2001年度日本オペレーションズ・リサーチ学会
春季研究発表会

AR(1) モデルによる Local Search の性能評価

01107771 小樽商科大学 加地太一 KAJI Taichi

1 はじめに

近年ではヒューリスティックな知識を組み合わせてより高度なアルゴリズムを構成するためのメタ戦略の研究が盛んに行われている。しかし、これらのアルゴリズムの優劣、および、性能、特性などは数値実験などにより判別され経験的な評価の域をでていない。本論文ではこれらのアルゴリズムの優位性を明確にするため、理論的にその求まる解の特性を考察する。ここでは、各種のメタヒューリスティックスアルゴリズムのベースとなっている Local Search アルゴリズムについて、代表的な組合せ最適化問題である巡回セールスマン問題を対象として検討したい。この研究に関して Eikelder 等 [1] は得られる解の値、および要求される反復数の理論的な期待値を検討しアルゴリズムの振る舞いを示した。ここで、Local Search で重要なファクターである近傍構造は TSP でよく用いられる 2-OPT 近傍を採用して分析を試みている。しかし、そこで必要な確率計算を理論的に容易に計算するためにかなり限定した 2-OPT 近傍を設定し理論的な値を計算しており、実際に利用される近傍を使用したアルゴリズムとは異なる値が導出されるものと考えられる。そこで、本研究では実際に使われている 2-OPT 近傍を反映したモデルを提唱し、より現実に近い理論値の導出を試みる。

2 局所解の確率分布

本章では、TSP に対して、2-OPT 近傍構造を用いたローカルサーチアルゴリズムを実現したときの局所解の評価値における確率分布、および、局所解を得るのに要するステップ数の確率分布について Eikelder 等が示したこと [1] を要約する。まずグラフ $G(V,E)$ の各辺のコストを平均 μ_l、分散 σ_l^2 の独立な確率変数 $\underline{e}_{ij}$ とみなすことによりグラフ構造を定義する．それより、n 個の独立した確率分布 $\underline{e}_{ij}$ の総和がツアー t のコストを与える確率変数となり $\underline{f}(t)$ で表す。中心極限定理より、$\underline{f}(t)$ は平均 $\mu = n\mu_l$、分散 $\sigma^2 = n\sigma_l^2$ の正規分布をもつ。これに相応する確率密度を ω_{tour} と表すことにする。このグラフ上で、ツアー t を考えその近傍を $t_1,\ldots,t_b$ とする。ここで、b は近傍集合の大きさである。以後の解析の計算に必要となる基本的な確率として次のステップ確率がある。

$$g(c_0,c) = Pr\{_{\forall i \in \{1,\ldots,b\}} \underline{f}(t_i) > c \mid \underline{f}(t_0) = c_0\} \qquad (1)$$

これはツアー t_0 がコスト c_0 を持つときその近傍のすべてがコスト c より大である確率を示す。この $g(c_0,c)$ の計算の導出については次章の $AR(1)$ モデルにより解析を試みる。この $g(c_0,c)$ を用いて Local Search にもとずく多くの確率が導出される。まず、コスト c_0 のツアーが c 以下のツアーへ移動する分布関数は以下となる。ただし、S' を局所解の集合とする。

$$Pr\{\min_{1\le i\le b} \underline{f}(t_i) \le c \mid (\underline{f}(t_0) = c_0) \wedge (t_0 \notin S')\} = \frac{(1-g(c_0,c))}{(1-g(c_0,c_0))} \qquad (2)$$

この分布関数の微分より, コスト c_0 の解からコスト c の解へ移動する確率密度が以下の式で示せる。

$$P(c_0,c) = \frac{-\frac{\partial}{\partial c} g(c_0,c)}{1-g(c_0,c_0)} \qquad (3)$$

さらに、高々 k 回のステップでコスト c の局所解に達する密度関数 $\rho_k(c)$ と、k ステップまで局所解に達せず、$k+1$ ステップでコスト c となる密度関数 $\eta_k(c)$ は以下の再帰式で求まるであろう。

$$\rho_{k+1}(c) = \rho_k(c) + g(c,c)\eta_k(c) \qquad (4)$$

$$\eta_{k+1}(c) = \int_c^\infty \eta_k(c_0)(1-g(c_0,c_0))P(c_0,c)dc_0 \qquad (5)$$

これらより、最終解の局所解密度が

$$\rho_{fin} = \lim_{k\to\infty} \rho_k \qquad (6)$$

で計算される。また、局所解に達するステップ数を確率変数 $\underline{steps}$ と捉えれば、

$$Pr\{\underline{steps} = k\} = \int_{-\infty}^{\infty} g(c,c)\eta_{k-1}(c)dc \qquad (7)$$

となる。

3 AR(1) プロセスによるステップ過程の解析

Eikelder 等は (1) 式のステップ確率を計算するために、実際の 2-OPT 近傍を限定したモデルを提唱し導出を試みた。本章ではそれに対して,TSP の探索過程における AR(1)landscape 構造のモデル化の考え [2] をもとに、(1) 式のステップ確率の具体的導出を試みた。

TSP の探索過程のステップ t_i における評価値 $f(t_i)$ がつくる時系列は、あるランダムウォークの結果であると考えることができ、定常確率過程を形成する。定常過

