

AR(1) モデルによる組合せ最適化問題の近傍に対する解析

加地 太一
小樽商科大学

(受理 2007年 8月 20日; 再受理 2008年 8月 20日)

和文概要 組合せ最適化問題の有効な近似解法としてメタヒューリスティックスの研究, 開発がなされている. メタヒューリスティックスの重要な枠組みの一つである近傍を解析することは, 有効な近傍を生成するための知識獲得を可能とし, メタヒューリスティックスの改良につながる知見となりうる. また, アルゴリズムの確率的解析のための基盤となる情報をも提供するものである. そこで本論文では, 近傍のコスト分布の特性を確率的に解析する. そのために, 解空間における近傍点のランダムな評価値系列が AR(1) プロセスと呼ばれる特徴的な性質を有するという仮定を検証し, 解空間および評価値系列の構造を統計的に明らかにする. この AR(1) プロセスから導き出した統計量を用い, さらに, 解のコスト分布にガウス性が伴う仮定を利用して, 近傍を確率的にモデル化し近傍の特性の解析を試みる. 確率的な解析では通常モデルを構築しやすいように, 特定の問題, および特定の近傍などを設定してこのような統計量を導出する. しかし, ここで提唱する AR(1) モデルを用いることにより, 多くの組合せ最適化問題, あるいは各種の近傍などに対応する一般性に富んだ有効な解析方法を提案する.

キーワード: 組合せ最適化, メタヒューリスティックス, 近傍, AR(1) プロセス, 確率的解析

1. はじめに

計算困難な組合せ最適化問題の近似解を求める有効な手立てとして, メタヒューリスティックスと呼ばれる種々の解法がある. これらの解法は解の移動を反復することが基調となっている. ここで, 解の移動操作のベースを作り上げているものが解の近傍である. 近傍とは任意の解に対してなんらかの操作を加えることにより得られる解の集合である. メタヒューリスティックスはこの近傍にもとづいて解空間を探索し, より良い解へ到達することを目指すものである. そして, メタヒューリスティックスの有効なアルゴリズムの構築はこの近傍の設計に大きく影響される [5][10]. すなわちメタヒューリスティックスのアルゴリズムにおける研究開発において, この近傍の良し悪しを吟味することは重要な課題の一つとなる.

そのために, 任意の解で定義される近傍の特徴をつかむことはより優れた近傍を生成することを可能とし, また, 各種の近傍の性能を評価することを可能とする. 具体的には, 近傍のコスト分布を示す統計量の情報を利用して, 近傍の拡張, 限定などにより有効な近傍の生成を考えている [2]. そして, 分布の特徴により近傍の有効性の基準として用いることが可能であるものと考えている [7].

また, この近傍の統計情報を把握することにより, アルゴリズム自体の確率的な解析の研究へもつながってくる. 現在, メタヒューリスティックスの性能を分析する方法として, 実験的解析が主流となっている. それにはよりリアルな情報を用いた解析を通して, メタヒューリスティックスの性能を明らかにしていくことの現実的な方向性が読み取れる. しかし, 実験的解析では実験環境などに多くの自由度を有するがため, その基準が整わず一般性

を導きにくいところがあるのも事実である。そこで、理論的解析を用いてより普遍的なメタヒューリスティックスの特性を明らかにしていくことも重要な課題となってくる。特に、Eikekder ら [1] などによる確率的解析の検討などもあり、その可能性が論じられている。精度の高い確率的解析を行うためにも、メタヒューリスティックスの枠組みの重要な基盤である近傍の解析は欠かせないものであり、まず、この段階の解析を確かにしておくことは重要な課題である。

しかし、このような確率的解析を行うにあたって、通常、特定した問題のケースで確率モデルをたて解析を行う。したがって、確率的解析でたてたモデルは限定したものであり、一般性に薄く他の問題への適用が難しいわけである。Eikekder らの場合も、巡回セールスマン問題で近傍は 2-opt を修正した限定したモデルの上で論じられたものである。

そこで、本論文ではこの近傍の構造を確率的に解析して、かつ、その解析にあたっては汎用的な確率的解析モデルの構築を目指す。すなわち、組合せ最適化問題の解空間における近傍点のランダムな評価値系列が AR(1) プロセス (first order autoregressive process) で支配されるという仮定を用いて解空間および評価値系列の統計量を導き出す。この AR(1) プロセスから得られた統計量を用い、さらに、解コストの同時分布にガウス性が伴う仮定を利用して、汎用的な近傍モデルを構築することを目指したい。そのために、まず解空間における近傍点の評価値系列の分析を行う。ここで、その構造が AR(1) プロセスとして近似でき特定な問題、近傍に依存することなく分析を可能とすれば、必要な解空間および評価値系列の基本的統計量を AR(1) モデルを適用して導出可能となる。これによって上記の目的を達成することができ、多くの組合せ最適化問題の各種の近傍などに対応する汎用的な解析が可能となることが期待される。また、情報量基準の考えをもとに、AR(1) モデルの正当性も補強しておく。さらに、解コストの同時分布にガウス性が伴う仮定のもと、複雑な近傍全体を捉えた近傍モデルを検討し、AR(1) モデルの情報を利用して分布の解析を試みている。特徴として、前述の AR(1) モデルから求められた統計情報がこの近傍モデルの上でもよい推定値の導出を可能とし、汎用的な近傍モデルの構築を可能としている。最後に、このモデルにより推定された値と実際の対応する値との関係を実験的に検証し、その解析の有効性の検討を試みている。この検証においては、まず、モデルの仮定から解のコスト分布にガウス性がつよく伴う問題事例に対して 2-opt 近傍を用いた実験を行った。さらに、汎用性を示すため、異なる近傍、およびベンチマーク問題などの実際的な問題などに対しての実験も行い検証を進めてみた。

2. AR(1) プロセスによる解空間の解析

本節では、近傍の確率的解析を行うため、解空間および評価値系列の構造を統計的に明らかにしたい。そのために、解空間における評価値系列の特性を表す各種の統計量を考察することが必要となってくる。そこで、本論文では解空間における近傍点のランダムな評価値系列が AR(1) プロセスと呼ばれる特徴的な性質を有するという仮定を検証し、必要な解空間および評価値系列の基本的統計量を AR(1) モデルを適用して導出していく。そして、後述する節でその導出された統計量の有効性を検討する。確率的な解析では通常、モデルを構築しやすいように、特定の問題、および特定の近傍などを設定して、このような統計量を導出する。しかし、ここで提唱する AR(1) モデルを用いることにより、多くの組合せ最適化問題、あるいは各種の近傍などに対応する汎用的な解析が可能となることが期待される。以下に、解空間の性質、AR(1) プロセスによるモデル化、そして、そこから導出される基本統計量に

ついて考えていく。

組合せ最適化問題のすべての実行可能解 x の集合を X としよう。そして、与えられた解からある基本操作で別の解を導出することを移動と呼ぶ。その移動によって得られる解集合 $N(x)$ を解 x の近傍として定義する。また、解 x に対しての評価値（コスト）を $f(x)$ で表すこととする。その写像 $f: X \rightarrow R$ を組合せ最適化問題の評価値ランドスケープ (fitness landscape) と呼ぶこととする。評価値ランドスケープという言葉は理論生物学および理論物理学に端を発し、組合せ的対象から実数値への写像に関する問題に広がりつつある。最近、Weinberger [9] は不偏的ランダムウォークの概念が評価値ランドスケープ構造を調査するための適切な手法であることを示した。ここで、“評価値ランドスケープは統計的に isotropic である” という重要な付加的条件を課することが必要である。

この評価値ランドスケープの特性を解析するために、まず、ランダムに選んだ点 (解) を出発点としてランダムに選ばれた近傍点 (近傍解) に移動し、この点 (解) から再びランダムに選ばれた近傍点 (近傍解) に移動することを繰り返し得られた評価値 (fitness) の系列を考える。この評価値の系列の統計が、選ばれた出発点にかかわらず同じであるとき、考えている評価値ランドスケープは統計的に等方的なランドスケープ (statistically isotropic landscape) であるという。多くの組合せ最適化問題における近傍点のランダムな評価値系列ではこの性質がみたまわると考えられる [9] ので、このモデルの特性を利用し、評価値ランドスケープの構造を分析することが可能である。

この評価値ランドスケープに着目し、組合せ最適化問題のランダムな探索過程のステップ t における評価値 $f(x_t)$ がつくる評価値系列は、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る。そして、この系列が時系列モデルの一つのタイプである AR(1) プロセス [6][9]、すなわち 1 次の自己回帰モデルとしてモデル化することが可能と考える。この AR(1) プロセスは次の方程式をみたす過程である。

$$Y_t = z_L Y_{t-1} + W_t \quad (2.1)$$

ただし、 Y_t , $t = 1, \dots, N$ は時系列上の状態をあらわし、 z_L は自己回帰係数を示す。また、 W_t , $t = 1, \dots, N$ はノイズを表わす独立な確率変数の系列である。Weinberger は、“AR(1) プロセスが、複雑な評価値ランドスケープのクラスをモデル化した N-K 問題 [9] や 組合せ最適化問題を含めて、ランドスケープの広いクラスの上でランダムウォークの統計をうまく捕らえるであろう” と述べており、組合せ最適化問題への適用が可能であることを示唆している [9]。そこで、その考え方を組合せ最適化問題の解空間の評価値ランドスケープに対して適用し、最適化問題に適用して生じる統計的性質から解析を試みるものである。

まず、組合せ最適化問題の評価値ランドスケープ上のランダムウォーク x_1, x_2, \dots, x_N は、AR(1) プロセスとして、次の再帰方程式で支配されたモデル化が可能と考えられる。

$$F_t = \mu + \rho(1)(F_{t-1} - \mu) + \Delta \quad (2.2)$$

ここで、 F_t は解 x_t のコストを確率変数と考えたものである。また、 t は評価値系列のステップを表す。この再帰的な性質が多く、組合せ最適化問題の解空間における近傍点のランダムな評価値系列に見られ、統計的な性質を導き出すことが可能であろう [3][9]。ただし、 Δ は平均 0、分散 σ_Δ^2 をもつ白色雑音で、 μ は解コストの期待値であり、 $\rho(1)$ は 1 ステップの自己相関関数である。今後便宜上、 $\rho(1)$ を ρ で表すこともある。

