_i$ で，Δ はずっと減少し続けるため，
J_i が「$p_i < \Delta$」という条件を再び満たすことはない □

即時移動による最悪反復回数：上界 — 証明 (6)

各ジョブに対して小さな移動が何回あるか数える

主張 B

J_i が小さな移動を 2 回行う ⇒ その間に別のジョブが大きな移動を行う

証明：J_i が小さな移動を 2 回行うとする

- 1 回目で M_2 から M_1 は，2 回目で M_1 から M_2 へ動くとする
- つまり，1 回目のとき「M_1 の完了時刻 $<$ M_2 の完了時刻」で
  2 回目のとき「M_1 の完了時刻 $>$ M_2 の完了時刻」である．
- つまり，最終完了時刻を定める機械がその間で変わっていることになり，そのためには，大きな移動が起きていないといけない □

即時移動による最悪反復回数：上界 — 証明 (7)

示したいこと

機械の台数が 2 ならば，即時移動による最悪反復回数は $n(n+1)$ 以下

背理法： 即時移動による最悪反復回数が $n(n+1)$ よりも大きいとする

- そのような局所探索では，あるジョブが $n+2$ 回以上移動している
- そのジョブを J_i とする
- 最後の移動以外は全部「小さな移動」でなくてはならない
  (主張 A より)
- つまり，最低 $n+1$ 回は小さな移動を行っている
- 小さな移動の間には他のジョブが大きな移動を行っている
  (主張 B より)
- したがって，J_i 以外のジョブが大きな移動を n 回以上行っている
- しかし，J_i 以外のジョブの数は $n-1$ であり，
  各ジョブは高々1 回しか大きな移動を行えない (主張 A より)
- これは矛盾 □

即時移動による最悪反復回数：上界 — まとめ

定理 10.4 (Brucker, Hurink, Werner '96)

最終完了時刻最小化スケジューリング問題に対する移動近傍では，
機械の台数が 2 ならば，即時移動による最悪反復回数は $n(n+1)$ 以下

- つまり，
  即時移動による最悪反復回数 $= O(n^2)$
- 観察 10.1 より
  最良移動による最悪反復回数 $= O(n^2)$
- 次にやること
  即時移動による最悪反復回数 $= \Omega(n^2)$
  つまり，ある例に対しては
  n^2 に比例する回数だけ反復を必要としてしまう

目次

即時移動による最悪反復回数：下界

定理 10.5 (Hurkens, Vredeveld '03)

最終完了時刻最小化スケジューリング問題に対する移動近傍では，
機械の台数が 2 のとき，即時移動による最悪反復回数が $\Omega(n^2)$ となる
ことを示す入力が存在する

証明の方針：自然数 $q \geq 1$ に対して，$n = 3q+1$ の場合のみを考える

- つまり，$3q+1$ 個のジョブを持つ入力を考える
- その入力に対して，即時移動による最悪反復回数が $q(q+1)/2$ 以上になることを示す
- 行うことは，q に関する帰納法

注意：最悪反復回数を考えるとき，即時移動は「都合の悪い移動」と同じ

即時移動による最悪反復回数：下界 — 証明 (1)

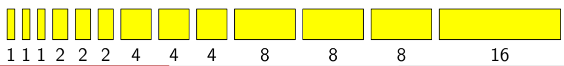
ジョブはその処理時間を書くことで表すとする

考えるジョブの集合

- 処理時間 1 のジョブ：3 個
- 処理時間 2 のジョブ：3 個
- ...
- 処理時間 2^i のジョブ：3 個
- ...
- 処理時間 2^{q-1} のジョブ：3 個
- 処理時間 2^q のジョブ：1 個

ジョブの総数 $= 3q+1$

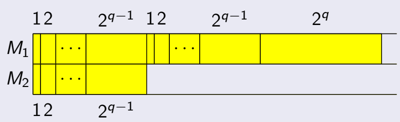
$q = 4$ のとき，$n = 13$



即時移動による最悪反復回数：下界 — 証明 (2)

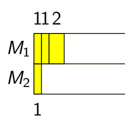
q に関する帰納法で証明すること

初期解が次のとき



即時移動による反復回数が $q(q+1)/2$ 以上になる

証明：$q = 1$ のとき，初期解は右のもの

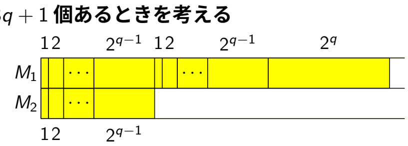


- M_1 からジョブを 1 つ M_2 に動かすと，
  局所最適解が得られる
- よって，反復回数は 1

即時移動による最悪反復回数：下界 — 証明 (3)

ジョブが $3(q-1)+1$ 個あるときに，これが正しいと仮定する

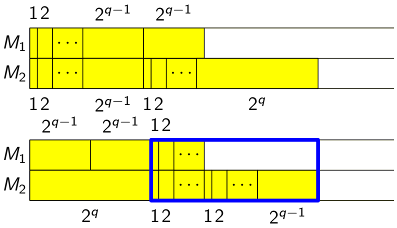
- ジョブが $3q+1$ 個あるときを考える



- 次のような移動操作の列によって，局所最適解を得る
  1. M_1 からジョブ $1, 2, \ldots, 2^{q-2}$ を順に移動させる
  2. そして，M_1 からジョブ 2^q を移動させる

即時移動による最悪反復回数：下界 — 証明 (4)

- 次のような移動操作の列によって，局所最適解を得る



1. M_1 からジョブ $1, 2, \ldots, 2^{q-2}$ を順に移動させる
2. そして，M_1 からジョブ 2^q を移動させる (並べ替えてみる)
3. 青色 の部分はジョブ数が $3(q-1)+1$ 個のときの初期解なので，そこから局所最適解を得るために最悪 $(q-1)q/2$ 回の移動操作を行う (帰納法の仮定)

- 移動操作回数の合計 $= (q-1) + 1 + (q-1)q/2 = q(q+1)/2$ □

即時移動による最悪反復回数：下界 (再掲)

定理 10.5 (Hurkens, Vredeveld '03)

最終完了時刻最小化スケジューリング問題に対する移動近傍では，機械の台数が 2 のとき，即時移動による最悪反復回数が $\Omega(n^2)$ となることを示す入力が存在する

証明の方針：自然数 $q \geq 1$ に対して，$n = 3q + 1$ の場合のみを考える

- つまり，$3q + 1$ 個のジョブを持つ入力を考える
- その入力に対して，即時移動による最悪反復回数が $q(q+1)/2$ 以上になることを示す
- 行うことは，q に関する帰納法

注意：最悪反復回数を考えるとき，即時移動は「都合の悪い移動」と同じ

目次

今日のまとめ

今日のまとめ

移動戦略

- 即時移動
- 最良移動

最悪反復回数

- 最良移動の場合 $\leq$ 即時移動の場合

具体例

- グラフ等分割問題と交換近傍
- 最終完了時刻最小化スケジューリング問題と移動近傍

下界の証明：都合の悪い例の構成による

巡回セールスマン問題と 2opt 近傍

$n =$ 都市数

- 即時移動による最悪反復回数が $2^{(n-2)/2}$ 以上となる例が知られている (Luecker '76)
- 2 次元平面上の点がユークリッド距離を持つ場合でも，即時移動による最悪反復回数が $2^{n/16+4} - 22$ 以上となる例が知られている (Englert, Röglin, Vöcking '14)

未解決問題

最良移動による最悪反復回数は n に関する多項式になるのか？