離散最適化基礎論 第 3 回
近傍関数と近傍グラフ

岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2013 年 10 月 25 日

最終更新：2013 年 10 月 27 日　08:25

目次

1. 離散最適化問題と近傍関数：復習
2. 近傍グラフ
3. 遷移グラフ
4. 局所探索法を評価する観点
5. 近傍の大きさ
6. 今日のまとめ

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

最小化	$f(x)$
条　件	$x \in S$

の**最適解**とは 許容解 $x \in S$ で，次を満たすもののこと

$$\text{任意の許容解 } x' \in S \text{ に対して，} f(x) \le f(x')$$

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

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

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

局所探索法

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

局所最適解

局所最適解 (local optimal solution) とは？

離散最適化問題

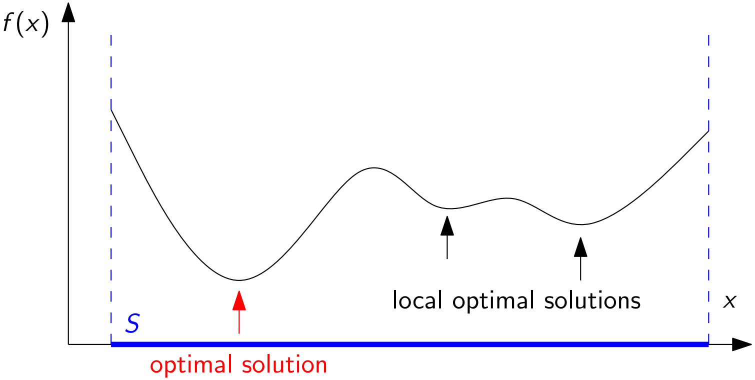
$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条　件} & x \in S \end{array}$$

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

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

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

連続最適化での局所最適解のイメージ



今日の内容

離散最適化での局所最適解のイメージをつかむ

目次

1. 離散最適化問題と近傍関数：復習
2. 近傍グラフ
3. 遷移グラフ
4. 局所探索法を評価する観点
5. 近傍の大きさ
6. 今日のまとめ

近傍グラフ：定義

近傍グラフ (neighborhood graph) とは？

離散最適化問題

最小化	$f(x)$
条　件	$x \in S$

とそれに対する近傍関数 $N\colon S \to 2^S$ を考えたとき，
その**近傍グラフ**とは以下で定義される 有向グラフ

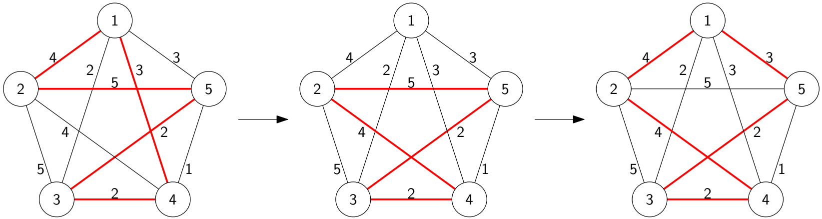
- 頂点集合は S (各許容解が頂点となる)
- 許容解 x から許容解 y へ向かう孤が存在 $\Leftrightarrow$ $y \in N(x)$