AR(1) プロセスの特徴として, $\rho(r)$ を r ステップの自己相関関数とすれば,

$$\rho(r) = \rho(1)^{|r|}, \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.3)$$

の式のようにステップ数 r の増加によって自己相関関数の値は 0 への指数関数的な減衰性を示す. この性質が確認されたならば, 解空間の評価値ランドスケープが AR(1) プロセスに従っていると判断できうる. また, 評価値系列が AR(1) プロセスであり, かつ $|\rho(1)| < 1$ ならば, そのプロセスは定常過程となることが知られている [6]. 定常過程の定義から,

$$E[F_t] = \mu \quad \text{for all } t \quad (2.4)$$

$$E[(F_t - \mu)^2] = \sigma^2 \quad \text{for all } t \quad (2.5)$$

が成立する. ただし, μ は解コストの平均 (アンサンブル平均) であり, σ^2 は解コストの分散である. また, 評価値系列のサンプル平均は

$$\bar{F} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N F_t \quad (2.6)$$

で計算でき, 定常過程において評価値系列のサンプル平均 \bar{F} が, アンサンブル平均 μ としてのバイアスのない見積もり (推定量) として扱えることが知られており [6], サンプル平均をもってアンサンブル平均とする. さらに, 共分散関数 (covariance function) を

$$R(r) = \text{Cov}(F_t, F_{t+r}) = E[(F_t - \mu)(F_{t+r} - \mu)] \quad (2.7)$$

により定義すると,

$$\text{Cov}(F_i, F_j) = R(|i - j|) \quad (2.8)$$

であり, 定常過程ではステップ差のみに依存する関数となる. また, もちろん

$$R(0) = \text{Var}(F_t) = \sigma^2 \quad (2.9)$$

である. そして, 自己相関関数は

$$\rho(r) = \frac{\text{Cov}(F_t, F_{t+r})}{\sqrt{\text{Var}(F_t)\text{Var}(F_{t+r})}} \quad (2.10)$$

として定義される.

定常過程における自己共分散, 自己相関関数の見積もり (推定量) は

$$\hat{R}(r) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-r} (F_t - \bar{F}) \cdot (F_{t+r} - \bar{F}) \quad (2.11)$$

$$\hat{\rho}(r) = \hat{R}(r) / \hat{R}(0) \quad (2.12)$$

を用いることがすすめられ, N が大きければ真値に近い値を導くこととなる [6]. これらの見積もりによって, 以後用いられる自己共分散値 $R(r)$, 自己相関関数値 $\rho(r)$ が決定されるものとする.

また, 導出された 1 ステップの自己相関関数 ρ の値は解 x_0 のコストとその近傍解コストの相関係数と同値である. 解 x_0 の任意の 2 つの近傍解コストの間の相関係数 ν は, 近傍解

同士の共通する属性の比率が高いことから，近似的に ρ に近い定数と仮定する．このように，AR(1) プロセスの考えに基づき解空間および評価値系列の特徴的な統計量が推定可能となり，以後で述べる推定値の基本統計量として活用できるものとする．

以上のように評価値系列が AR(1) プロセスであれば，いくつかの特性が得られるわけであるが，問題は実際に AR(1) プロセスであるかということに帰着される．AR(1) プロセスの特徴的な性質として指数的な減衰性を示す (2.3) 式となる顕著な特性がある．この指数的減衰性を確認して，評価値ランドスケープ上の評価値系列が AR(1) プロセスに従う必要条件を確かめてモデルとして採用できるかを確認したい．ただし，後述する近傍の解析でガウス性を仮定するため，解空間は平均 \tilde{m} ，分散 $\tilde{\sigma}^2$ の正規分布 $\mathcal{N}(\tilde{m}, \tilde{\sigma}^2)$ に従う確率空間と考える．特に，本研究における手始めの段階でもあるので，解析の検証実験の事例として，組合せ最適化問題の代表的な問題である巡回セールスマン問題 (TSP) を使用し，扱いやすい問題の大きさから解析していくこととする．グラフの構造は各辺に平均 0.0，分散 0.1 の独立したランダムなコストを付与した完全グラフであり，頂点数 100 と 500 を対象とする．その解は中心極限定理によりコストの平均が 0.0，分散は頂点数 100 の場合は 10 であり，頂点数 500 の場合は 50 となる正規分布構造をもつ．ただし，この場合，ユークリッド平面的な性質は有さない．

近傍として 2-opt[10] を定義し，その近傍に基づきランダム移動を行い評価値系列データを生成する．頂点数 100 のグラフに対する評価値系列データの自己相関関数を示したのが図 1 である．横軸はステップの変化に対応し，縦軸が自己相関関数の値となる．実線がその評価値系列データのサンプルから (2.12) 式により計算した自己相関関数の変化である．すなわち，この問題の評価値系列における自己相関関数の値の変化が示される．このときの評価値系列のサンプルパスの長さ，すなわち (2.11) 式の N の値は 1000000 とする．また，破線は指数的減衰性を表わす (2.3) 式の変化をプロットしたものであり，指数的減衰の振る舞いを表わす理論曲線である．ただし，最初の値である $\rho(1)$ は観測値から推定した値を用いており，その値に対する指数関数的な減衰性を示す理論曲線である．結果として，実線の観測値から得られた自己相関関数の値の変化は，指数的減衰性の変化を表わす理論曲線にほぼ一致した結果となった．また，図 2 は頂点数 500 の場合の同様な結果である．

結果として，対象問題の解空間のサンプルから求めた自己相関関数値は AR(1) の特徴を示す指数関数的な減衰性が認められた．また，頂点数 100 から 500 までの解空間のコストが正規分布性を持つ複数のグラフに対して同様な実験を行なった結果指数的減衰性が確認された．したがって，その空間における近傍点のランダムな評価値系列は AR(1) プロセスに従っているといっていよいであろう．

3. 情報量基準による AR(1) モデルの検証

前節では，自己相関関数が指数的減衰性を示す AR(1) プロセスの特徴的な性質が認められることを示した．ただし，AR(1) プロセスであるならば指数的減衰性となるが，指数的減衰性の性質があれば，AR(1) であるとは必ずしもいえない．そこで，情報量基準などの考え方をを用いて，異なる観点より検討を加えその正当性を補強しておきたい．まず，確率過程における予測の理論から，時間 t における時系列の値 Y_t はそれ以前の各時点の同時分布が多変量正規分布として表されるのならば，

$$\hat{Y}_t = a_1 Y_{t-1} + a_2 Y_{t-2} + \cdots + a_p Y_{t-p} \quad (3.1)$$

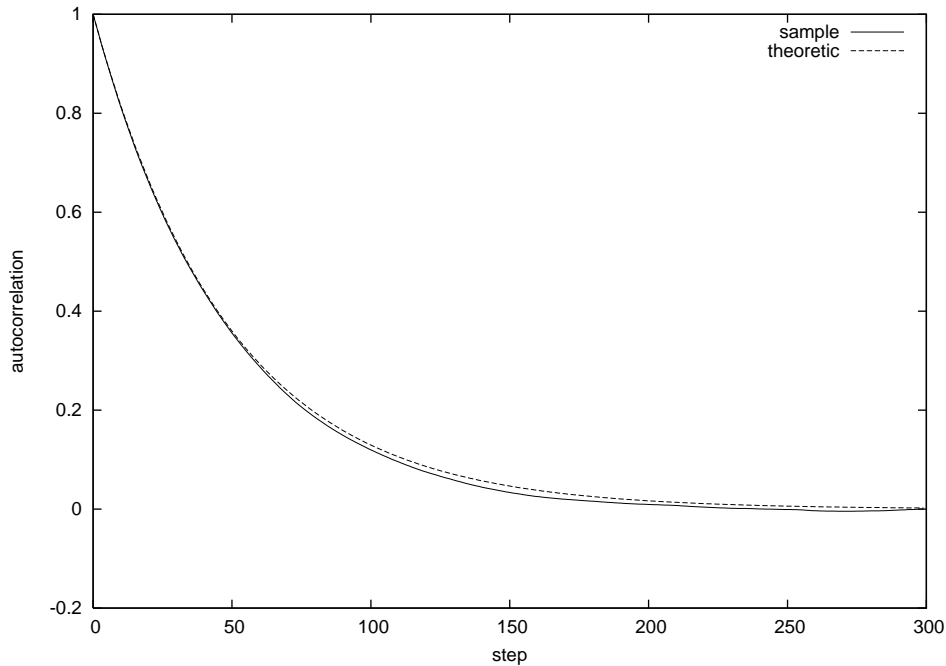


図 1: 2-opt 近傍による頂点数 100 の自己相関関数の振る舞い

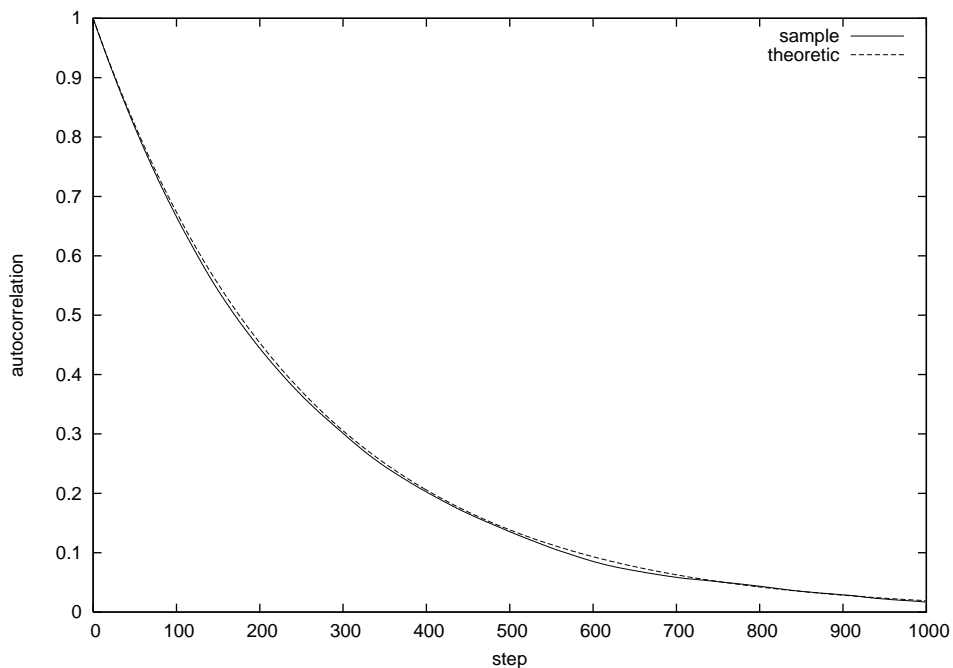


図 2: 2-opt 近傍による頂点数 500 の自己相関関数の振る舞い

が最適な予測子であると言われている [9] . その各係数は Yule-Walker 方程式に従う . また , TSP などの組合せ問題においてその解コストの同時分布にガウス性を伴うケースがあることが示されている [9] . そこで , 解コストの同時分布にガウス性が伴うと仮定し , 自己回帰モデルの枠組みの中で解のランダム移動のプロセスのモデル化を試みる . 具体的には , まず , 自己回帰モデルとして , いくつかのモデルの次数に対しての自己回帰係数と白色雑音の分散

