離散最適化基礎論 第 11 回
近似局所探索

岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2014 年 1 月 24 日

最終更新：2014 年 1 月 24 日　17:30

期末試験

- 日時：2 月 14 日 (金) 14:40–16:10
- 教室：西 5 号館 214 号室 (いつもの講義の場所)
- 出題形式
  - 演習問題と同じ形式の問題を 6 題出題する
  - その中の 4 題は演習問題として提示されたものと同一である
  - 全問に解答する
- 配点：1 題 20 点満点，計 120 点満点
- 成績において，100 点以上は 100 点で打ち切り
- 時間：90 分 (おそらく)
- 持ち込み：A4 用紙 1 枚分 (裏表自筆書き込み) のみ可

注意：2 月 7 日の内容は出題しない

レポート
レポート提出締切は 2 月 7 日の講義 (返却法は web ページで連絡)

目次

1. 前回までの復習
2. 近似局所探索：予備的考察
3. 近似局所最適解と近似局所探索法
4. 近似局所探索法の反復回数
5. 今日のまとめ

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？

計算量 (反復回数)：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)

つまり
巡回セールスマン問題の 2opt 近傍に関する局所探索法の実行は
悪い場合には都市数に対して指数関数的な反復回数が必要となる

問題点とその克服

問題点
巡回セールスマン問題の 2opt 近傍に関する局所探索法の実行は
悪い場合には都市数に対して指数関数的な反復回数が必要となる

これを克服したい $\rightsquigarrow$ 何かしらの妥協が必要となる

克服法
局所最適解を見つけるとは限らないが，
局所最適解に近いものを見つけるように「何か」を変更し，
反復回数が小さくなるようにする

「何か」とは
- 目的関数
- アルゴリズム

これが「近似局所探索」の基本的な考え方

目次

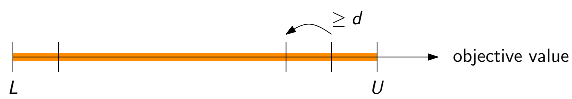
1. 前回までの復習
2. 近似局所探索：予備的考察
3. 近似局所最適解と近似局所探索法
4. 近似局所探索法の反復回数
5. 今日のまとめ

前回の復習：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，

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

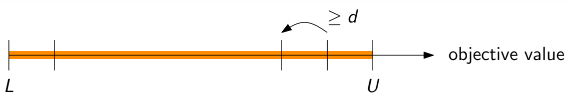


最悪反復回数が大きくなる理由は？

同じように考えると…（再掲）

- $L \leq$ 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，

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



最悪反復回数を小さくするには次を満たせば十分

- $U-L$ が小さい
- d が大きい

⇝ そうなるように目的関数を変更してみる

距離を丸める

次のように変更してみると…

- $0 < c(i,j) < 3 \Rightarrow c'(i,j) = 1$
- $3 \leq c(i,j) \quad\quad \Rightarrow c'(i,j) = 3$

$$C = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\end{array} & \begin{bmatrix}0&4&2&3&3\\4&0&5&4&5\\2&5&0&2&2\\3&4&2&0&1\\3&5&2&1&0\end{bmatrix}\end{array} \rightsquigarrow C' = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\end{array} & \begin{bmatrix}0&3&1&3&3\\3&0&3&3&3\\1&3&0&1&1\\3&3&1&0&1\\3&3&1&1&0\end{bmatrix}\end{array}$$

このように変更して，巡回セールスマン問題を解いてみる

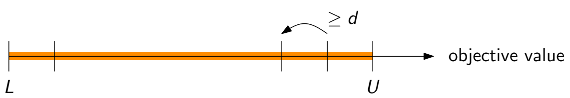
最悪反復回数の評価

距離として現れる値が 1 と 3 しかないので，(都市数 $= n$ のとき)

- 目的関数値の上界：$3n$
- 目的関数値の下界：n
- 局所操作による目的関数値の減少幅：2 以上

したがって，

$$\text{即時移動による最悪反復回数} \leq \frac{3n-n}{2} = n$$



即時移動による最悪反復回数が大幅に減った (n に関する多項式)

