

第11回 整数計画法III

— 近似解法 —

11.1 近似解法

巡回セールスマン問題を多項式時間で解くアルゴリズムは現在のところ見つかっておらず、存在しないであろうと予想されている。また、巡回セールスマン問題に限らず、組合せ最適化問題は厳密に最適解を求めるためには指数時間かかるものが多い。

どのくらいの時間で問題を解くことができるかによって、問題を大まかに分けることができる。

クラス P: 多項式時間で答え (yes か no か) が求まる問題からなる集合.

クラス NP: 答え (yes か no か) を求めるのに指数時間かかるが, 答えが yes である証拠が与えられているときに, yes であることを検証するのは多項式時間でできる問題からなる集合.

クラス NP 困難: クラス NP に含まれるどの問題よりも難しいか, 同等に難しい問題からなる集合 (例: 巡回セールスマン問題)

NP 困難な問題のように、厳密に最適解を求めるのに非常に時間がかかる（たとえば、高性能コンピュータ 100 台を 10 億年走らせてやっと答えが出る）問題でも、近似最適解であれば現実的な時間で解くことができる場合もある．近似最適解を求める解法は、ヒューリスティック解法（発見的解法）と呼ばれている．

欲張り法では一般に最適解を求めることはできないが，近似最適解を求めることはできる．ここでは，巡回セールスマン問題を例に取り，欲張り法の考え方を使ったいくつかのヒューリスティック解法を紹介する．

最近近傍法: ある節点から出発して、まだ訪れていない節点のうち現在の節点から最も近い節点へ移動して行き、閉路を求めるやり方。たとえば、図 10.2 で、出発点を節点 1 とすると、 $(1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 1)$ が得られる。出発点を節点 3 とした場合は、_____が得られる。

挿入法：小さな巡回路を考え，巡回路に含まれない節点を順々に巡回路に組み入れて，全節点をとる巡回路を求めるやり方．組み込む節点の選び方によって，最近挿入法，最遠挿入法，最廉挿入法がある．

たとえば，最近挿入法の具体的手順は以下のとおり．ただし，巡回路 R と節点 i の距離を

$$d(R, i) = \min_{j \in R} a_{ij}$$

で定義する（ a_{ij} は枝 e_{ij} の長さ．）

1. 任意に節点 i_0 を選び， $R = \{i_0\}$ とおく．
2. $d(R, i)$ が最小となる $i \notin R$ を選ぶ．
3. $a_{ij} = d(R, i)$ となる $j \in R$ に対して，節点 j の直前に i を経由する巡回路 $R \leftarrow R \cup \{i\}$ を作る．
4. R が全ての節点を含んでいれば終了．そうでなければ 2. にもどる．

ただし， R 内の節点数が 3 未満のうちは， R を特に巡回路とは見なさずに作業をする．前回と同じネットワークの例では，

- (1) $i_0 = 1$ とする．
- (2) R に最も近い節点として $i = 3$ を選び， $R = \{1, 3\}$ とする．
- (3) R に最も近い節点として $i = 2$ を選ぶ． $R = \{1, 3, 2\}$ とする．
- (4) $i = 4$ を選ぶ．最も近いのは節点 2 なので，2 の前に挿入し $R = \{1, 3, 4, 2\}$ とする．

となる．

最遠挿入法では， R に追加する節点として _____ 節点を選択する．また，最廉挿入法では，_____ の長さが最小である節点を選ぶ．

11.2 メタヒューリスティックス

NP 困難な問題であっても，ヒューリスティック解法によって近似最適解を効率的に求めることができる．また，近似最適解に対して修正を加えることによって，よりよい近似最適解を得ることができる問題もある．このように，より良い近似最適解を求める戦略を，メタヒューリスティックスと呼ぶ．

ここでは，いくつかの代表的な方法の概要のみを説明する．

局所探索法：与えられた近似最適解の近くにある実行可能解の中で，目的関数が現在より小さくなる解を選び，次の最適解とする．近くにある解の中で，現在の解が最もよければ終了．