巡回セールスマン問題に対する頂点挿入操作

巡回セールスマン問題に対する頂点挿入操作

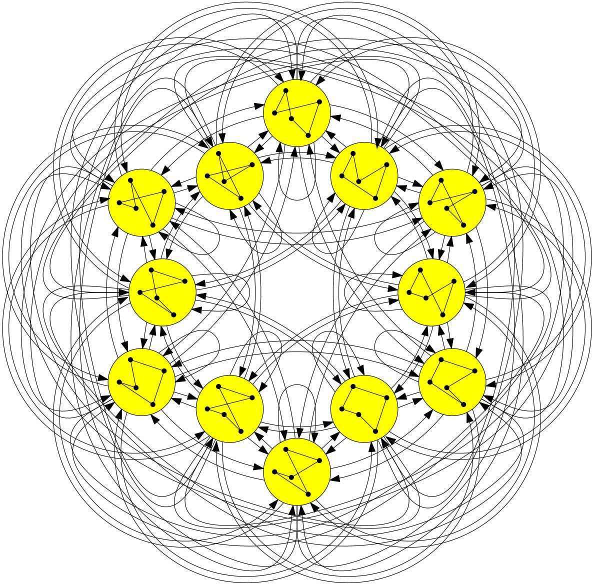
τ：現在保持している巡回路

1. 頂点を 1 つ選び，τ においてその頂点をとばす
2. とばした頂点をどこかに挿入して，新たな巡回路を得る

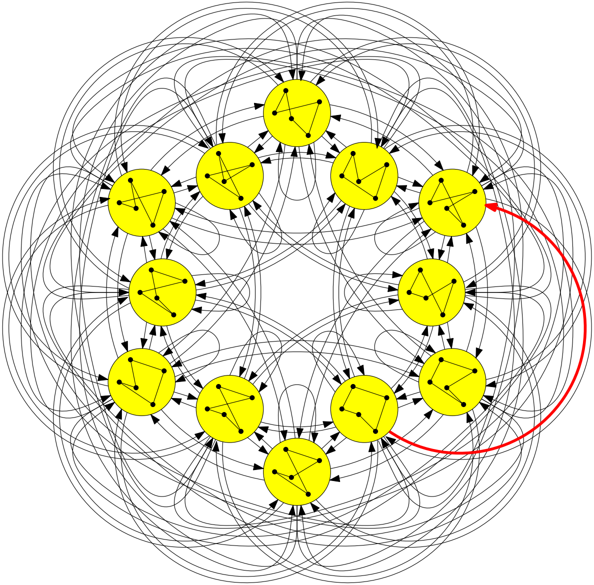


頂点挿入操作が導く近傍を頂点挿入近傍と呼ぶ．

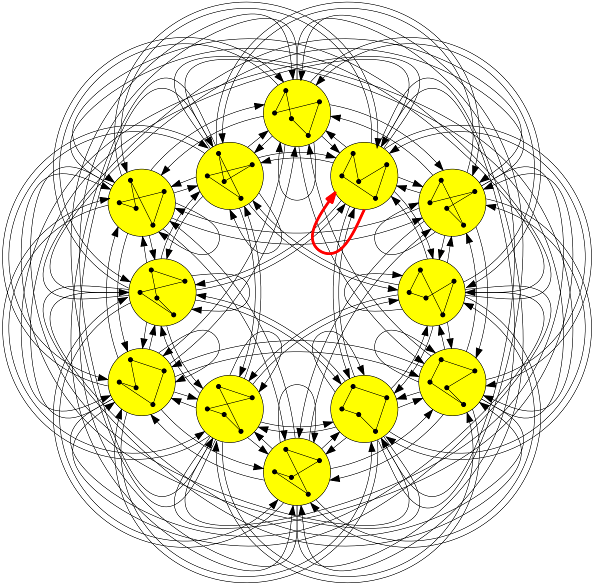
頂点挿入近傍に関する近傍グラフ



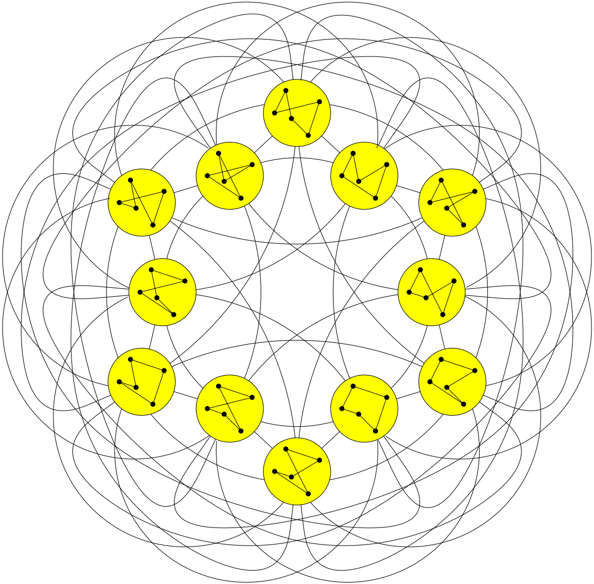
頂点挿入近傍に関する近傍グラフ



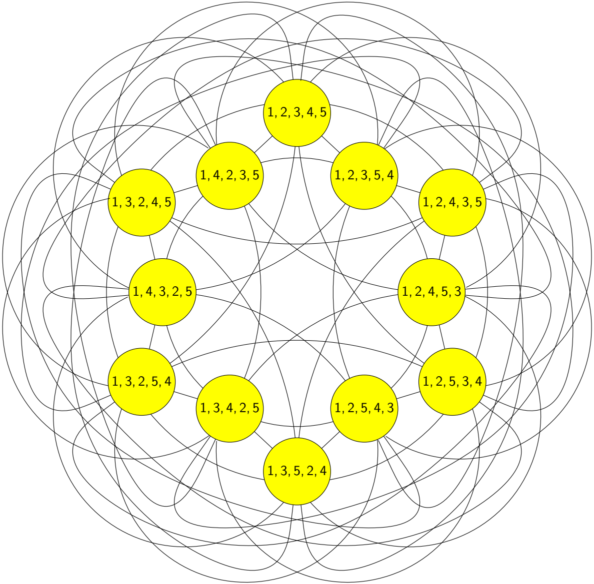
頂点挿入近傍に関する近傍グラフ



頂点挿入近傍に関する近傍グラフ：対称性を考慮した描画



頂点挿入近傍に関する近傍グラフ：対称性を考慮した描画



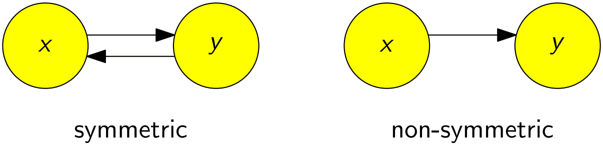
対称な近傍関数

対称な近傍関数とは？

近傍関数 $N\colon S \to 2^S$ が**対称** (symmetric) であるとは，

$$y \in N(x) \quad \Rightarrow \quad x \in N(y)$$

が任意の $x, y \in S$ に対して成り立つことである．