を最尤法を用いて推定する．次に，いくつかの次数に対して推定された自己回帰モデルに対してどのモデルが最善であるかを，客観的な基準として AIC (赤池の情報量基準) [4][6] を用いて決定し，自己相関関数の振る舞いのモデルとする．

ここで利用する最尤法は，得られたデータによって任意の母数を取る尤もらしさを表す関数である尤度関数を用いて母数の値などを推定する方法である．そして，最適な予測子である自己回帰モデルの一般式は

$$X(t) = \alpha_1 X(t-1) + \alpha_2 X(t-2) + \cdots + \alpha_M X(t-M) + W(t) \quad (3.2)$$

であるので，任意の次数 M に対して，おのこの自己回帰係数 α_i の値と $W(t)$ の分散 σ_w^2 の値をこの最尤法で推定することとなる．たとえば， $M = 1$ の場合，

$$X(t) = \alpha_1 X(t-1) + W(t) \quad (3.3)$$

で表される 1 次の自己回帰モデル AR(1) の自己回帰係数 α_1 の値と $W(t)$ の分散 σ_w^2 の値を推定し， $M = 2$ の場合は

$$X(t) = \alpha_1 X(t-1) + \alpha_2 X(t-2) + W(t) \quad (3.4)$$

となる 2 次の自己回帰モデル AR(2) の自己回帰係数 α_1, α_2 の値と $W(t)$ の分散 σ_w^2 の値を推定する．ここで，ステップとともに変化する評価値系列データを x_1, x_2, \dots, x_N とすると，各々の次数 M に対して，このモデルの尤度関数の対数をとった対数尤度関数は

$$L(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_M, \sigma_w^2) = -\frac{1}{2\sigma_w^2} \sum_{t=1}^N \left[x_t - \sum_{j=1}^M \alpha_j x_{t-j} \right]^2 - \frac{N}{2} \ln 2\pi\sigma_w^2 \quad (3.5)$$

となる．この対数尤度関数の値が最大であるところの $\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \dots, \hat{\alpha}_M, \hat{\sigma}_w^2$ が最も尤もらしいモデルを構成することとなる．その $\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \dots, \hat{\alpha}_M$ の値は，

$$\omega_{ij} = \sum_{t=1}^N x_{t-i} x_{t-j} \quad (3.6)$$

という量を導入することによって，

$$\begin{pmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} & \cdots & \omega_{1M} \\ \omega_{21} & \omega_{22} & \cdots & \omega_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_{M1} & \omega_{M2} & \cdots & \omega_{MM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_1 \\ \hat{\alpha}_2 \\ \vdots \\ \hat{\alpha}_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_{10} \\ \omega_{20} \\ \vdots \\ \omega_{M0} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

を解くことによって決定する．また， $\hat{\sigma}_w^2$ は，

$$\hat{\sigma}_w^2 = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \left[x_t - \sum_{j=1}^M \hat{\alpha}_j x_{t-j} \right]^2 \quad (3.8)$$

から求まる．

さらに，実際のデータを分析する際の有効なモデル選択基準として情報量基準 AIC がある．その計算は

$$\text{AIC} = -2(\text{最大対数尤度}) + 2(\text{モデルのパラメータの数}) \quad (3.9)$$

表 1: 自己回帰係数の推定と情報量基準 (頂点数 100)

M	α_1	α_2	α_3	α_4	AIC
0					22582.0
1	0.979				-9236.9
2	0.986	-0.009			-8997.4
3	0.980	-0.02	0.018		-8760.6
4	0.968	0.012	0.01	-0.010	-8991.9

表 2: 自己回帰係数の推定と情報量基準 (頂点数 500)

M	α_1	α_2	α_3	α_4	AIC
0					39268.3
1	0.9959				-9443.7
2	1.0032	-0.0073			-9047.4
3	0.9962	0.0131	-0.0127		-9146.9
4	0.9834	0.0267	0.0034	-0.0173	-8866.7

与えられる。この AIC の値が小さいほうが、より真のモデルに近いことを意味する値であり、この値の比較によってモデルの正当性を表す指標となるわけである。自己回帰モデルの場合、最大対数尤度は (3.5) 式に (3.8) 式を用いると、

$$L(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \dots, \hat{\alpha}_M, \hat{\sigma}_w^2) = -\frac{N}{2} - \frac{N}{2} \ln 2\pi\hat{\sigma}_w^2 \quad (3.10)$$

となる。これを (3.9) 式に入れて本質的な項を取り出すと、

$$\text{AIC}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \dots, \hat{\alpha}_M, \hat{\sigma}_w^2) = N \ln \hat{\sigma}_w^2 + 2(M+1) \quad (3.11)$$

となる。

以上より、解空間から得られた評価値系列データから、各々の次数 M に対して (3.7) 式より $\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \dots, \hat{\alpha}_M$ と (3.8) 式から $\hat{\sigma}_w^2$ を求める。すなわち、 M が 1 のときの AR(1) モデル、 M が 2 のときの AR(2) モデルの自己回帰モデル式を導く。そして、各々の次数 M に対する (3.11) 式を計算し AIC が最小となるような次数 M の自己回帰モデルを最適な評価値系列モデルとして採用すればよい。

そこで、表 1, 2 に前述の問題である頂点数が 100 と 500 に対する M が 0 から 4 の場合の自己回帰係数の推定値と情報量基準の値を記しておく。ただし、評価値系列上から取るデータによって多少の値の変化は見られるが、多くのケースの場合、 α_2 以降は 0 に近い値となり、実質上は 0 に近似できるものと考えても問題はないであろう。そこで、表 1, 2 では α_2 以降の値が他より顕著な場合のケースを記しておく。この結果によると、頂点数が 100、及び 500 の 2 つの場合において、共に $M = 1$ 、すなわち AR(1) モデルのケースの情報量基準が最小となり、より、真のモデルに近いことを意味する。また、自己相関関数も (2.12) 式から導いた ρ と一致しておりモデルの正当性が示される。

4. 近傍のコスト分布に対する解析

評価値ランドスケープ上のランダムウォークから得られる統計的性質の知識として解空間、近傍点などに関する基本的諸量が導出された。ここで導かれた統計的性質の知識を用いて他の性質を推定できうる。そこから評価値ランドスケープ上の重要な局所的な特徴を推論していくこととなる。Weinberger は評価値ランドスケープ上で、状態 x の評価値が与えられたもとでの次の状態 y の評価値の分布に関する期待値、分散の推定を示している。これは時系列上の2点間に着目し、次の移動する状態が振る舞う予測のモデルにより導かれた値である。

しかし、組合せ最適化問題では多数の近傍点を有しており、近傍の全体を捉えた分布のモデルとして表現はされていない。また、本節で導出される各種の統計量を求めるには不十分なモデルでもある。そこで、AR(1) モデルから得られる統計量に基づき、複雑な近傍を表すモデルを構築する。そのモデルを構築するにあたり、解コストの同時分布にガウス性が伴う仮定を利用する。ちなみに、多くの組合せ最適化問題においてその解空間にガウス性が見られることが知られてもいる [9]。これらの仮定に基づき作られた近傍のモデルは、より単純な近傍点の扱いではなく近傍の構造が確率的に表現される。

特徴として、AR(1) モデルから求められた統計的性質がこのモデルの上でもよい近似として働き、特定の問題、あるいは、特定の近傍のみに限定することなく、多くの知識が推定できることとなる。また、AR(1) モデルから求められた統計的性質と組み合わせ、ここで示した近傍の構造のモデルにより、さらなる性質を導く可能性を広げていくものである。

モデルを考察するために、まず、任意の解を x_0 として、解 x_0 に対する近傍解の集合を $\{x_1, x_2, \dots, x_b\}$ と考える。 b は近傍解の個数である。本節では F_0 を解 x_0 のコストの確率変数とすると、その近傍解コストの確率変数は F_1, \dots, F_b であり、それぞれがとる値は c_0, c_1, \dots, c_b で表す。ここで、任意の解 x_0 がコスト c_0 を持つときの解 x_0 の近傍の構造を確率的に考察する。すなわち、 $F_0 = c_0$ が与えられた条件のもとで、 (F_1, \dots, F_b) の条件付多変量分布の確率密度関数 $h(c_1, \dots, c_b | c_0)$ を導出することによりその近傍の構造を明らかにしたい。このとき、 $\mathbf{X} = (F_1, \dots, F_b, F_0)$ の同時確率分布が多変量正規分布を示す ($\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$) と仮定したならば、 $h(c_1, \dots, c_b | c_0)$ は多変量正規分布 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ となることが言われている [8]。この平均ベクトル \mathbf{m}' と共分散行列 Σ' を導き、分布の構造を特定する。そのために、同時確率分布 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ のモデルを詳細にしておく必要がある。まず、

$$\mathbf{X}_1 = (F_1, \dots, F_b)^t, \quad \mathbf{X}_2 = (F_0) \quad (4.1)$$

とおく。そして、それに対応する平均ベクトルの各要素を

$$\mathbf{m}_1 = (m_1, \dots, m_b)^t, \quad \mathbf{m}_2 = (m_0) \quad (4.2)$$

とする。また、 Σ_{11} を $F_i, i = 1, \dots, b$ と $F_j, j = 1, \dots, b$ に対する共分散行列とし、その各要素を $r_{ij}, i, j = 1, \dots, b$ と記す。 $\Sigma_{22} = (r_{00})$ は F_0 の分散とする。そして、 Σ_{12} と $\Sigma_{21} = (r_{i0})$ は F_0 と $F_i, i = 1, \dots, b$ との共分散を表すもとする。このように定義すると、同時確率分布 $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ のモデルの各要素である $\mathbf{X}, \mathbf{m}, \Sigma$ は