現在の解の「近くにある解」を _____ という．局所探索法では，

- ・近傍の定義のしかた
- ・複数ある近傍の中で，次の解をどのように選ぶか

等によって，計算量や近似最適解の善し悪しが変わってくる．

欠点は _____

局所探索法の欠点を補うためには，初期解を変化させて何度も局所探索法を繰り返す等の手段が取られるが，別の考え方として，多少の改悪も認めて近似をよくして行く方法もある．

焼きなまし法：各繰り返しにおいて，近傍からランダムに解を選ぶ．改良になるのなら即，その解を次の近似最適解とし，改悪になる場合は，「改悪」の大きさに応じて確率的にそれを次の近似最適解にするかどうかを決める．

しかし，このままだといつまでも収束しないので，繰り返しの初期段階では，大きな改悪も高い確率で起こるようにし，徐々に改悪の確率を下げていく．改悪となる解を選択する確率を温度と考え，徐々に温度を下げていく．

タブー探索法：局所探索法において，局所的最適解に落ちてしまうのを避けるために，近傍の中で現在より改良となる解が見つからない場合は，最も改悪の量が少ない解に移動する．

しかしこうすると，幾つかの解が繰り返し現れてエンドレスになる可能性があるので，すでに近似最適解として選ばれた解のリストを保存しておき，未だ選んでいない解の中で最もよい解へと移動する．

すでに選ばれていてもう選ぶことのできない解のリストを _____ と呼ぶ．このリストは無限に大きくなりうるため， _____

この他，遺伝的アルゴリズムやニューラルネットワークといった手法もある．

メタヒューリスティックスは，様々な問題に対しする解法となりうる．しかし，パラメータをどのように選ぶかによって計算の効率がまったく変わってくる．現在のところ，どのようにパラメータを決定したら効率がよいかについて，理論的に解明されている部分は少ない．したがって，与えられた問題に対する適切なパラメータの値は，算実験を繰り返すことによって求める必要がある．

11.3 整数計画法のまとめ

[課題 11.1] 欲張り法の特徴，長所，短所を説明せよ．

[課題 11.2] 0-1 問題に対する連続緩和問題とはどういうものか，また，0-1 問題と連続緩和問題の最適解の関係はどのようなになっているか，説明せよ．

[課題 11.3] 連続緩和問題を利用した組合せ最適化問題の解き方に，問題を部分問題に分解し，最適解を持たない部分問題を終端させることによって，しらみつぶしに解くよりも効率的に最適解を探索する方法がある．これを何法というか．

[課題 11.4] ダイクストラ法のように，問題の最適解が，小さい問題の最適解となっていることを利用した解き方を何法というか．

[課題 11.5] ヒューリスティック解法とはどのようなものか．また，メタヒューリスティック解法とはどのようなものか．

非線形計画法 III

— 導入 —

11.4 非線形計画法の概要

非線形計画問題とは，一般に次のように定式化される最適化問題である．

目的関数： $f(\mathbf{x}) \rightarrow$ 最小化

制約条件： $\mathbf{x} \in S$

$\mathbf{x}$ は n 変数ベクトル $(x_1, \dots, x_n) \in R^n$ ， $f: R^n \rightarrow R$ は実数値をとる関数， S は n 次元空間 R^n の部分集合（実行可能領域）． $S = R^n$ のとき，つまり，

目的関数： $f(\mathbf{x}) \rightarrow$ 最小化

である問題を制約なし問題と呼ぶ．

大域的最適解: その問題に対する，本当の最適解．

局所的最適解: $\mathbf{x}$ の十分近くのどの実行可能解 $\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}$ に対しても $f(\mathbf{x}) < f(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x})$ であるような $\mathbf{x}$ を，局所的最適解という．局所的最適解はたくさんある可能性がある．大域的最適解は局所的最適解のうちの 1 つである．

凸関数: 関数 f が

$$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in R^n, 0 \leq \alpha \leq 1$$

$$\Downarrow$$

$$f(\alpha\mathbf{x}_1 + (1 - \alpha)\mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + (1 - \alpha)f(\mathbf{x}_2)$$

を満たすとき， f は凸関数であるという（下に凸）

凸集合: ある集合 S が，

$$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S, 0 \leq \alpha \leq 1 \Rightarrow \alpha\mathbf{x}_1 + (1 - \alpha)\mathbf{x}_2 \in S$$

を満たすとき， S は凸集合であるという．

凸計画問題: f が凸関数, S が凸集合であるような非線形計画問題.