距離を丸める：問題点

次のように変更してみると…

- $0 < c(i,j) < 3 \Rightarrow c'(i,j) = 1$
- $3 \leq c(i,j) \quad\quad \Rightarrow c'(i,j) = 3$

$$C = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\end{array} & \begin{bmatrix}0&4&2&3&3\\4&0&5&4&5\\2&5&0&2&2\\3&4&2&0&1\\3&5&2&1&0\end{bmatrix}\end{array} \rightsquigarrow C' = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\end{array} & \begin{bmatrix}0&3&1&3&3\\3&0&3&3&3\\1&3&0&1&1\\3&3&1&0&1\\3&3&1&1&0\end{bmatrix}\end{array}$$

問題点

C と C' の関係がよく分からない

距離を丸める：別の方法

次のように変更してみると…

- $0 < c(i,j) \leq 2 \Rightarrow c'(i,j) = 2$
- $2 < c(i,j) \leq 4 \Rightarrow c'(i,j) = 4$
- $4 < c(i,j) \leq 6 \Rightarrow c'(i,j) = 6$

$$C = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\end{array} & \begin{bmatrix}0&4&2&3&3\\4&0&5&4&5\\2&5&0&2&2\\3&4&2&0&1\\3&5&2&1&0\end{bmatrix}\end{array} \rightsquigarrow C' = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\end{array} & \begin{bmatrix}0&4&2&4&4\\4&0&6&4&6\\2&6&0&2&2\\4&4&2&0&2\\4&6&2&2&0\end{bmatrix}\end{array}$$

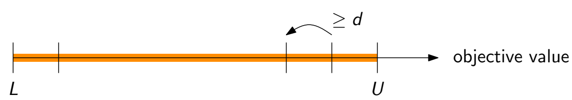
最悪反復回数の評価

距離として現れる値が $2, 4, 6$ しかないので，(都市数 $= n$ のとき)

- 目的関数値の上界：$6n$
- 目的関数値の下界：$2n$
- 局所操作による目的関数値の減少幅：2 以上

したがって，

$$\text{即時移動による最悪反復回数} \leq \frac{6n-2n}{2} = 2n$$



即時移動による最悪反復回数は小さいまま (n に関する多項式)

距離を丸める：別の方法 — 目的関数値の評価

τ：任意の許容解 (巡回路)

- C における τ の目的関数値 $f(\tau)$ と C' における τ の目的関数値 $f'(\tau)$ を比較したい
  - 任意の i,j に対して，$c'_{i,j} - 2 < c_{i,j} \leq c'_{i,j}$
  - よって，

$$f'(\tau) - 2n < f(\tau) \leq f'(\tau)$$

- つまり，τ の良さが C においてもある程度保証できた

$$C = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\end{array} & \begin{bmatrix}0&4&2&3&3\\4&0&5&4&5\\2&5&0&2&2\\3&4&2&0&1\\3&5&2&1&0\end{bmatrix}\end{array} \rightsquigarrow C' = \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc}1&2&3&4&5\end{array}\\ \begin{array}{c}1\\2\\3\\4\\5\end{array} & \begin{bmatrix}0&4&2&4&4\\4&0&6&4&6\\2&6&0&2&2\\4&4&2&0&2\\4&6&2&2&0\end{bmatrix}\end{array}$$

距離を丸める：別の方法 — 目的関数値の評価 (2)

τ：任意の許容解 (巡回路)，N：近傍関数

- C における τ の目的関数値 $f(\tau)$ と C' における τ の目的関数値 $f'(\tau)$ を比較したい
  - 任意の i,j に対して，$c'_{i,j} - 2 < c_{i,j} \leq c'_{i,j}$
  - よって，

$$f'(\tau) - 2n < f(\tau) \leq f'(\tau)$$

- 特に，τ' が C' を使ったときの N に関する局所最適解であるとき，

$$\text{任意の } \tilde{\tau} \in N(\tau') \text{ に対して，} \quad f'(\tau') \leq f'(\tilde{\tau})$$

  が成り立つので，

$$\text{任意の } \tilde{\tau} \in N(\tau') \text{ に対して，} \quad f(\tau') \leq f'(\tau') \leq f'(\tilde{\tau}) \leq f(\tilde{\tau}) + 2n$$

