計算困難問題に対するアルゴリズム理論（J. ホロムコヴィッチ他, 2012）

理論輪読会 #2-4 2014/06/21

交通研究室　学部四年

日下部　達哉

Contents

1. 局所探索法
2. タブー探索法
3. 焼きなまし法
4. 遺伝アルゴリズム

1. 局所探索法

➢ 最急勾配法のアルゴリズム（最小値）

① 初期状態: $\boldsymbol{x}_0$

② 最も急な方向に動く … $\nabla_0 = min\, \nabla z(\boldsymbol{x}_0)$

③ ②の方向で、最小値まで動く … $\boldsymbol{x}_1 = \min_{\alpha}(\boldsymbol{x}_0 + \alpha_0\, \nabla_0)$

④ $\boldsymbol{x}_n$ が「収束」と判定されなければ ②～③ を繰り返す

「収束」と判定されれば $\boldsymbol{x}_n$ を出力する

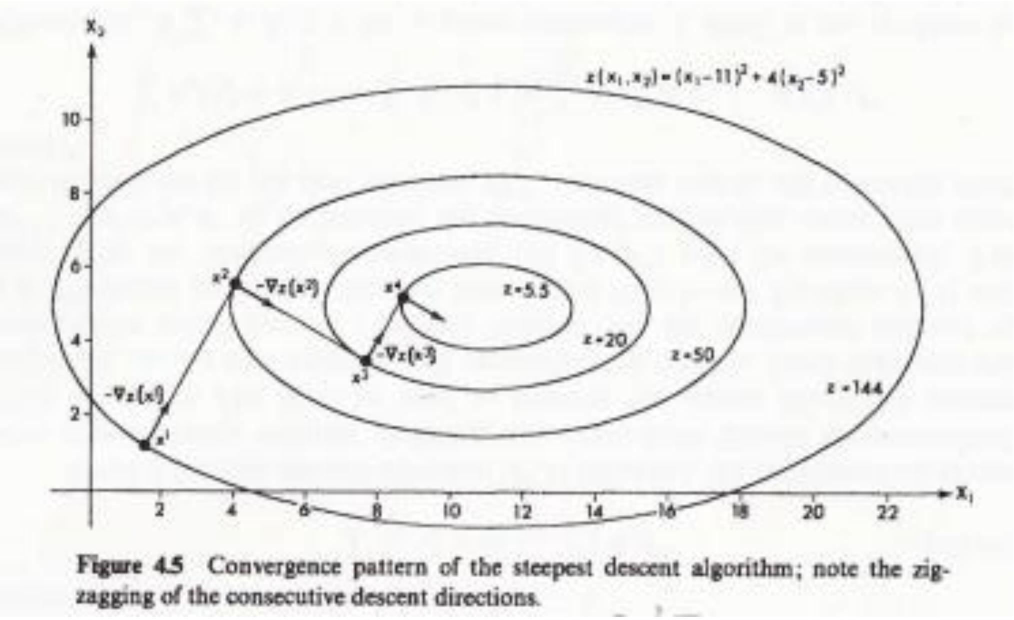
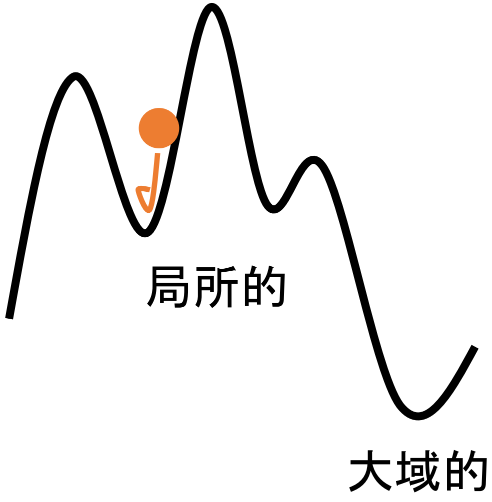


Figure 4.5 Convergence pattern of the steepest descent algorithm; note the zig-zagging of the consecutive descent directions.