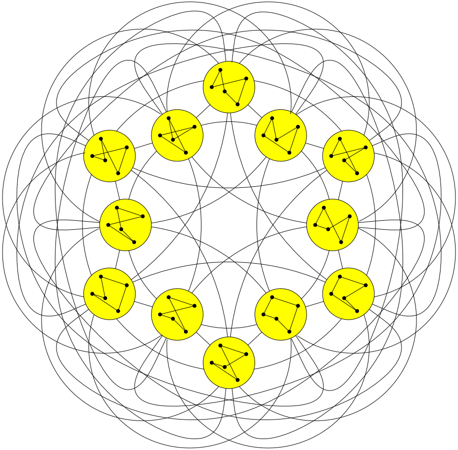


- この講義で扱う近傍関数は対称なものに限る (はず)
- 近傍関数が対称であるとき，近傍グラフを無向グラフとして描いてよい

近傍グラフに関する注意

注意

近傍グラフは目的関数 f に依存しない



目次

1. 離散最適化問題と近傍関数：復習
2. 近傍グラフ
3. **遷移グラフ**
4. 局所探索法を評価する観点
5. 近傍の大きさ
6. 今日のまとめ

遷移グラフ：定義

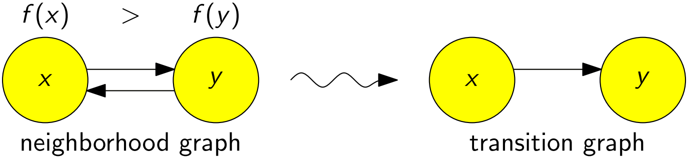
遷移グラフ (transition graph) とは？

離散最適化問題

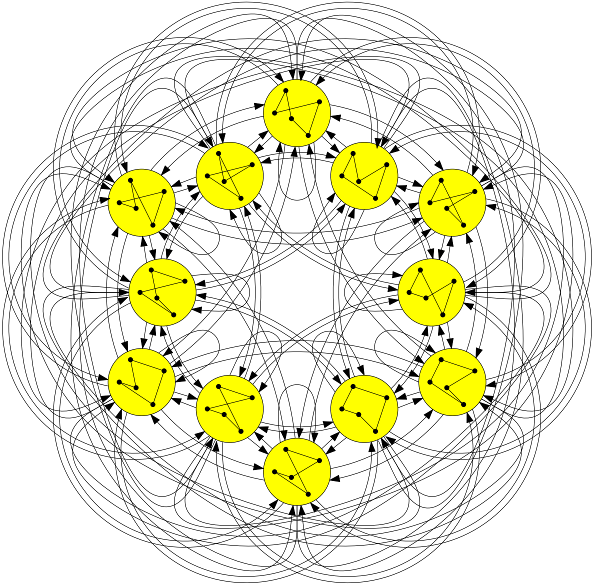
$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条　件} & x \in S \end{array}$$

とそれに対する近傍関数 $N\colon S \to 2^S$ を考えたとき，
その**遷移グラフ**とは以下で定義される <u>有向グラフ</u>

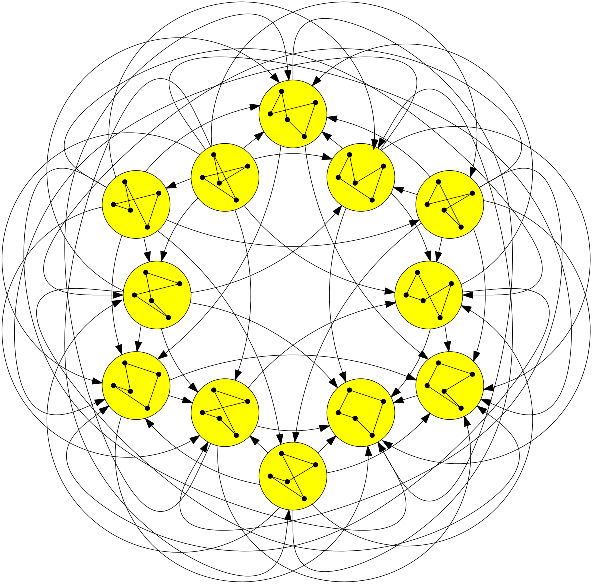
- 頂点集合は S (各許容解が頂点となる)
- 許容解 x から許容解 y へ向かう孤が存在
  $\Leftrightarrow y \in N(x)$ かつ $f(y) < f(x)$