- つまり，τ' は C を使ったときの N に関する局所最適解っぽい

⇝「近似局所探索」は「近似局所最適解」を見つける

目次

1. 前回までの復習
2. 近似局所探索：予備的考察
3. 近似局所最適解と近似局所探索法
4. 近似局所探索法の反復回数
5. 今日のまとめ

近似局所最適解

実数 $\varepsilon > 0$

ε 局所最適解 (ε-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 ε 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，$f(x) \leq (1+\varepsilon) f(x')$

注：x が局所最適解 $\Rightarrow$ x は ε 局所最適解 (ただし，ε は任意の正実数)

考えることとそのための基本方針

考えること

巡回セールスマン問題の 2opt 近傍に関する ε 局所最適解を見つけるアルゴリズム

そのとき，反復回数が小さくなるようにしたい

基本方針

局所探索の繰り返し
- 距離の丸め
- 丸め幅の指数関数的減少

$\rightsquigarrow$ 近似局所探索法

近似局所探索法 (Orlin, Punnen, Schulz '04)

実数 $\varepsilon > 0$：予め決めておく

近似局所探索法 (approximate local search)

0. 巡回路 τ を適当に見つける (初期解)
1. $\tau_1 \leftarrow \tau$, $i \leftarrow 1$
2. 以下を繰り返し
   1. $\tau \leftarrow \tau_i$, $q \leftarrow \dfrac{f(\tau_i)\varepsilon}{2n(1+\varepsilon)}$, $C^{(i)} \leftarrow \left\lceil \dfrac{C}{q} \right\rceil q$ (成分ごと)
   2. 以下を繰り返し
      a. ある $\tau' \in N(\tau)$ が存在して $f_i(\tau') < f_i(\tau) \Rightarrow \tau \leftarrow \tau'$
      b. そうでなければ繰り返しを終了し，3へ行く
      c. $f(\tau) \leq f(\tau_i)/2 \Rightarrow \tau_{i+1} \leftarrow \tau$，$i \leftarrow i+1$ として 1に戻る
3. τ を出力

距離行列 $C^{(i)}$ から得られる目的関数を f_i と書く

近似局所探索法：注目点 (1)

$C^{(i)}$ の成分は必ず $0, q, 2q, 3q, 4q, \ldots$ になり，$C \leq C^{(i)}$ (成分ごとに)

近似局所探索法 (approximate local search)

0. 巡回路 τ を適当に見つける (初期解)
1. $\tau_1 \leftarrow \tau$, $i \leftarrow 1$
2. 以下を繰り返し
   1. $\tau \leftarrow \tau_i$, $q \leftarrow \dfrac{f(\tau_i)\varepsilon}{2n(1+\varepsilon)}$, $C^{(i)} \leftarrow \left\lceil \dfrac{C}{q} \right\rceil q$ (成分ごと)
   2. 以下を繰り返し
      a. ある $\tau' \in N(\tau)$ が存在して $f_i(\tau') < f_i(\tau) \Rightarrow \tau \leftarrow \tau'$
      b. そうでなければ繰り返しを終了し，3へ行く
      c. $f(\tau) \leq f(\tau_i)/2 \Rightarrow \tau_{i+1} \leftarrow \tau$，$i \leftarrow i+1$ として 1に戻る
3. τ を出力

距離行列 $C^{(i)}$ から得られる目的関数を f_i と書く

近似局所探索法：注目点 (2)

中身は普通の局所探索法と同じ

近似局所探索法 (approximate local search)

0. 巡回路 τ を適当に見つける (初期解)
1. $\tau_1 \leftarrow \tau$, $i \leftarrow 1$
2. 以下を繰り返し
   1. $\tau \leftarrow \tau_i$, $q \leftarrow \dfrac{f(\tau_i)\varepsilon}{2n(1+\varepsilon)}$, $C^{(i)} \leftarrow \left\lceil \dfrac{C}{q} \right\rceil q$ (成分ごと)
   2. 以下を繰り返し
      a. ある $\tau' \in N(\tau)$ が存在して $f_i(\tau') < f_i(\tau) \Rightarrow \tau \leftarrow \tau'$
      b. そうでなければ繰り返しを終了し，3へ行く
      c. $f(\tau) \leq f(\tau_i)/2 \Rightarrow \tau_{i+1} \leftarrow \tau$，$i \leftarrow i+1$ として 1に戻る
3. τ を出力