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{X}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{m} = \begin{pmatrix} \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{m}_2 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

とした分割形式で表される。

また、ここで必要とされる各要素の値は、AR(1) モデルの特性から導き出した基礎的な統計量を用いて決定することが可能である。これらの値を用いて有効な推定が可能であることを検証したい。前述したように組合せ最適化問題の評価値ランドスケープが AR(1) プロセスであるところから、(2.4) 式から (2.12) 式によって導き出された統計量、すなわち近傍解コストの相関係数値 ρ 、および、近似的に ρ に近い定数と仮定した近傍解コスト同士の間の相関係数値 ν などにより、

$$m_i = \mu, \quad i = 0, 1, \dots, b \quad (4.4)$$

$$r_{ii} = \sigma^2, \quad i = 0, 1, \dots, b \quad (4.5)$$

$$r_{i0}, r_{0i} = \rho\sigma^2, \quad i = 1, \dots, b \quad (4.6)$$

$$r_{ij} = \nu\sigma^2, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, \dots, b \quad (4.7)$$

として、 $X \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ のモデルを完成することができる。

そこで、 $h(c_1, \dots, c_b \mid c_0)$ の分布を導出し近傍の確率分布を特定したい。前述した $X \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{m}, \Sigma)$ の仮定のもと、 X_2 の要素が $F_0 = c_0$ として与えられた X_1 の条件付分布 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ の \mathbf{m}' と Σ' は

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m}_1 + \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}(c_0 - \mathbf{m}_2) = (m'), \quad (4.8)$$

$$\Sigma' = \Sigma_{11} - \Sigma_{12}\Sigma_{22}^{-1}\Sigma_{21} = (r'_{ij}) \quad (4.9)$$

となることが知られている [8]。すでに AR(1) モデルから得られた基本統計量により、上式の各要素の値は導くことが可能である。近傍の多変量正規分布の各々の確率変数の期待値は $m'_i = m' = \mu + \rho(c_0 - \mu)$; $i = 1, \dots, b$ となり、各々の分散は $r'_{ii} = \sigma^2(1 - \rho^2)$; $i = 1, \dots, b$ として必要な統計量が導出可能となる。

次に、近傍の構成を示す値として、解 x_0 のコストを c_0 とした場合、解 x_0 の近傍解コストの最小値を AR(1) モデルの情報に基づき推定したい。この値を求めるために重要な確率として以下のステップ確率がある [1]。

$$g(c_0, c) = Pr\{\forall i \in \{1, \dots, b\} F_i > c \mid F_0 = c_0\} \quad (4.10)$$

これは解 x_0 がコスト c_0 を持つとき、その近傍解のすべてがコスト c より大である確率を示す。さらに、このステップ確率を用いて、コスト c_0 の解からその近傍解コストの最小値であるコスト c の解へ移動する確率密度が

$$P(c_0, c) = \frac{-\frac{\partial}{\partial c} g(c_0, c)}{1 - g(c_0, c_0)} \quad (4.11)$$

の式で導出される [1]。

問題はステップ確率 (4.10) 式を導出することに帰着される。この値を求めることにより、(4.11) 式が求まることとなる。そのステップ確率は先に求めた AR(1) モデルからの基本統計量を用いて導出した近傍の確率密度関数 $h(c_1, \dots, c_b \mid c_0)$ に対して

$$g(c_0, c) = \int_c^\infty \cdots \int_c^\infty h(c_1, \dots, c_b \mid c_0) dc_1 \cdots dc_b \quad (4.12)$$

のように求めることができる。これによって特定の問題、特定の近傍に限定することなくステップ確率が計算される。 $h(c_1, \dots, c_b \mid c_0)$ は多変量正規分布 $\mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ に対応する。しかし、

(4.12) 式の多重積分の計算は数値計算的にも容易でない．そこで，多次元変数を単一化して一重積分に簡単化したステップ確率の導出を示しておく．まず，Tong の定理 (Theorem 3.3.3)[8] を用いることにより，近傍を表す b 変数確率ベクトル $X_1 = (F_1, \dots, F_b) \sim \mathcal{N}_b(\mathbf{m}', \Sigma')$ を独立した $b+1$ 変数標準正規分布を表わす確率ベクトル $Y = (y_0, y_1, \dots, y_b) \sim \mathcal{N}_{b+1}(\mathbf{0}, I_{b+1})$ で構成できる．すなわち， $X_1 = CY + \mathbf{m}'$ で変換できる．ただし， C は $b \times (b+1)$ の行列

$$C = \alpha \begin{bmatrix} \beta & 1 & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ \beta & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

であり，ここで，

$$\alpha = \sigma\sqrt{1-\nu} \quad (4.14)$$

$$\beta = \sqrt{(\nu - \rho^2)/(1-\nu)} \quad (4.15)$$

であるものとする．この $X_1 = CY + \mathbf{m}'$ と Y の独立した標準正規分布性からステップ確率 (4.12) 式を

$$\begin{aligned} g(c_0, c) &= Pr\{\forall i \in [1, \dots, b] F_i > c\} = Pr\{\forall i \in [1, \dots, b] y_i > -\beta y_0 + (c - m')/\alpha\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} Pr\{\forall i \in [1, \dots, b] y_i > -\beta y_0 + (c - m')/\alpha \mid y_0 = s\} Pr\{y_0 = s\} ds \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) Pr\{\forall i \in [1, \dots, b] y_i > -\beta s + (c - m')/\alpha\} ds \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\beta s + (c - m')/\alpha}^{\infty} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt\right)^b ds \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \left(\frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(-\frac{\beta}{\sqrt{2}}s + \frac{1}{\alpha\sqrt{2}}(c - m')\right)\right)^b ds \end{aligned} \quad (4.16)$$

と導出することができる．また，(4.11) 式は

$$P(c_0, c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(1 - g(c_0, c_0))} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{s^2}{2}} \cdot \frac{b}{\sigma\sqrt{(2-2\nu)\pi}} \left(\frac{\operatorname{erfc}(u)}{2}\right)^{b-1} e^{-u^2} ds \quad (4.17)$$

と計算される．ただし，

$$u = -s\sqrt{\frac{\nu - \rho^2}{2 - 2\nu}} + \frac{1}{\sigma\sqrt{2 - 2\nu}}(c - \rho c_0 + (\rho - 1)\mu) \quad (4.18)$$

である．ここで，パラメータとなる解コストの平均 μ と標準偏差 σ が解空間の特徴を表す値となり， b が近傍の大きさ，そして，解 x_0 のコストとその近傍解コストとの相関係数 ρ と近傍解コスト同士の相関係数 ν が解空間上における近傍構造の特徴を表す値に対応する．以上より，(4.11) 式が数値計算的に計算可能となる．

図 3 に頂点数 500 に対して解 x_0 のコスト値 c_0 が -350 の場合の (4.17) 式による近傍解コストの最小値の確率分布の一例を示す．当然 $\int_{-\infty}^{c_0} P(c_0, c) dc = 1$ である．しかし，近傍の始点となる解 x_0 のコストの値により分布の右側の裾が削られた形状となる．そこで，最小値の理論的推定値として確率の期待値を用いず，最頻度，すなわち確率値の最も高いコストを代表値と考え推定値として利用する．

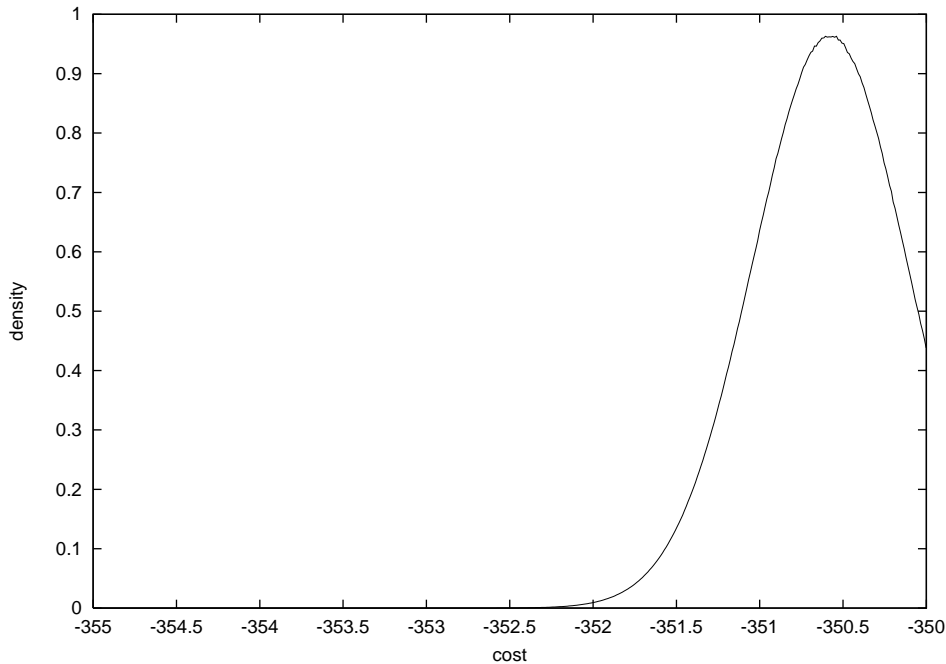


図 3: 近傍解コストの最小値の確率分布

5. 近傍に対する解析の実験結果

前節で論じた AR(1) モデルの特性から導き出した各種の統計量を用いて、近傍の構造を解析してみた。本節ではその解析した各種の推定値の実験的検証を試みている。具体的には近傍のコスト分布の特性を示すモーメントの値、また、近傍解コストの最小値の推定値である。実験対象はガウス性を伴う前述の頂点数 100 と 500 の問題を利用する。