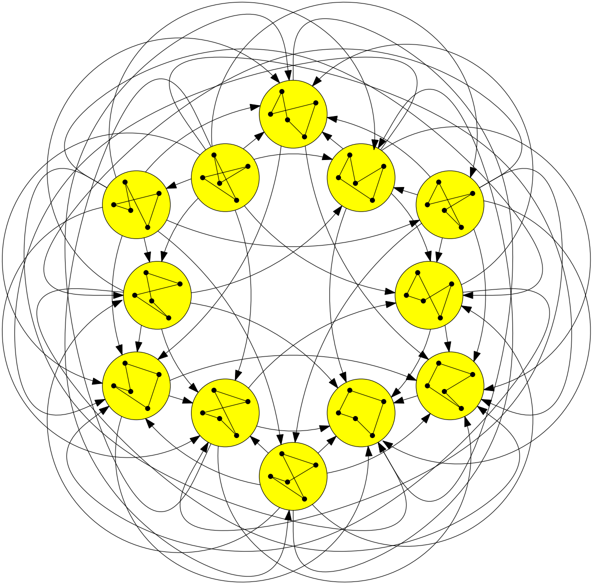
頂点挿入近傍に関する遷移グラフ



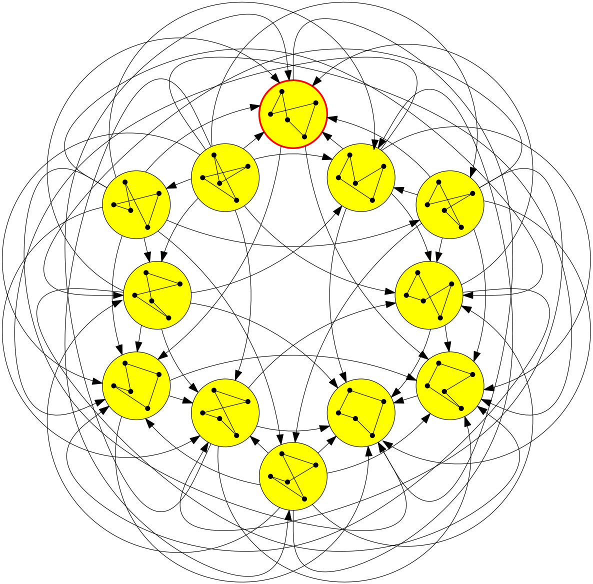
頂点挿入近傍に関する遷移グラフ



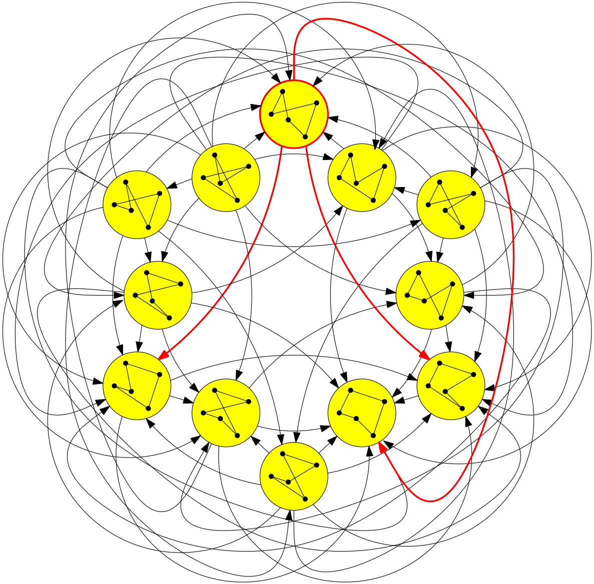
遷移グラフでみる局所探索法



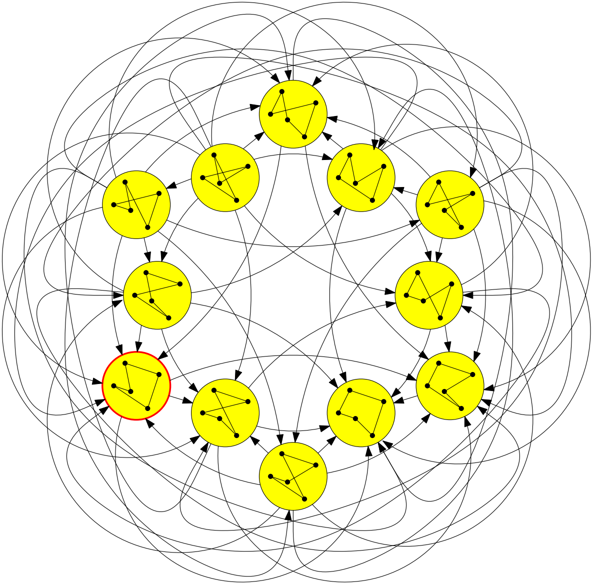
遷移グラフでみる局所探索法



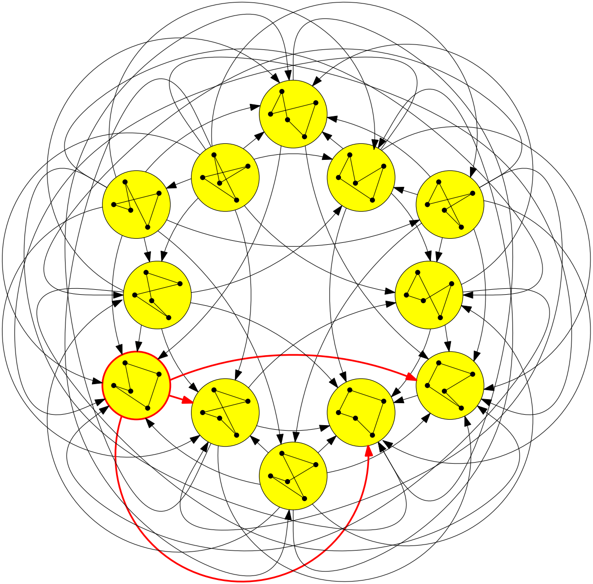
遷移グラフでみる局所探索法



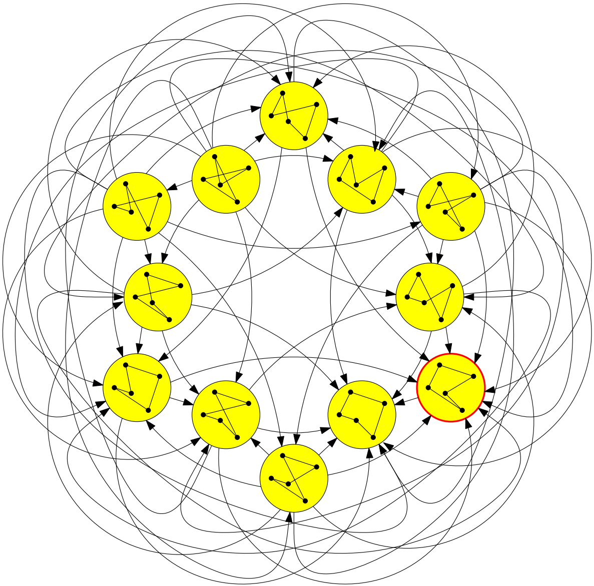
遷移グラフでみる局所探索法



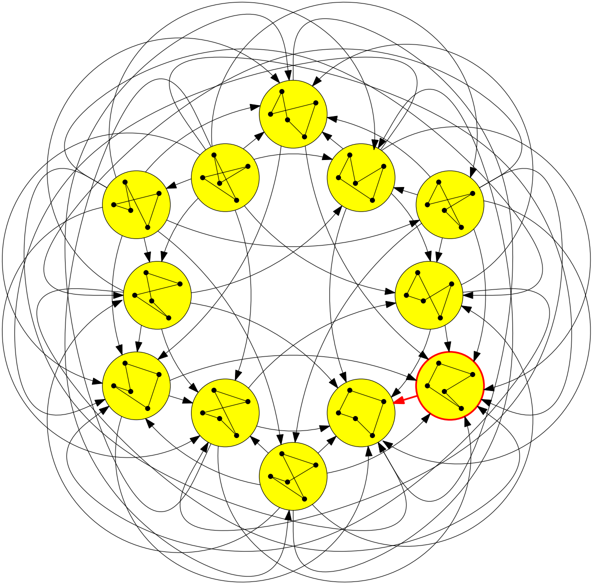
遷移グラフでみる局所探索法



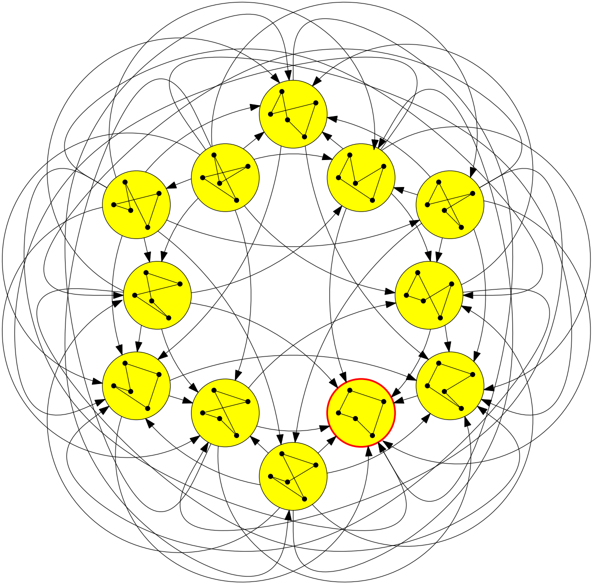
遷移グラフでみる局所探索法



遷移グラフでみる局所探索法



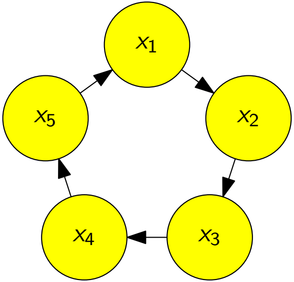
遷移グラフでみる局所探索法



遷移グラフの性質

定理 3.1

任意の離散最適化問題とその任意の近傍関数に対して，その遷移グラフに有向閉路は存在しない



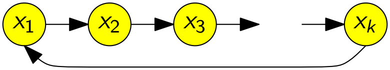
有向閉路

遷移グラフの性質：証明

定理 3.1

任意の離散最適化問題とその任意の近傍関数に対して，その遷移グラフに有向閉路は存在しない

証明：有向閉路が存在すると仮定する