距離行列 $C^{(i)}$ から得られる目的関数を f_i と書く

近似局所探索法：注目点 (3)

$f(\tau)$ が小さくなったら，$C^{(i)}$ を更新する

近似局所探索法 (approximate local search)

0. 巡回路 τ を適当に見つける (初期解)
1. $\tau_1 \leftarrow \tau$, $i \leftarrow 1$
2. 以下を繰り返し
   1. $\tau \leftarrow \tau_i$, $q \leftarrow \dfrac{f(\tau_i)\varepsilon}{2n(1+\varepsilon)}$, $C^{(i)} \leftarrow \left\lceil \dfrac{C}{q} \right\rceil q$ (成分ごと)
   2. 以下を繰り返し
      a. ある $\tau' \in N(\tau)$ が存在して $f_i(\tau') < f_i(\tau) \Rightarrow \tau \leftarrow \tau'$
      b. そうでなければ繰り返しを終了し，3へ行く
      c. $f(\tau) \leq f(\tau_i)/2 \Rightarrow \tau_{i+1} \leftarrow \tau$，$i \leftarrow i+1$ として 1に戻る
3. τ を出力

距離行列 $C^{(i)}$ から得られる目的関数を f_i と書く

近似局所探索法の出力は近似局所最適解

定理 11.1

近似局所探索法が出力する巡回路は
2opt 近傍に対する ε 局所最適解である

証明のために重要な性質：アルゴリズム停止時の i を考える

1. $f(\tau) > f(\tau_i)/2$
2. 任意の $\tilde{\tau} \in N(\tau)$ に対して，$f_i(\tau) \leq f_i(\tilde{\tau})$
3. 任意の巡回路 τ' に対して，$f(\tau') \leq f_i(\tau') \leq f(\tau') + qn$
   - $\because C \leq C^{(i)} \leq C + qJ$　(J はすべての成分が 1 である行列)

近似局所探索法の出力は近似局所最適解：証明

定理 11.1
近似局所探索法が出力する巡回路は
2opt 近傍に対する ε 局所最適解である

証明：停止時の i を考えると，任意の $\tilde{\tau} \in N(\tau)$ に対して

$$\begin{aligned} f(\tau) \le f_i(\tau) \le f_i(\tilde{\tau}) &\le f(\tilde{\tau}) + qn \\ &= f(\tilde{\tau}) + \frac{f(\tau_i)\varepsilon}{2n(1+\varepsilon)} n \\ &= f(\tilde{\tau}) + \frac{\varepsilon}{1+\varepsilon}\frac{f(\tau_i)}{2} \\ &< f(\tilde{\tau}) + \frac{\varepsilon}{1+\varepsilon} f(\tau) \end{aligned}$$

よって，$f(\tau) < (1+\varepsilon) f(\tilde{\tau})$ □

目次

1. 前回までの復習
2. 近似局所探索：予備的考察
3. 近似局所最適解と近似局所探索法
4. **近似局所探索法の反復回数**
5. 今日のまとめ

近似局所探索法の反復回数は多項式

定理 11.2
巡回セールスマン問題における 2opt 近傍を考えたとき，
近似局所探索法における即時移動による最悪反復回数は
$O(\frac{1}{\varepsilon} n^3 \log n)$ である

証明：「内側」の反復回数と「外側」の反復回数を分けて考える

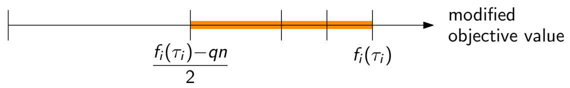
証明すること
- 外側の反復回数：$O(n^2 \log n)$
- 各外側の反復における
内側の反復回数：$O(\frac{1}{\varepsilon} n)$

この 2 つを証明できれば，全体の証明が終わる

近似局所探索法の反復回数：内側の反復回数 (1)