まず、近傍が 2-opt であるケースに対して、解 x_0 の近傍解コストの期待値を理論的に導出する (4.8) 式を検証してみたい。(4.8) 式から導出される理論値の値と実際にサンプルして期待値を求めた実験値を図 4 と図 5 にプロットしており (図 4 から図 9 まで、理論値が “×”, 実験値が “+” の記号でプロットされる), それぞれ頂点数 100 と 500 の場合である。横軸が対象となる近傍の始点である解 x_0 のコスト c_0 を表し、縦軸がその解 x_0 の近傍 $N(x_0)$ におけるコストの期待値を表わす。理論値はこの c_0 と解コストの期待値 μ , および (2.12) 式から導かれた ρ の値に基づき (4.8) 式から推定される。また、解 x_0 から実際の近傍解を生成してその平均をとったものが実験値としての値である。出発点である解 x_0 のコスト c_0 は解空間 (解コスト) の平均 (約 0 の値) から Local Search で求めた局所解のコスト値までの範囲にまたがっている。図 4, 図 5 の両者において理論値と実験値が重なりプロットされており、本研究で示された理論値の有効性が認められる。

さらに、図 6 では頂点数 100, 図 7 では頂点数 500 に対しての近傍解コストの標準偏差を表わす。上記の期待値と同様に表わされており、縦軸が着目する標準偏差の値を示すものである。解コストの標準偏差である σ と ρ の値に基づき (4.9) 式によって理論値となる標準偏差の推定値がもとまる。また、実際の解 x_0 から近傍解を生成して求めた標準偏差の値を実験値として比較する。それによると、(4.9) 式によって推定される理論的な標準偏差の値はもちろんプロットされたように一定値となる。しかし、実際の問題からサンプルした標準偏差の値は多少のバラツキを示している。頂点数 100 では x_0 のコストが -30 まではかなり理論

値に近い値を示している。ちなみに、解空間（解コスト）の平均は0であり、標準偏差は約3.16である。-30を越えるとサンプルした値は理論値の下側となる傾向を示している。また、頂点数500では全体的に上側の値となるが、 x_0 のコストが-200までは落ち着いた値を示している。この場合の解空間（解コスト）の平均は0であり、標準偏差は約7.07である。必ずしも精度の良い値とはならないが、理論値にそって実際の値は分布しているといつてよいであろう。

最後に近傍解コストの最小値の推定に関して検証する。同様に頂点数100と500の場合について図8と図9に示したい。横軸のコスト c_0 をもつ解 x_0 に対して生成される近傍解コストの最小値が縦軸に示されることとなる。コスト c_0 をもつ解 x_0 の近傍解コストの最小値の推定はコスト c_0 に対して(4.11)式、すなわち、(4.17)式で求まるコスト c ($c \leq c_0$)の確率での最頻度に対応する値を理論的推定値とした。(4.17)式で求まる確率は、提案しているAR(1)モデルから導出された各々の値、すなわち、 μ, σ, ρ, ν の結果から導き出された値であることは言うまでもない。また、近傍の大きさ b の値は頂点数を n とすれば2-opt近傍で $n \cdot (n - 3) / 2$ となる。実験値は実際の解 x_0 の近傍解コストの最小値である。図8と図9とも理論的推定値の値とサンプルから得られた最小値の値のプロットは重なる結果となり、今回導出した最小値の値は有効な推定値となることが判明した。

表3と表4では上記の理論的および実際にサンプルから計測した実験的な近傍解コストの期待値、標準偏差、最小値の数値を5つのケースについて参考までに示しておく。順に解 x のコスト、解 x に対しての近傍解コストの実験的期待値、理論的期待値、実験的標準偏差、理論的標準偏差、実験的最小値、理論的最小値の値が記されている。以上の結果は、本問題のケースにおいて、その解空間における評価値ランドスケープの構造がAR(1)プロセスとしてモデル化することが有効であり、そこから見積もられた値を用いて推定した近傍解コストの統計的データ、および最小値の推定のモデルの有効性が示される一つのデータとなるものである。

また、異なる出発点からLocal Searchを始めた場合のケースを調べ、選ばれた出発点にかかわらず同様な結果となることを調べておきたい。表5と表6は異なる出発点でLocal Searchを行った場合での先の実験と同様に行なった結果の一例を示している。異なる出発点による他のケースにおいても結果の特徴は前述の実験と同様な傾向を示した。また、後述する異なる近傍を用いた実験、および実際的なベンチマーク問題に対して行なった実験でもLocal Searchの出発点に依存することなくそれぞれ同じ傾向を示したことをここに付記しておく。これは組合せ最適化問題の多くが統計的に等方的なランドスケープである性質を有していることを示す一つの現象であろう。