定理 11.1 凸計画問題には, 局所的最適解は 1 つしかなく, それが大域的最適解となる.

したがって, 凸計画問題では局所的最適解を求めれば十分である. しかし, 一般に, 凸計画問題でない非線形問題に対しては多くの局所的最適解が存在する. この講義では, 局所的最適解を求めることを目標とする. また, f は 2 階微分可能な関数であるとする.

11.5 勾配とヘッセ行列

関数の勾配: 点 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ における関数 $f(\mathbf{x})$ の勾配を次の $\nabla f(\mathbf{x})$ で表す.

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

$\nabla f(\mathbf{x})$ は, 点 $\mathbf{x}$ 付近において, f が最も増加する方向と, その増加量を示す. 詳しく言えば, $\nabla f(\mathbf{x}) \neq \mathbf{0}$ である場合, $\mathbf{x}$ から $\nabla f(\mathbf{x})$ 方向 $\pm 90^\circ$ の方向に (わずかに) 進むと $f(\mathbf{x})$ の値は必ず増加し, 逆に, $-\nabla f(\mathbf{x})$ 方向 $\pm 90^\circ$ の方向に (わずかに) 進むと $f(\mathbf{x})$ の値は必ず減少する.

$f(\mathbf{x})$ の値が等しい $\mathbf{x}$ からなる線 (面) を等高線 (面) という. 勾配を示すベクトルは, $f(\mathbf{x})$ の等高線と _____ になっている.

ヘッセ行列: $\nabla f(\mathbf{x})$ をさらに微分した行列:

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{(\partial x_1)^2} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{(\partial x_2)^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{(\partial x_n)^2} \end{pmatrix}$$

を, ヘッセ行列と呼ぶ.

$\frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_j \partial x_i}$ であるから, ヘッセ行列は _____ 行列である. ヘッセ行列は, 点 $\mathbf{x}$ 付近で, f の勾配がどうなっているかを示している. ヘッセ行列と, 関数の幾何学的な性質との関係について, もう少し調べてみよう. 解析の道具は,

- 対称行列の固有値は全て実数となる.

- 任意のベクトル $\mathbf{x}$ に対して $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0$ となる行列 $\mathbf{A}$ を半正定値と呼ぶ．行列 $\mathbf{A}$ が対称行列であるとき， $\mathbf{A}$ が半正定値であることと $\mathbf{A}$ の全ての固有値が非負であることは等価．
- 全てのベクトル $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ に対して $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ となる行列 $\mathbf{A}$ を正定値と呼ぶ．行列 $\mathbf{A}$ が対称行列であるとき， $\mathbf{A}$ が正定値であることと全ての固有値が正であることは等価．

まず，関数の例として，2 次の2 変数関数 $f(x, y) = x^2 + 2y^2$ を考える． $f(x, y)$ の等高線は，原点を中心とし，方向 $(1, 0), (0, 1)$ を短軸と長軸とした同心の _____ になる．一方，ヘッセ行列は

$$\nabla^2 f(x, y) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$$

となり，2 つの固有値は 2, 4，固有ベクトルはそれぞれ $(1, 0)^T, (0, 1)^T$ であり，等高線を表す _____ の軸方向に一致している．

では，この f を原点を中心に 45 度回転させた関数ではどうなるか見てみよう．関数は

$$f'(x, y) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}x + \frac{1}{\sqrt{2}}y \right)^2 + 2 \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}x + \frac{1}{\sqrt{2}}y \right)^2 = \frac{3}{2}x^2 + \frac{3}{2}y^2 - xy$$

である． $f'(x, y)$ の等高線は，原点を中心とし，方向 _____ を短軸と長軸とした同心の楕円になる．ヘッセ行列は

$$\nabla^2 f'(x, y) = \begin{pmatrix} _ & _ \\ _ & _ \end{pmatrix}$$

となり，2 つの固有値は _____，固有ベクトルはそれぞれ _____ であり，これもまた等高線の軸方向に一致している．

一般に，関数 $f(\mathbf{x})$ のヘッセ行列が正定値であるとき， f の等高線（面）は同心の楕円となり，固有ベクトルはその楕円の軸方向を示している．