証明すること
各外側の反復における内側の反復回数：$O(\frac{1}{\varepsilon} n)$

第 i 回目の外側の反復を考える
- 内側の反復開始時の目的関数値は $f_i(\tau_i)$
- 内側の反復は「$f(\tau) \le f(\tau_i)/2$」が満たされた時点で終了
- $f_i(\tau) \le \frac{f_i(\tau_i) - qn}{2}$ が満たされれば，$f(\tau) \le f(\tau_i)/2$ も満たされる
  - $\because f(\tau) \le f_i(\tau) \le \frac{f_i(\tau_i) - qn}{2} \le \frac{(f(\tau_i) + qn) - qn}{2} = f(\tau_i)/2$
- つまり，内側の反復における目的関数値は常に $\frac{f_i(\tau_i) - qn}{2}$ 以上

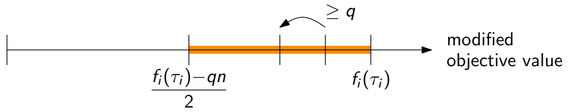


近似局所探索法の反復回数：内側の反復回数 (2)

証明すること
各外側の反復における内側の反復回数：$O(\frac{1}{\varepsilon} n)$

第 i 回目の外側の反復を考える
- 内側の反復 1 回ごとに，目的関数値は q 以上減少する
- ゆえに，反復回数は高々

$$\begin{aligned} \frac{f_i(\tau_i) - \frac{f_i(\tau_i) - qn}{2}}{q} = \frac{f_i(\tau_i) + qn}{2q} &\le \frac{(f(\tau_i) + qn) + qn}{2q} \\ &= \frac{f(\tau_i)}{2q} + n = \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} n + n = O(n/\varepsilon) \end{aligned}$$



近似局所探索法の反復回数：外側の反復回数 (1)

証明すること
各外側の反復における外側の反復回数：$O(n^2 \log n)$

外側の反復回数を p として，$a_i = f(\tau_i)$ とおくと，

$$a_1 > a_2 > a_3 > \cdots > a_p$$

という列が得られる

性質 1
任意の i に対して，$a_i \ge 2a_{i+1}$

アルゴリズムの第cステップから分かる

近似局所探索法の反復回数：外側の反復回数 (2)

- 距離行列の各成分を大きい方から並べて

$$b_1 \ge b_2 \ge b_3 \cdots \ge b_{n^2}$$

と書く

性質 2

$$a_1 \le b_1 n$$

- このとき，$k = \lceil \log_2 n \rceil + 2$ とすると，$2^{k-1} > n$ となり，

$$2^{k-1} a_k \le a_1 \le b_1 n$$

なので，

$$a_k \le \frac{b_1 n}{2^{k-1}} < \frac{b_1 n}{n} = b_1$$

が得られる ($\therefore a_k < b_1$)
- すなわち，a_k を与える巡回路には b_1 という距離が出てこない

近似局所探索法の反復回数：外側の反復回数 (3)

- a_k を与える巡回路には b_1 という距離が出てこないから，

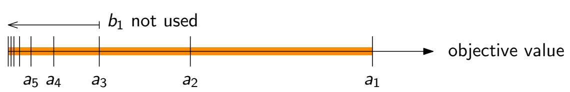
性質 3

$$a_k \le b_2 n$$

- 前ページと同じ考察を行うと，

$$a_{2k} < b_2$$

が得られる
- つまり，a_{2k} を与える巡回路には b_2 という距離が出てこない



近似局所探索法の反復回数：外側の反復回数 (4)

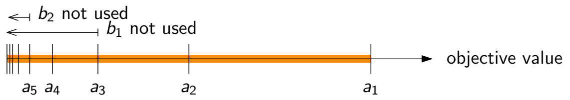
- 同様に進めると

性質 4

任意の自然数 d に対して

a_{dk} を与える巡回路には b_d という距離が出てこない

- つまり，$d = n^2$ となるような a_{dk} は存在しない
- $\therefore p \leq n^2 k = O(n^2 \log n)$ $\square$



目次

1 前回までの復習
2 近似局所探索：予備的考察
3 近似局所最適解と近似局所探索法
4 近似局所探索法の反復回数
5 今日のまとめ

今日のまとめ

今日のまとめ

- 近似局所最適解と近似局所探索法
- 近似局所探索法の反復回数の評価

近似局所探索は巡回セールスマン問題 (2opt 近傍) のみでなく
様々な問題に対して，同様に適用できる