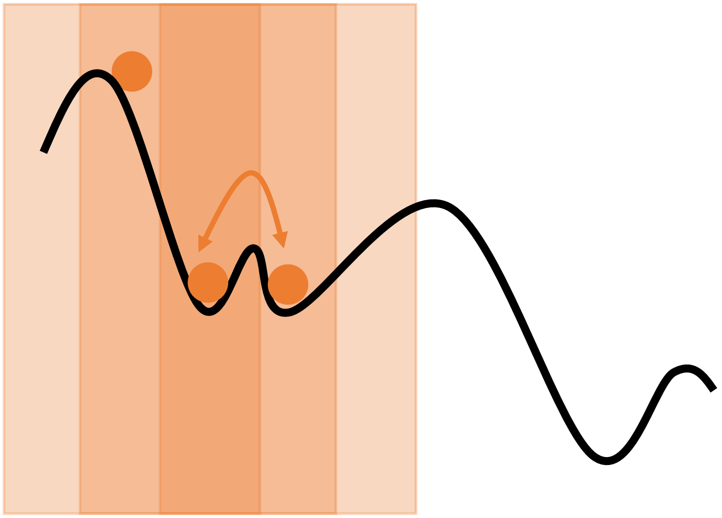
➢ 改悪解なら必ず移動しない

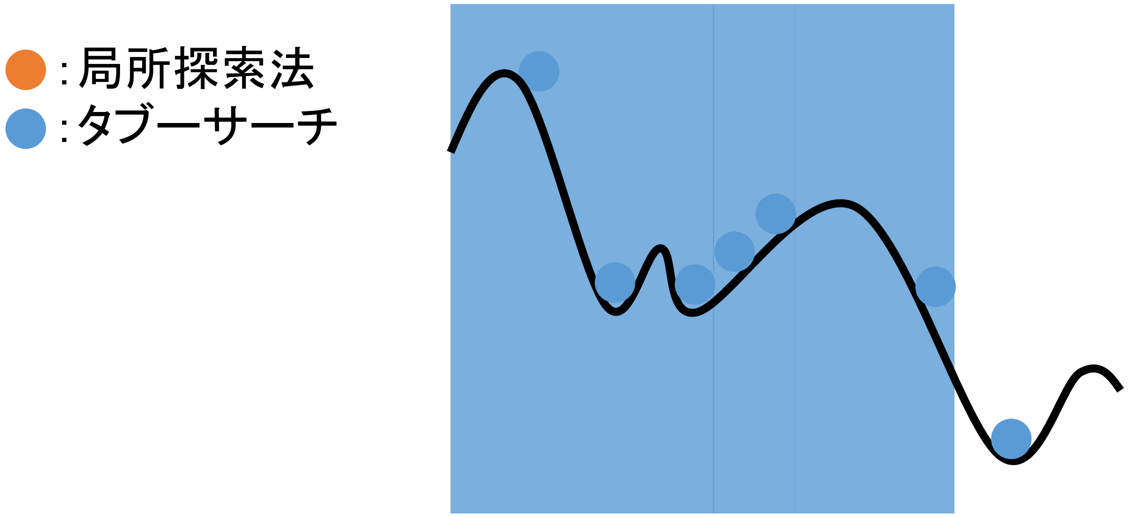
⇒ 局所最適解から抜け出せない可能性あり



2. タブー探索法

- 過去に行った選択を「タブー」とする
  ⇒ 状態がループすることを防ぐ
  ⇒ 「タブー」以外で最適解を探索することで、大域的な最適解を実現

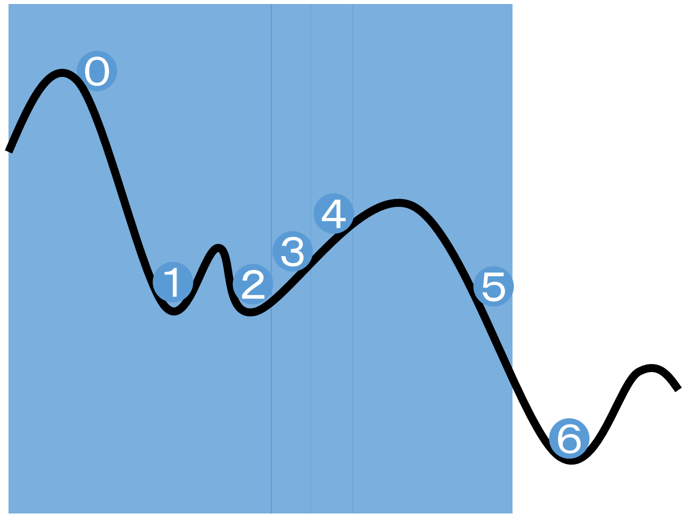




2. タブー探索法

- アルゴリズム（最小値）

TABU		BEST
x_0	x_5	x_6



① 初期状態：$\boldsymbol{x}_0$

$TABU \coloneqq \{\boldsymbol{x}_0\}$, $STOP \coloneqq FALSE$, $BEST \coloneqq \boldsymbol{x}_0$

② 最良の近傍解 $\boldsymbol{x}_1 = Neigh(\boldsymbol{x}_0) - TABU$ を見つける

$\boldsymbol{if}\ cost(\boldsymbol{x}_1) < cost(BEST)\ \ \boldsymbol{then}\ BEST \coloneqq \boldsymbol{x}_1$

$\boldsymbol{x}_0 \coloneqq \boldsymbol{x}_1$, $TABU \coloneqq \{\boldsymbol{x}_0 \leq \boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{x}_1\}$, $STOP$ を更新

③ $\boldsymbol{if}\ STOP = TRUE\ \ \boldsymbol{then}\ output(BEST)\ \ \boldsymbol{else}\ \boldsymbol{goto}$ ②