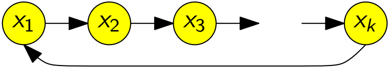
- **これは矛盾** □

遷移グラフの性質：証明

定理 3.1

任意の離散最適化問題とその任意の近傍関数に対して，
その遷移グラフに有向閉路は存在しない

証明：有向閉路が存在すると仮定する



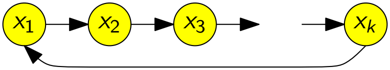
- その閉路が $x_1, x_2, \ldots, x_k$ を通って x_1 に戻るものとする
- これは矛盾 □

遷移グラフの性質：証明

定理 3.1

任意の離散最適化問題とその任意の近傍関数に対して，
その遷移グラフに有向閉路は存在しない

証明：有向閉路が存在すると仮定する



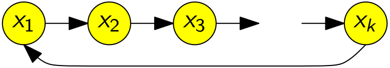
- その閉路が $x_1, x_2, \ldots, x_k$ を通って x_1 に戻るものとする
- 遷移グラフの定義より，$f(x_1) > f(x_2) > \cdots > f(x_k) > f(x_1)$
- これは矛盾 $\square$

遷移グラフの性質：証明

定理 3.1

任意の離散最適化問題とその任意の近傍関数に対して，その遷移グラフに有向閉路は存在しない

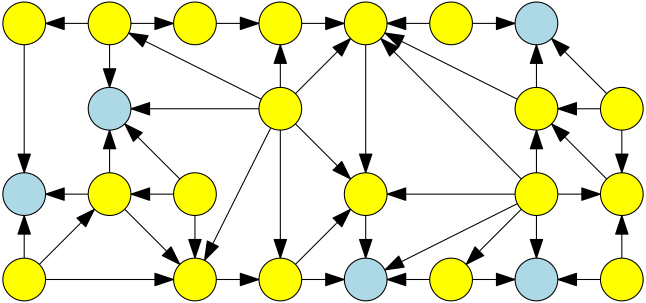
証明：有向閉路が存在すると仮定する



- その閉路が $x_1, x_2, \ldots, x_k$ を通って x_1 に戻るものとする
- 遷移グラフの定義より，$f(x_1) > f(x_2) > \cdots > f(x_k) > f(x_1)$
- したがって，$f(x_1) > f(x_1)$
- これは矛盾 □