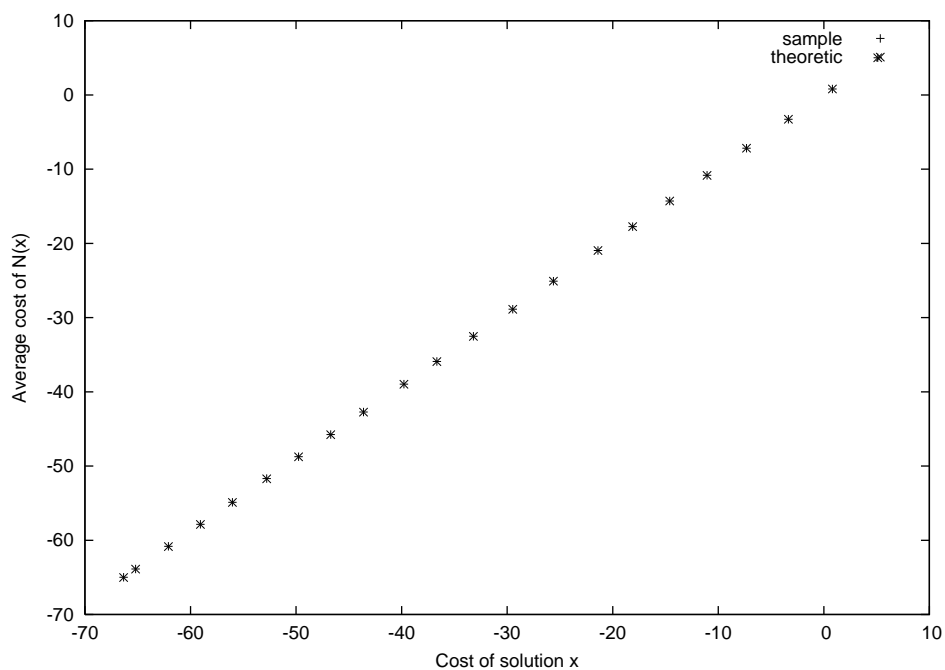


図 4: 頂点数 100 での近傍解コストの理論的および実験的平均値

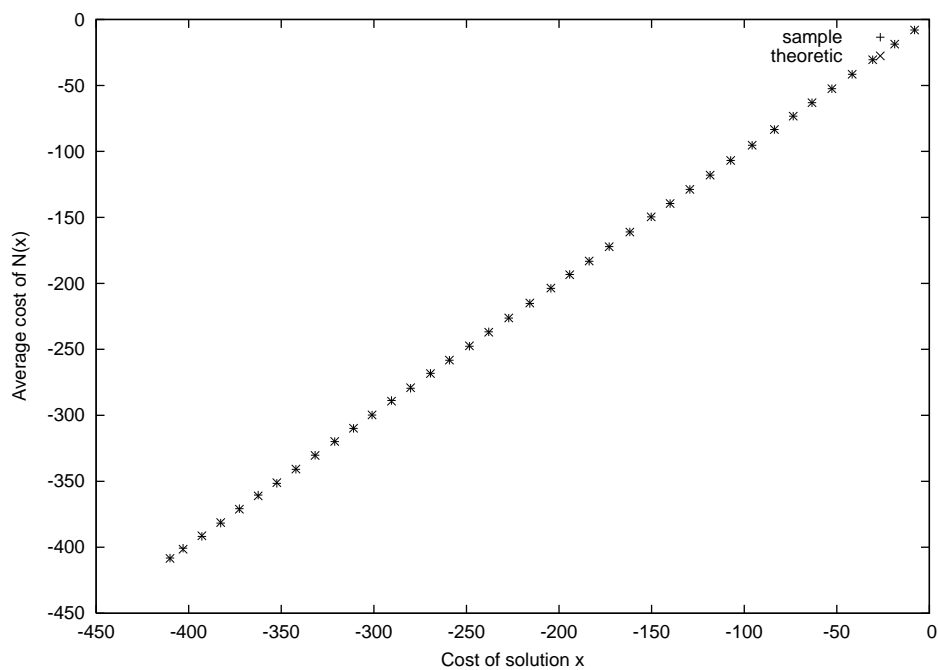


図 5: 頂点数 500 での近傍解コストの理論的および実験的平均値

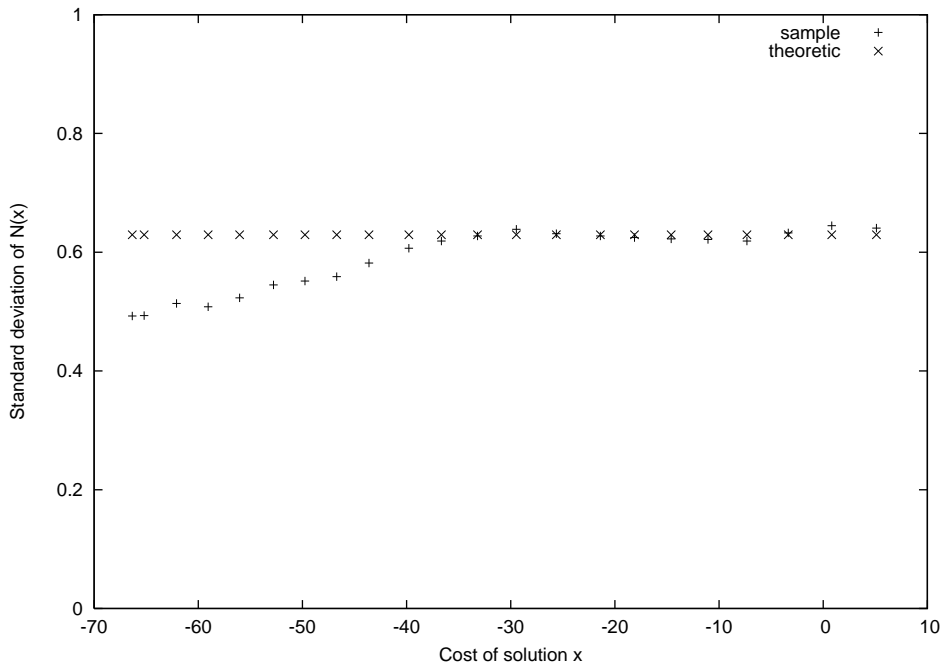


図 6: 頂点数 100 での近傍解コストの理論的および実験的標準偏差値

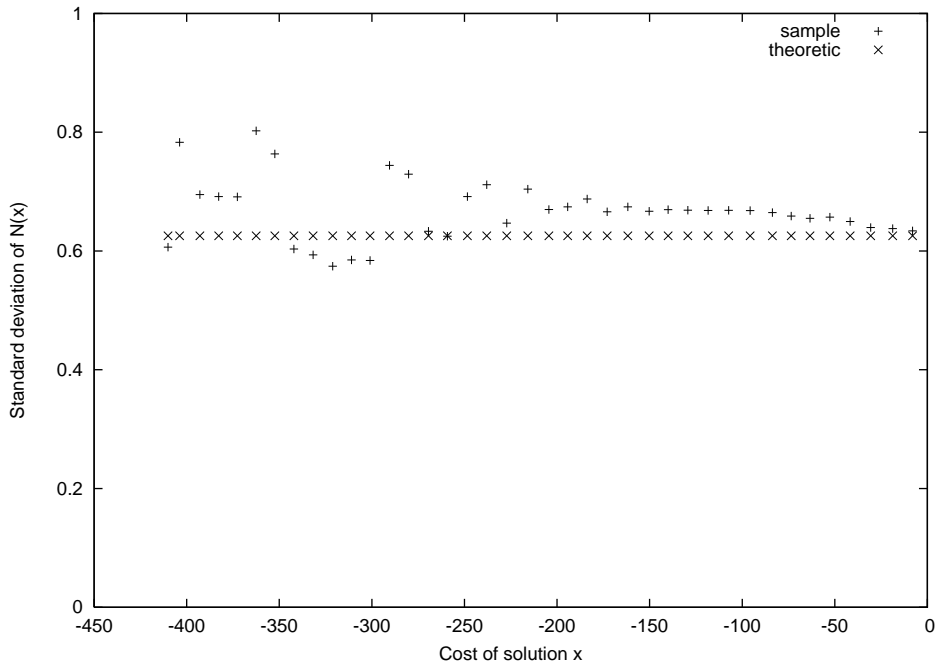


図 7: 頂点数 500 での近傍解コストの理論的および実験的標準偏差値

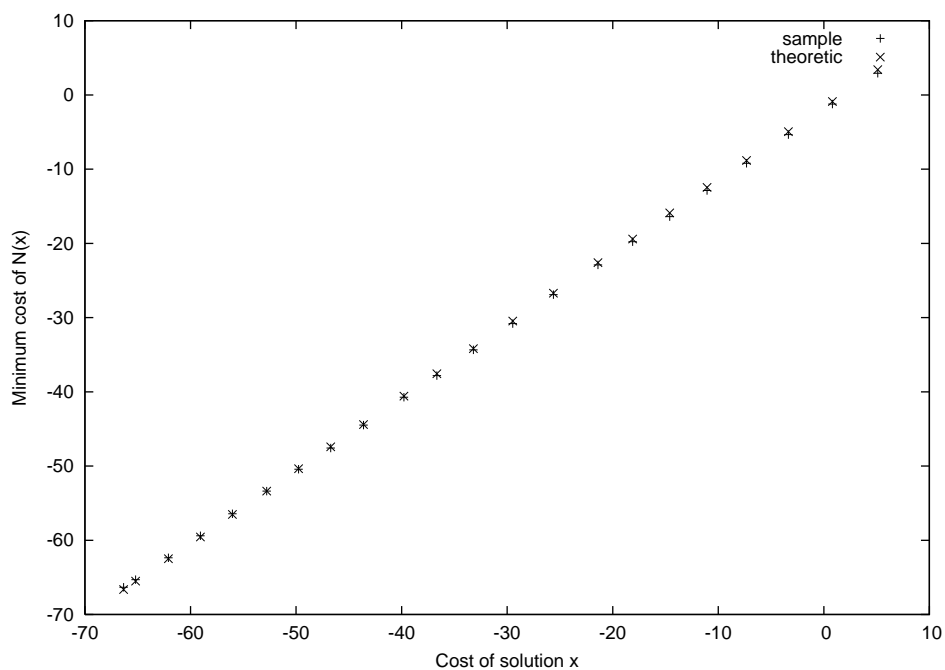


図 8: 頂点数 100 での近傍解コストの理論的および実験的最小値

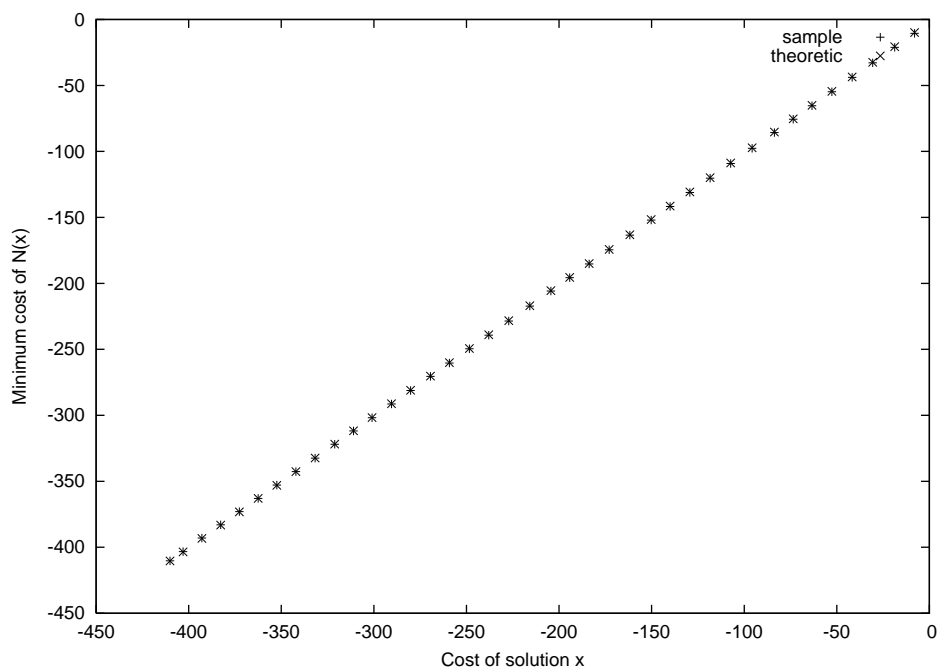


図 9: 頂点数 500 での近傍解コストの理論的および実験的最小値

表 3: 頂点数 100 の 2-opt 近傍に対するデータ

f(x)	SampAve	TheoAve	SampSTD	TheoSTD	SampMin	TheoMin
-0.67	-0.65	-0.65	0.62	0.63	-2.86	-2.27
-10.80	-10.59	-10.59	0.63	0.63	-12.54	-12.21
-25.14	-24.63	-24.64	0.62	0.63	-26.47	-26.24
-45.32	-44.39	-44.41	0.56	0.63	-46.07	-46.01
-64.95	-63.63	-63.65	0.49	0.63	-65.17	-65.25

表 4: 頂点数 500 の 2-opt 近傍に対するデータ

f(x)	SampAve	TheoAve	SampSTD	TheoSTD	SampMin	TheoMin
-16.35	-16.28	-16.28	0.63	0.62	-18.74	-18.25
-101.55	-101.15	-101.14	0.67	0.62	-103.44	-103.05
-200.06	-199.48	-199.26	0.68	0.62	-201.51	-201.26
-300.95	-299.77	-299.74	0.58	0.62	-301.87	-301.75
-402.24	-400.19	-400.63	0.66	0.62	-402.34	-402.63

表 5: 頂点数 100 の 2-opt 近傍に対するデータ (異なる出発点で Local Search を実行した場合)

f(x)	SampAve	TheoAve	SampSTD	TheoSTD	SampMin	TheoMin
-0.49	-0.48	-0.48	0.64	0.63	-2.76	-2.09
-12.62	-12.36	-12.37	0.63	0.63	-14.20	-14.02
-26.18	-25.64	-25.65	0.62	0.63	-27.58	-27.28
-43.06	-42.18	-42.20	0.57	0.63	-43.98	-43.86
-64.52	-63.20	-63.23	0.49	0.63	-64.65	-64.82

表 6: 頂点数 500 の 2-opt 近傍に対するデータ (異なる出発点で Local Search を実行した場合)

f(x)	SampAve	TheoAve	SampSTD	TheoSTD	SampMin	TheoMin
-23.26	-23.17	-23.17	0.64	0.62	-25.87	-25.16
-100.43	-100.01	-100.03	0.67	0.62	-102.29	-102.03
-202.21	-201.19	-201.40	0.68	0.62	-203.64	-203.41
-300.49	-299.33	-299.28	0.58	0.62	-301.32	-301.29
-400.89	-399.78	-399.29	0.70	0.62	-401.03	-401.29

6. 汎用性に対する数値実験

前述した解析において、解空間における近傍点のランダムな評価値系列を AR(1) モデルとしてとらえ解空間、評価値系列の統計量を推定し、さらに、解コストの同時分布にガウス性がある仮定のもと近傍の解析を行った。前者においては 2-opt 近傍に基づく評価値系列解析からモデル化を行なった。また、後者のために対象とする問題にガウス性があるものを採用した。しかし、本問題の主旨である汎用性、すなわち近傍、および問題に依存しない解析を鑑みると、その他の近傍での結果、およびより実際的な問題での検証が必要であろう。そこで、本節では、異なる近傍での結果と、より実際的であるベンチマーク問題での一例などを示し、汎用性に関する可能性を述べる。また、近傍の違いで異なる点、および近傍の有効性に関しても実験の結果とあわせて示しておく。