程の定義から、 $f(t_i)$ は定数の平均値 μ と分散 σ^2 を持つ。また定常性により、$Cov(\underline{f}(t_i), \underline{f}(t_j))$ はステップ差 $|i-j|$ にのみ依存する共分散関数 $R(h)$ となり、自己相関関数は

$$\rho(h) = \frac{R(h)}{R(0)} \tag{8}$$

によって定義される。

TSP landscape の相関構造を定量化するために、我々は Stadler,P.F 等の論文 [2] にならって、確率過程 $\underline{f}(t_k)$ は次の再帰方程式で支配されるものとする。

$$\underline{f}(t_k) = \mu + \rho(1)[\underline{f}(t_{k-1}) - \mu] + \Delta \tag{9}$$

ただし、Δ は平均 zero 分散 d^2 をもつ白色雑音である。便宜上、隣接関係にあるツアーの評価値の相関係数 $\rho(1)$ を ρ で表すことにし、新しい確率変数 ξ を

$$\xi = \Delta + (1-\rho)\mu \tag{10}$$

によって導入すると、上記方程式 (9) は標準形の AR(1) 方程式 [3]

$$\underline{f}(t_k) = \rho\underline{f}(t_{k-1}) + \xi \tag{11}$$

に書き換えることができる。このような landscape を AR(1) landscape と呼ぶ。この AR(1) 方程式 (11) から今後必要となるすべての統計量を具体的に導出することができる。主要な結果を列挙すると、

$$E[\underline{f}(t_k)] = \mu = \frac{1}{1-\rho}E[\xi] \quad \text{for all k} \tag{12}$$

$$Var(\underline{f}(t_k)) = \sigma^2 = \frac{1}{1-\rho^2}Var(\xi) \quad \text{for all k} \tag{13}$$

となる。自己相関関数 (autocorrelation function) $\rho(h)$ は、

$$\rho(h) = \frac{R(h)}{R(0)} = \rho(1)^h = exp(-h/\lambda) \tag{14}$$

となる。特に (14) 式は、"AR(1) プロセスでは自己相関関数が指数関数的減衰をする" というこのプロセス固有の性質を表している。ただし、λ は相関長 (correlation length) を表すパラメタである。

ここで、更に過程 $\underline{f}(t_k)$ はガウスかつマルコフ的であるとする。このとき $\underline{f}(t_k)$ と $\underline{f}(t_{k-1})$ の同時確率分布は２変量正規分布に従う。この２変量正規分布はそれぞれの確率変数の平均と分散および相関係数によって一意に定まり、(12),(13) 式より、それは

$$N(\mu, \mu, \sigma^2, \sigma^2, \rho) \tag{15}$$

と表すことができる。この２変量正規分布と、その $\underline{f}(t_{k-1})$ に関する周辺分布を用いて、条件 $\underline{f}(t_{k-1}) = c_0$ を与えたときの $\underline{f}(t_k)$ の条件付確率分布を計算することができる。結果として正規分布 $N(\mu_n, \sigma_n^2)$ が導かれる。但し、

$$\mu_n = \mu + \rho(c_0 - \mu) \tag{16}$$

$$\sigma_n^2 = (1-\rho^2)\sigma^2 \tag{17}$$

である。

したがって、求めようとする確率は次のように積分表示できる。

$$Pr\{\underline{f}(t_i) > c \mid \underline{f}(t_0) = c_0\}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_n}\int_c^\infty exp\left(-\frac{(\xi-\mu_n)^2}{2\sigma_n^2}\right)d\xi \tag{18}$$

ここで、この (18) 式が t_0 のすべての近傍に対して独立して成立するものと仮定し、N をツアー t_0 の近傍の大きさとする。そうすると、

$$g(c_0, c) = \left[\frac{1}{2}erfc\left(K_0\left(\frac{c-\rho c_0}{1-\rho} - \mu\right)\right)\right]^N \tag{19}$$

と求まる。ただし、

$$K_0 = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma}\sqrt{\frac{1-\rho}{1+\rho}}$$

である。

以上より、$g(c_0, c)$ が求まることにより (7) 式と (6) 式より、局所解に達するのに必要なステップ数の確率密度と最終解の確率密度の理論的ならびに数値的な推定値が導出可能となる。

4 おわりに

本論文では Eikelder 等の限定された近傍構造のモデルによる理論的な分析に対して、通常の 2-OPT 近傍構造を AR(1)landscape の考えからモデル化しより現実に近い理論推定値を導出した。すなわち、TSP の構造を landscape 構造と考え、TSP の探索過程の実現値が時系列上の自己相関関数によって考察できることにより、Eikelder 等が近傍構造を限定しなければ求められなかったステップ確率の計算を可能にしている。それによりこのアルゴリズムの求めうる値の能力、また、必要な計算時間の予測が可能となり、今後、他のメタヒューリスティックアルゴリズムで同様な値を導出することにより、それらのアルゴリズムの性能を明確に分析することが可能となるであろう。

参考文献

[1] Osman,I.O. and Kelly,J.P.(ed.), Meta-Heuristics: Theory & Applications, Kluwer Academic Publishers,pp.605-618,1996.

[2] Stadler,P.F. and Schnabl, W., "The Landscape of the Traveling Salesman Problem", Phisics Letters A, Vol.161,Num.4,pp.337-344,1992.

[3] Weinberger,E., "Correlated and Uncorrelated Fitness Landscapes and How to Tell the Difference", Biological Cybernetics,Vol.63,pp.325-336,1990.