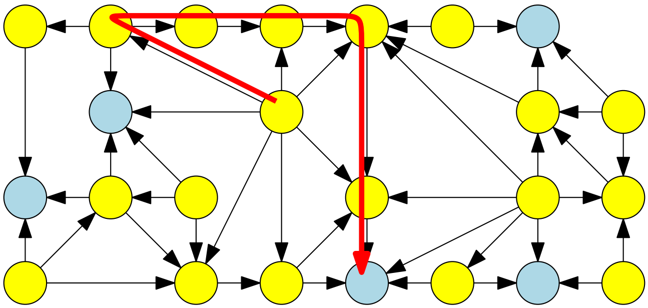
遷移グラフ：まとめ

- **遷移グラフは閉路を含まない有向グラフ** (directed acyclic graph, DAG)
- **出ていく弧を持たない頂点** = **局所最適解**
- **有向道** = **局所探索法による探索履歴**



遷移グラフ：まとめ

- **遷移グラフは閉路を含まない有向グラフ**
  (directed acyclic graph, DAG)
- **出ていく弧を持たない頂点 ＝ 局所最適解**
- **有向道 ＝ 局所探索法による探索履歴**



目次

1 離散最適化問題と近傍関数：復習

2 近傍グラフ

3 遷移グラフ

4 局所探索法を評価する観点

5 近傍の大きさ

6 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
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

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
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

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

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

0. 許容解 $x \in S$ を適当に見つける
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

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)，$|N(x)|$)

おもちゃのような例 (toy example) を考えてみる

- $S = \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9\}$
- $f(x) = x + 3$ (x が偶数のとき), $f(x) = x$ (x が奇数のとき)

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f	3	1	5	3	7	5	9	7	11	9

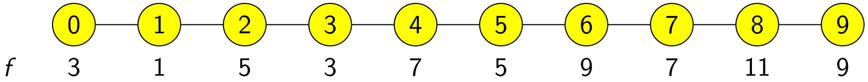
最適解は 1 **で，最適値は** $f(1) = 1$

おもちゃのような例：近傍関数 1

近傍関数 $N_1 \colon S \to 2^S$

- $N_1(x) = \{y \in S \mid |x - y| \leq 1\}$

近傍グラフ



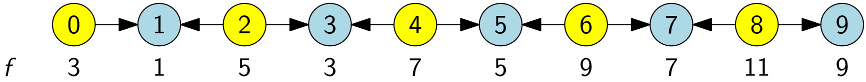
最適解は 1 **で，最適値は** $f(1) = 1$

おもちゃのような例：近傍関数 1

近傍関数 $N_1 \colon S \to 2^S$

- $N_1(x) = \{y \in S \mid |x - y| \le 1\}$

遷移グラフ



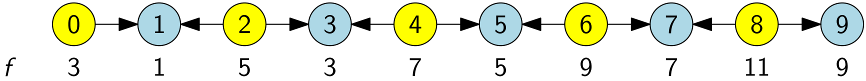
最適解は 1 **で，最適値は** $f(1) = 1$

おもちゃのような例：近傍関数 1 (性能保証)

性能保証

- 局所最適解は $1, 3, 5, 7, 9$
- 局所最適解の目的関数値は
  $f(1) = 1, f(3) = 3, f(5) = 5, f(7) = 7, f(9) = 9$
- 最も悪い局所最適解は 9 で，その目的関数値は $f(9) = 9$
- 近似比 $= 9/1 = 9$

遷移グラフ

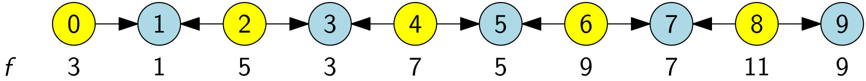


おもちゃのような例：近傍関数 1 (局所操作回数)

局所操作回数

- x が奇数のとき，局所操作回数 $= 0$
- x が偶数のとき，局所操作回数 $= 1$

遷移グラフ

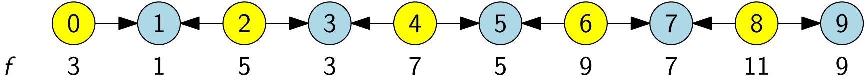


おもちゃのような例：近傍関数 1 (近傍の大きさ)

近傍の大きさ

- $x \in \{1, 9\}$ のとき，$|N_1(x)| = 2$
- $x \in \{2, \ldots, 8\}$ のとき，$|N_1(x)| = 3$
- よって，$\max_{x \in S} |N_1(x)| = 3$

遷移グラフ

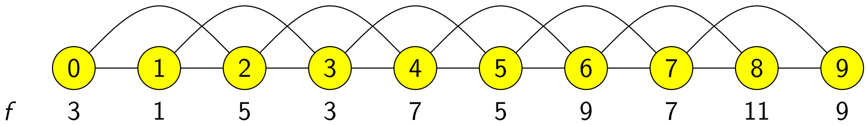


おもちゃのような例：近傍関数 2

近傍関数 $N_2 \colon S \to 2^S$

- $N_2(x) = \{y \in S \mid |x-y| \leq 2\}$

近傍グラフ



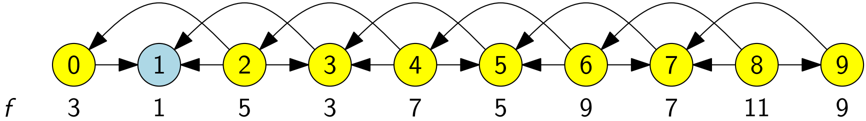
最適解は 1 **で，最適値は** $f(1) = 1$

おもちゃのような例：近傍関数 2

近傍関数 $N_2\colon S \to 2^S$

- $N_2(x) = \{y \in S \mid |x - y| \leq 2\}$

遷移グラフ



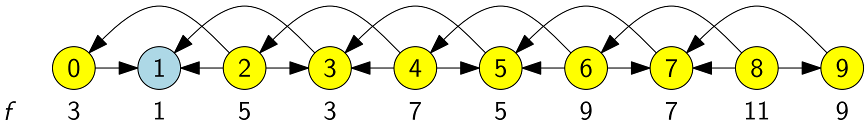
最適解は 1 **で，最適値は** $f(1) = 1$

おもちゃのような例：近傍関数 2 (性能保証)