まず、異なる近傍でも解空間における近傍点のランダムな評価値系列が同様に AR(1) としてモデル化でき、かつそれらの統計量を用いて近傍の分布の解析が可能であることを示したい。異なる近傍として、TSP 問題での近傍の一つである挿入近傍 [10] を用いる。ただし、対象とする問題は前述と同様な 2 つのグラフを用いることとする。前述の実験と同様に、挿入近傍に基づくランダム移動による評価値系列データを生成し、指数的に減衰する関数の振る舞いとを比較を行なった。図 10 が頂点数 100 であり、図 11 が頂点数 500 の結果である。2-opt 近傍の場合と同様に、AR(1) の特徴である指数的減衰性を示しており、挿入近傍の場合も AR(1) としてモデル化することが可能であろう。このモデル化により、2-opt と同様にいくつかの統計量が得られる。このとき、同一な問題事例を用いており、当然、解空間（解コスト）の平均 μ 、分散 σ^2 の値は 2-opt でのケースと等しい値となる。相関関数 ρ の値は、2-opt で頂点数 100 の場合は 0.98 であり、頂点数 500 の値は 0.996 となった。この挿入近傍での場合は、頂点数 100 では 0.97、頂点数 500 では 0.994 となる。この値の違いが後述する近傍の分析での違いに反映する特性量の一つとなる。さらに、これらの統計量を用い

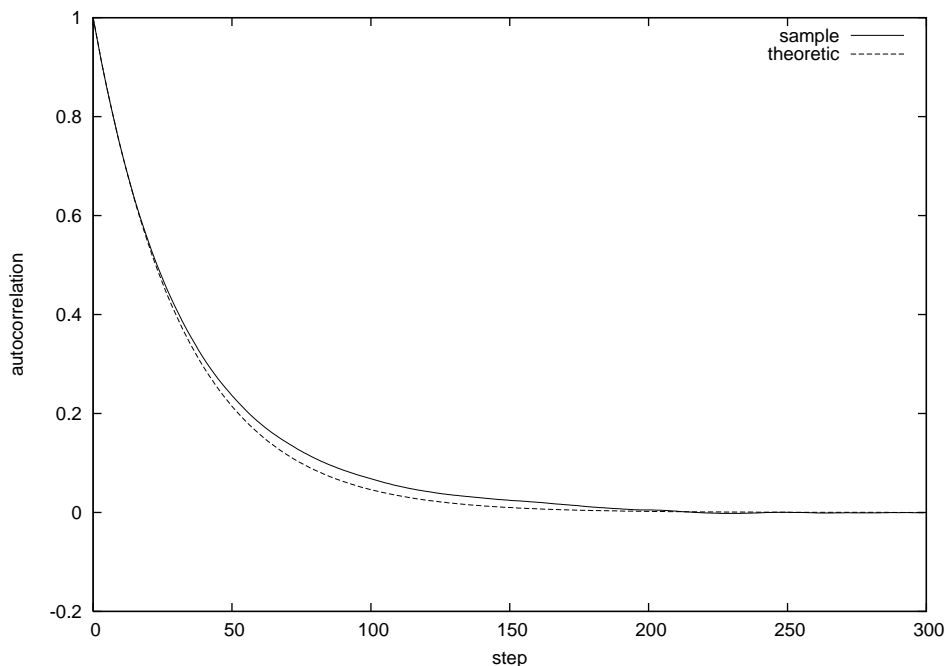


図 10: 挿入近傍による頂点数 100 の自己相関関数の振る舞い

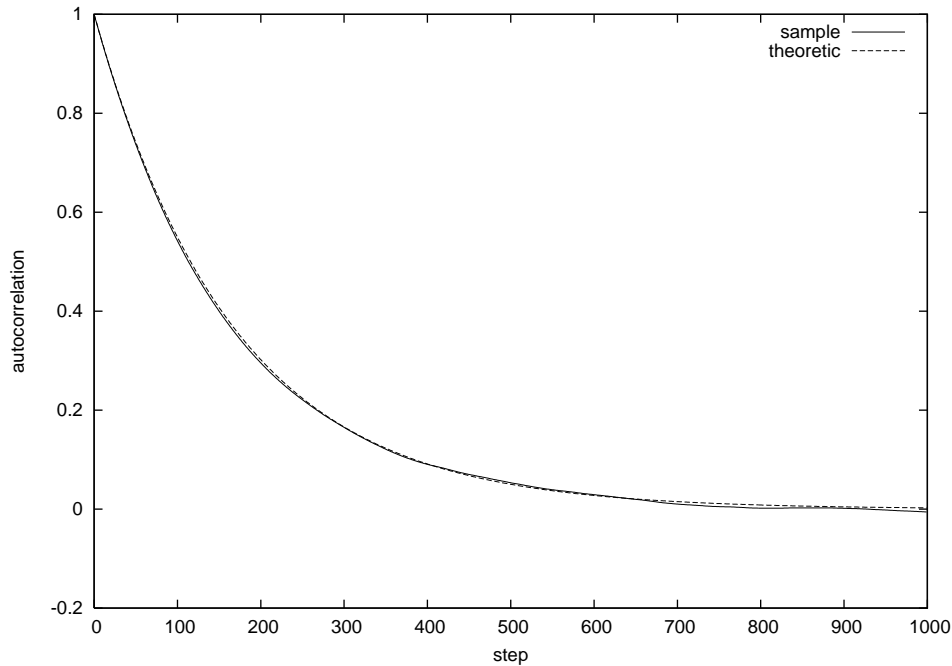


図 11: 挿入近傍による頂点数 500 の自己相関関数の振る舞い

て近傍解コストの期待値，分散，最小値を節 5 の 2-opt 近傍の場合と同様な方法で推定する．このときの近傍の大きさは $n \cdot (n - 2) / 2$ となり，近傍の大きさの違いも推定値に反映する値の一つとなる．その結果の一部が表 7，表 8 に示されており，それぞれ頂点数 100 と頂点数 500 に対応する．その結果，両者とも期待値，最小値の推定値は実際の値と近似した値を示している．分散は一部のデータである表からは読み取れないが，頂点数 100 の場合は近傍の始点の解 x のコスト値が 0（解空間のコスト平均）から -30 までは推定値に近い値をほぼ示し，-30 から局所解に達する -60 にかけて，徐々に低い値へと離れていく傾向がある．また，頂点数 500 の場合での分散は，解 x のコスト値が -200 まではほぼ推定値と近似しており，局所解に達する -350 にかけて多少のバラツキが見られる．分散に関しては多少のばらつきも見られるが概ね理論値にそった値を示しているといつてよいであろう．この結果から異なる近傍である挿入近傍においても，AR(1) プロセスとしてとらえた統計量が有効に利用可能であり，かつそれらを用いて推定した近傍の特性値の結果も良好であり，推定モデルの有効性が示されたものである．

次に，最終的に得られた近傍分布の最小値を用いて Local Search のシミュレーションの結果を示しておきたい．図 12 は頂点数 100 の問題に対して先の解析から求めた 2-opt 近傍と挿入近傍の結果である．Local Search の出発点をコスト 0 として，それを始点とするそれぞれの近傍解コストの最小値へ移動し，その移動した点を始点として近傍解コストの最小値へと移動を反復したものである．特徴としてある段階まで挿入近傍の探索力が勝り，その後 2-opt 近傍の探索力が勝りより深く探索を行なっている．実際においても，挿入近傍を用いた局所解の値は -55，2-opt 近傍では -65 前後と 2-opt 近傍の優位性が示された．また，実際の探索でもある段階（40 から 50 ステップ）まで挿入近傍が優位であり，それ以後 2-opt 近傍の優位へと移り変わっている．ただし，実際は挿入近傍で約 60 ステップ，2-opt 近傍で約 80 ステップで局所解に落ちいる．先のシミュレーションではある値に収束する手前で Local Search の局所解に達している．このような結果から，近傍の違いによる特徴などがこの解

表 7: 頂点数 100 の挿入近傍に対するデータ

f(x)	SampAve	TheoAve	SampSTD	TheoSTD	SampMin	TheoMin
-15.58	-15.07	-15.09	0.79	0.78	-17.61	-17.18
-29.99	-29.03	-29.05	0.75	0.78	-31.27	-31.09
-40.34	-39.09	-39.09	0.73	0.78	-41.36	-41.14
-50.08	-48.50	-48.52	0.64	0.78	-50.48	-50.58
-54.99	-53.28	-53.28	0.61	0.78	-55.26	-55.28

表 8: 頂点数 500 の挿入近傍に対するデータ

f(x)	SampAve	TheoAve	SampSTD	TheoSTD	SampMin	TheoMin
-2.13	-2.12	-2.12	0.78	0.77	-5.38	-4.53
-100.66	-99.98	-100.05	0.81	0.77	-102.69	-102.46
-200.88	-199.73	-199.67	0.77	0.77	-202.32	-202.07
-299.70	-297.59	-297.90	0.70	0.77	-300.20	-300.30
-339.82	-337.30	-337.78	0.78	0.77	-340.15	-340.22

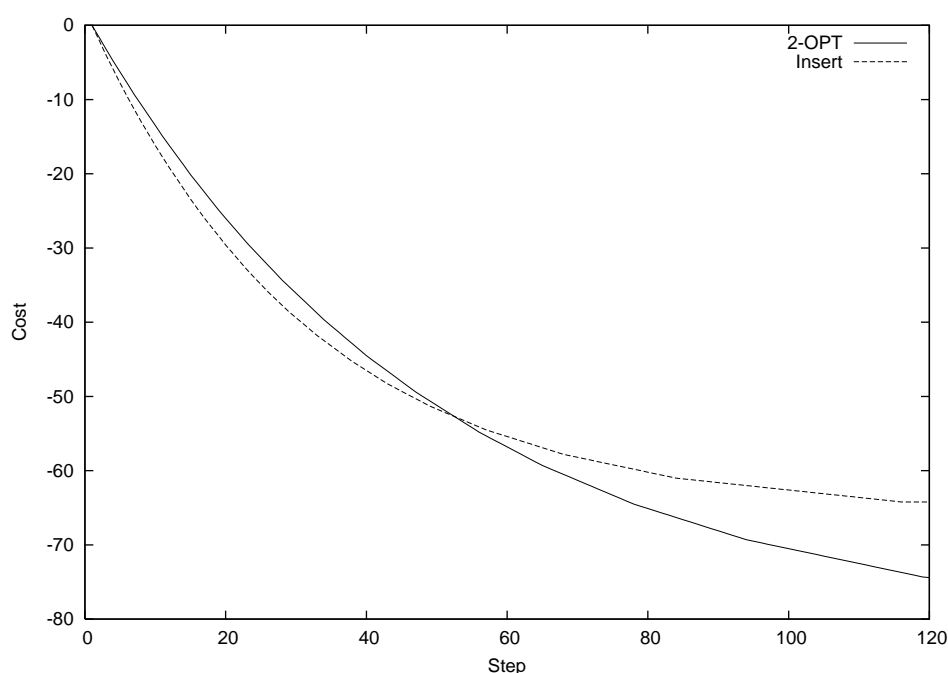


図 12: 2-opt 近傍と挿入近傍による Local Search のシミュレーション

析からもあらわれ、および解空間でのポジションでのそれぞれの近傍の探索能力なども説明する手立てともなるであろう。

最後に、TSPLIB のベンチマーク問題での実験結果について述べておきたい。前述までは、近傍の分布の解析を行うのにガウス性の仮定が必要なため、問題事例に強いガウス性があるものを扱った。しかし、多くの組合せ最適化問題の評価値ランドスケープにガウス性