性能保証

- 局所最適解は 1 のみ
- 局所最適解の目的関数値は $f(1) = 1$
- 近似比は $1/1 = 1$

遷移グラフ



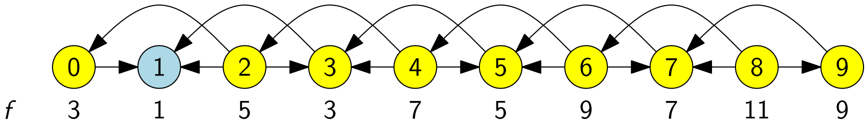
最適解は 1 で，最適値は $f(1) = 1$

おもちゃのような例：近傍関数 2 (局所操作回数)

局所操作回数

- $x = 1$ のとき，局所操作回数 $= 0$
- $x \in \{0, 3\}$ のとき，局所操作回数 $= 1$
- $x \in \{2, 5\}$ のとき，最大局所操作回数 $= 2$
- $x \in \{4, 7\}$ のとき，最大局所操作回数 $= 3$
- $x \in \{6, 9\}$ のとき，最大局所操作回数 $= 4$
- $x = 8$ のとき，最大局所操作回数 $= 5$
- $\therefore$ 最大局所操作回数 $= 5$

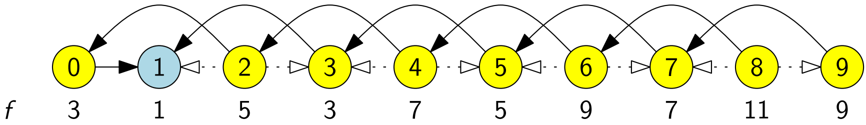
遷移グラフ



おもちゃのような例：近傍関数 2 (局所操作回数)

局所操作回数

- $x = 1$ のとき，局所操作回数 $= 0$
- $x \in \{0, 3\}$ のとき，局所操作回数 $= 1$
- $x \in \{2, 5\}$ のとき，最大局所操作回数 $= 2$
- $x \in \{4, 7\}$ のとき，最大局所操作回数 $= 3$
- $x \in \{6, 9\}$ のとき，最大局所操作回数 $= 4$
- $x = 8$ のとき，最大局所操作回数 $= 5$
- $\therefore$ 最大局所操作回数 $= 5$

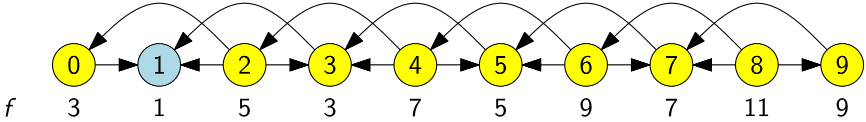


おもちゃのような例：近傍関数 2 (近傍の大きさ)

近傍の大きさ

- $x \in \{0, 9\}$ **のとき，** $|N_2(x)| = 3$
- $x \in \{1, 8\}$ **のとき，** $|N_2(x)| = 4$
- $x \in \{2, \ldots, 7\}$ **のとき，** $|N_2(x)| = 5$
- $\therefore \max_{x \in S} |N_2(x)| = 5$

遷移グラフ

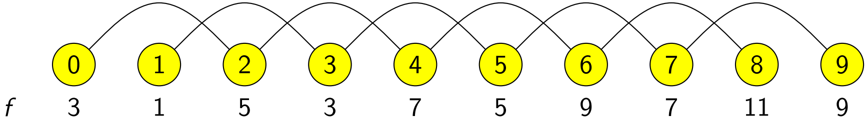


おもちゃのような例：近傍関数 3

近傍関数 $N_3 \colon S \to 2^S$

- $N_3(x) = \{y \in S \mid |x - y| = 0$ **または** $2\}$

近傍グラフ



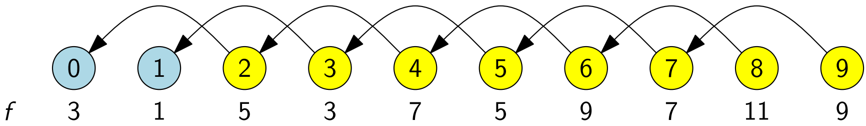
最適解は 1 **で，最適値は** $f(1) = 1$

おもちゃのような例：近傍関数 3

近傍関数 $N_3 \colon S \to 2^S$

- $N_3(x) = \{y \in S \mid |x - y| = 0$ **または** $2\}$

遷移グラフ



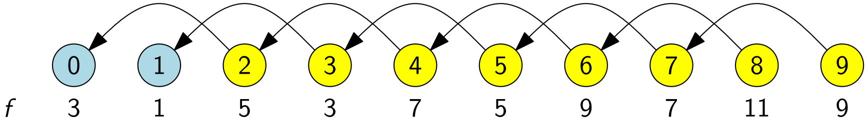
最適解は 1 **で，最適値は** $f(1) = 1$

おもちゃのような例：近傍関数 3

演習問題

- **近似比** $= 3$
- **局所操作回数の最大値** $= 4$
- **近傍の大きさの最大値** $= 3$

遷移グラフ



最適解は 1 **で，最適値は** $f(1) = 1$

おもちゃのような例：比較

評価観点の比較

	近似比	局所操作回数の最大値	近傍の大きさの最大値
N_1	9	2	3
N_2	1	5	5
N_3	3	4	3

どれも小さいほどよい

- $N_1(x) = \{y \in S \mid |x - y| \leq 1\}$
- $N_2(x) = \{y \in S \mid |x - y| \leq 2\}$
- $N_3(x) = \{y \in S \mid |x - y| = 0$ **または** $2\}$

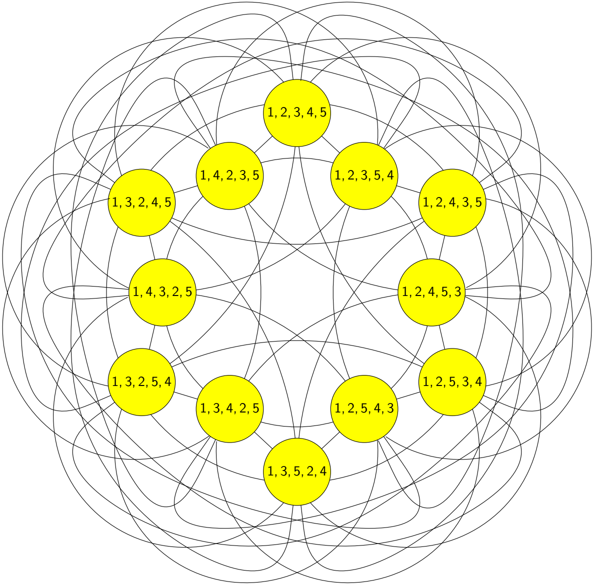
分かること

近傍関数によって，局所探索法のよさが変わる

目次

1. 離散最適化問題と近傍関数：復習
2. 近傍グラフ
3. 遷移グラフ
4. 局所探索法を評価する観点
5. **近傍の大きさ**
6. 今日のまとめ

頂点挿入近傍に関する近傍グラフ



巡回セールスマン問題に対する頂点挿入近傍

定理 3.2

n 個の都市 $\{1, \ldots, n\}$ 上の巡回セールスマン問題の頂点挿入近傍について，各許容解の近傍の大きさは $n(n-3)+1$ である．(ただし，$n \geq 5$)

注：解の表現は前回の通り，次の条件を満たすものだけ考える

- 最初に訪問する都市は 1 である
- 2 番目に訪問する都市の番号 $<$ 最後に訪問する都市の番号

証明：演習問題

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

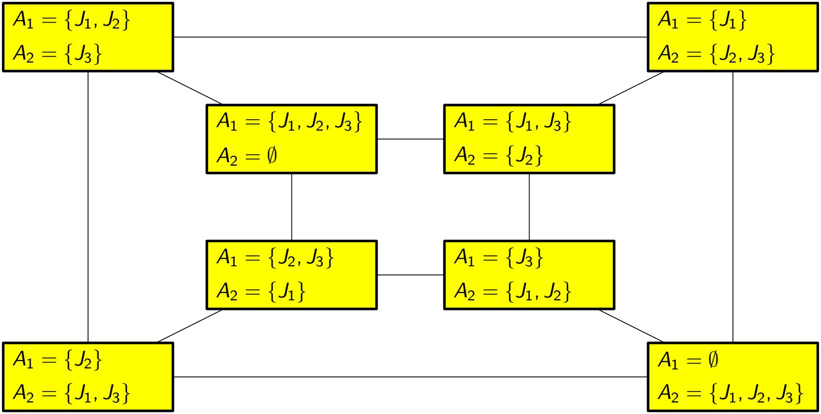
($A_i =$ 機械 i に割り当てられたジョブの集合)

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

$$
\boxed{\begin{aligned} A_1 &= \{J_1, J_2, J_4\} \\ A_2 &= \{J_3, J_6\} \\ A_3 &= \{J_5, J_7\} \end{aligned}} \longrightarrow \boxed{\begin{aligned} A_1 &= \{J_1, J_4\} \\ A_2 &= \{J_3, J_6\} \\ A_3 &= \{J_2, J_5, J_7\} \end{aligned}}
$$

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 (演習問題))

移動近傍に関する近傍グラフ



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

$n =$ ジョブの個数

定理 3.3

機械が 2 台のとき，
最終完了時刻最小化スケジューリング問題の移動近傍について，
各許容解の近傍の大きさは $n+1$ である．

証明：演習問題

目次

1. 離散最適化問題と近傍関数：復習
2. 近傍グラフ
3. 遷移グラフ
4. 局所探索法を評価する観点
5. 近傍の大きさ
6. 今日のまとめ

今日のまとめ

局所探索法の振る舞いを図示

- 近傍グラフ
- 遷移グラフ

遷移グラフは有向閉路を含まない

局所探索法の評価観点

- 性能保証
  - 近似比
- 計算量
  - 局所操作回数 (の最大値)
  - 近傍の大きさ (の最大値)

残った時間の使い方

- 演習問題をやる
  - 相談推奨 (ひとりでやらない)
- 質問をする
  - 教員は巡回
- 退室時，小さな紙に感想など書いて提出する ← 重要
  - 内容は何でも OK
  - 匿名で OK

目次

1. 離散最適化問題と近傍関数：復習
2. 近傍グラフ
3. 遷移グラフ
4. 局所探索法を評価する観点
5. 近傍の大きさ
6. 今日のまとめ