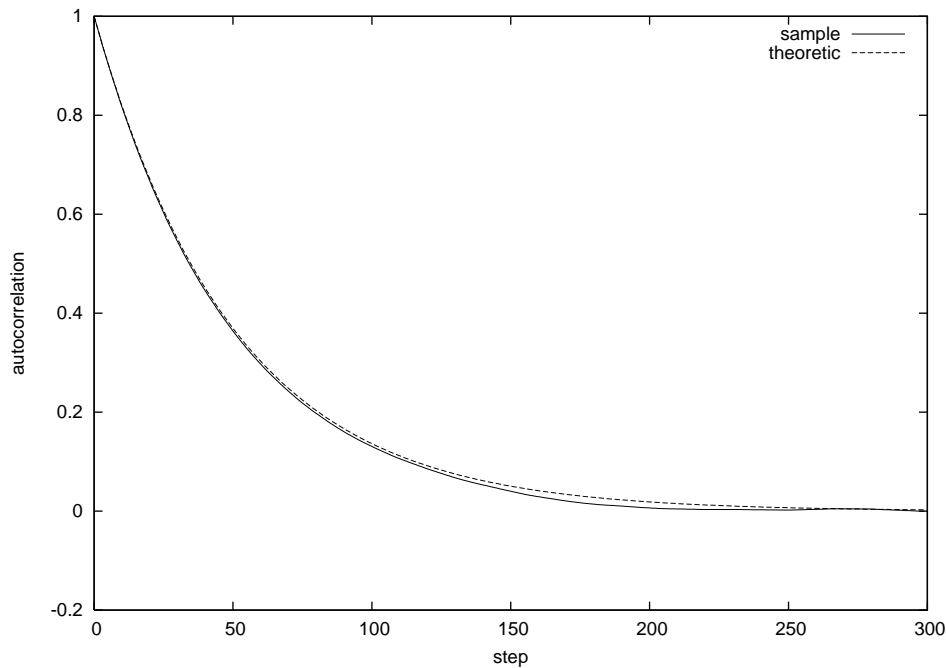


図 13: eil101.tsp に対する 2-opt 近傍での自己相関関数の振る舞い

表 9: eil101.tsp の 2-opt 近傍に対するデータ

f(x)	SampAve	TheoAve	SampSTD	TheoSTD	SampMin	TheoMin
2276	2299.0	2298.8	31.3	27.5	2213	2227
1408	1448.9	1448.5	29.9	27.5	1378	1377
1096	1142.9	1142.3	29.8	27.5	1072	1070
843	894.9	894.3	30.1	27.5	834	823
726	780.7	780.1	29.9	27.5	718	708

が伴うと言われているが [9]，実際の問題では本対象問題と比較して強いガウス性があるとは断言できない．そこで，TSPLIB のベンチマーク問題の eil101.tsp に対する結果を示し，実際の問題での有効性を検証してみたい．まず，2-opt 近傍に基づき eil101.tsp の解空間のランダムウォークにより自己相関関数の振る舞いを検討する．その結果を図 13 に示す．この結果からも AR(1) の特徴である指数的減衰性が同様に認められる．また，この AR(1) の特徴に関してはその他の TSPLIB の問題でも示されており，通常の TSP 問題に対して解空間の評価値ランドスケープを AR(1) でモデル化可能であると考えられる．さらに，AR(1) モデルから導出される統計量を用いて近傍の分布の解析を行なった結果を表 9 に示す．その結果をみると，近傍解コストの期待値の推定値はかなり精度の高い値として求まっている．分散ではほぼ理論値が 27.5 であるのに対して，実際の分散は近傍の始点となる任意の解 x に対してほぼ 30 前後と一定した結果を示していた．また，近傍解コストの最小値は近傍の標準偏差の約 $1/3$ 以内の値を示しており近似した値が求まるものと言ってよいであろう．その他いくつかの TSPLIB のケースにおいても同様な傾向が見られ，実際的なベンチマークの問題においても利用可能であり，解空間における近傍点のランダムな評価値系列を AR(1) モ

デルとして近似し、かつ解空間のガウス性を仮定した本モデルが多くの問題に適用可能であるものと考えられる。

本節で試みた異なる近傍でのケース、実際の事例での結果などから AR(1) モデルを用いることにより汎用的な解析として本提案モデルが利用できるものである。すなわち、多くの組合せ最適化問題における評価値ランドスケープは AR(1) としてモデル化することが可能であり、そこから得られる統計量が有効であること、そして、解空間にガウス性が伴う仮定の上で汎用的な近傍の解析モデルとして有効に働くことの一例となったことを示した。

7. おわりに

計算困難な組合せ最適化問題の近似解を求めるための手法としてメタヒューリスティックスの研究、開発がなされている。この手法のベースとなる近傍の構造を解析することは、近傍生成などにおける知識獲得を可能とし、メタヒューリスティックスの改良につながる知見となりうる。また、アルゴリズムの良し悪しを解析するための確率的解析の基本的情報をも提供するものである。

そこで本論文では、近傍の分布の特性を確率的に解析するために、評価値ランドスケープの構造を統計的に明らかにした。解空間、近傍点の特性を示す各種の統計量を導出するために、評価値ランドスケープ上の評価値系列が AR(1) プロセスと呼ばれる特徴的な性質を有するという仮定を検証し、そこから必要な統計量を導き出した。さらに、AR(1) プロセスから導き出した統計量と、解空間にガウス性を伴う仮定を用いて近傍の構造を確率的にモデル化し、近傍の特性の解析に成功した。確率的な解析では通常、モデルを構築しやすいように、特定の問題、および特定の近傍などを設定して、このような統計量を導出した。しかし、ここで提唱する AR(1) モデルを用いることにより、多くの組合せ最適化問題、あるいは各種の近傍などに対応する汎用的な解析が可能となったところに特徴があり、一般性に富んだ有効な解析方法を提案した。

今回の数値実験による検証では、代表的組合せ最適化問題の一つである巡回セールスマン問題を使用し、扱いやすいレベルから解析されている。主要な問題事例としてガウス性を強く伴うタイプに対して 2-opt 近傍のケースの検証を行った。さらに、異なる近傍である挿入近傍の場合と、問題事例として TSPLIB のベンチマーク問題の一例を示した。異なる近傍、いずれの解空間でも AR(1) の特徴的な性質を有し、理論的な推定値も実際の値に近似した傾向となり、モデルの汎用的有効性が示された。本研究の手始めとして有効な結果を得たものであるが、さらに、今後は巡回セールスマン問題においてもより広範囲な問題を適用して確認をしていき、問題があれば修正モデルの検討を加えていきたい。そして、その他の組合せ最適化問題へと拡張して本モデルの有効性を確認していくことが次の課題となるであろう。また、アルゴリズムの特性を示す解析モデルの構築、および、本論文で得られた近傍の構造の情報をもとに有効なメタヒューリスティックスの開発を試みられれば幸いである。

参考文献

- [1] H.M.M. Eikelder, M.G.A. Verhoeven, T.W.M. Vossen and E.H.L. Aarts: A probabilistic analysis of local search. In I.H. Osman and J.P. Kelly (eds.): *Meta-Heuristics: Theory & Applications* (Kluwer, 1996), 605–618.
- [2] F. Glover and M. Laguna: *Tabu Search* (Kluwer, 1997).
- [3] T. Kaji: Probabilistic analysis of local search using AR(1) model in the graph partition-

- ing problem. *Proceedings of the Fifth Metaheuristics International Conference*, Paper ID 38 (2003).
- [4] 小西貞則, 北川源四郎: 情報量基準 (朝倉書店, 2004).
- [5] P.M. Pardalos and M.G.C. Resende: *Handbook of Applied Optimization* (Oxford University Press, 2002).
- [6] M.B. Priestley: *Spectral Analysis and Time Series* (Academic Press, 1981).
- [7] H. Szu and R. Hartley: Fast simulated annealing. *Physics Letters A*, **122** (1987), 157–162.
- [8] Y.L. Tong: *The Multivariate Normal Distribution* (Springer-Verlag, 1990).
- [9] E. Weinberger: Correlated and uncorrelated fitness landscapes and how to tell the difference. *Biological Cybernetics*, **63** (1990), 325–336.
- [10] 柳浦睦憲, 茨木俊秀: 組合せ最適化 (朝倉書店, 2001).

加地太一

小樽商科大学商学部社会情報学科
〒047-8501 北海道小樽市緑3-5-21

ABSTRACT

PROBABILISTIC ANALYSIS OF NEIGHBORHOOD USING AR(1)
MODEL FOR COMBINATORIAL OPTIMIZATION PROBLEMS

Taichi Kaji
Otaru University of Commerce

Metaheuristics are powerful methods used to find approximate solutions for hard combinatorial optimization problems. Successful designs of the neighborhood are required in order to construct better metaheuristics algorithms. Analysis of the neighborhood is useful for enhancing the ability of metaheuristics and will allow us to compute the probabilistic average-case analysis for the algorithm of metaheuristics.

In the present paper, we attempt to construct a model that enables theoretical probabilistic analysis of the neighborhood. Therefore, we confirm the hypothesis whereby the AR(1) process captures the statistics of walks on the solution spaces of the combinatorial optimization problem and estimate the characteristic quantity on the solution spaces. In addition, we formulate a probabilistic model that captures the feature of the neighborhood using the statistics from the AR(1) process under the hypothesis that the solution variables are jointly Gaussian. However, in the common approach, the probabilistic analysis model is constructed for the restricted version of the neighborhood. Therefore, we introduce an AR(1) model that enables a probabilistic model to be formulated for various types of neighborhood. The theoretical results obtained using the concept of the AR(1) model fit the empirically observed behavior well.