- 改悪解を許さない「確率」を導入する … 乱択タブー探索法

3. 焼きなまし法

➢ 基本概念（物性物理学）

① 結晶構造に欠陥の多い固体物質がある

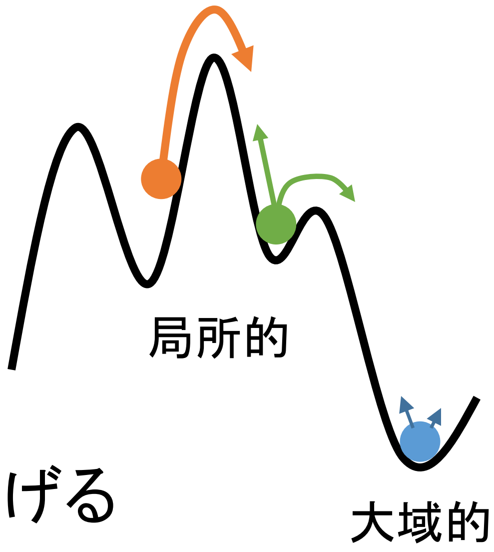
② 温度を最大まで上げて、物質を溶解させる

（全ての粒子がランダムに並ぶ）

③ 決められた冷却スケジュールに従って、温度を徐々に下げる

④ 結晶構造に欠陥のない固体物質（低エネルギー状態）になる

⇒ 温度の上昇をあえて許すことで、最低エネルギー状態を実現



➢ 基本概念（最適化）

⇒ 改悪解を許す「確率」を導入することで、大域的な最適解を実現

（初めに山の上に登ることで、最も深そうな谷を見つけられる）

3. 焼きなまし法

➢ アルゴリズム（最小値）

① 初期状態: $\boldsymbol{x}_0$　初期エネルギー: $E(\boldsymbol{x}_0)$

初期温度: T　温度減少関数: $f(T,t)$

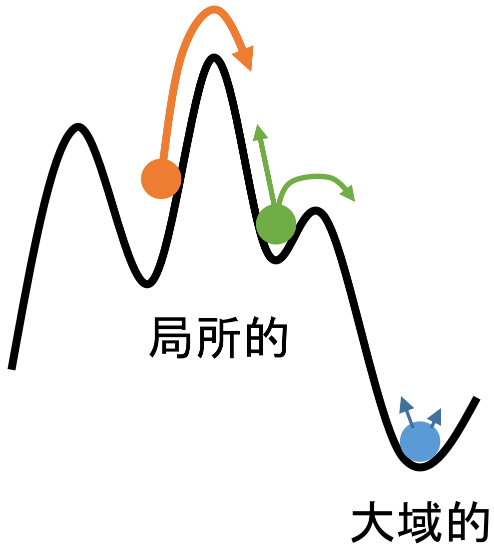
② ランダムな近傍解 $\boldsymbol{x}_1 \in Neigh(\boldsymbol{x}_0)$ を見つける

$\boldsymbol{if}\ E(\boldsymbol{x}_1) < E(\boldsymbol{x}_0)\ \ \boldsymbol{then}\ \boldsymbol{x}_0 \coloneqq \boldsymbol{x}_1$

$\boldsymbol{else}$ 確率 $exp(-\frac{E(q)-E(s)}{k_B T})$ で $\boldsymbol{x}_0 \coloneqq \boldsymbol{x}_1$

$T \coloneqq f(T,t)$（t を経過時間とする）

③ $\boldsymbol{if}\ T \coloneqq 0\ \ \boldsymbol{then}\ output(\boldsymbol{x}_n)\ \ \boldsymbol{else\ goto}$ ②



3. 焼きなまし法

- 状態を更新する確率 … $exp\left(-\frac{E(q)-E(s)}{k_B T}\right)$

  ① $E(q)-E(s)$ が大きいほど、状態を更新する確率は小さい

  ⇒ 大きな悪化ほど起こりにくい

  ② T が大きいほど、状態を更新する確率は大きい

  ⇒ 大きな悪化は、最初ほど（温度がまだ高いので）起こりやすく、

  後になるほど（温度が低くなるので）起こりにくくなる

〇 出力の精度が初期状態に依存しない

〇 小さな近傍を定義し、出力の精度を高められる

× 多項式時間で、精度の高い実行可能解を導く保証はない

4. 遺伝アルゴリズム

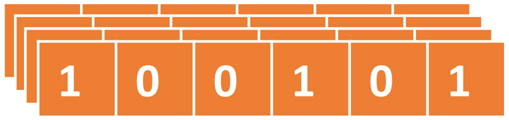
- 基本概念(生物学)

  ① 二進列(DNA)を持つN個の個体を準備する

  ② 交叉(現世代から二個体を選び、DNAの一部を交換する)や、
  突然変異(現世代から一個体を選び、DNAの一部を変化させる)により、
  次世代の個体を生み出す

  ③ 適応度の低い個体が淘汰されていく

- アルゴリズム(最小値)



  ① 初期実行可能解: $P_1 = \{\alpha_{11}, \alpha_{12}, \ldots, \alpha_{1N}\}$ を定義

  ② 初期実行可能解の適応度: $fitness(\alpha_{1n})$ を算出

4. 遺伝アルゴリズム

➢ アルゴリズム（最小値）

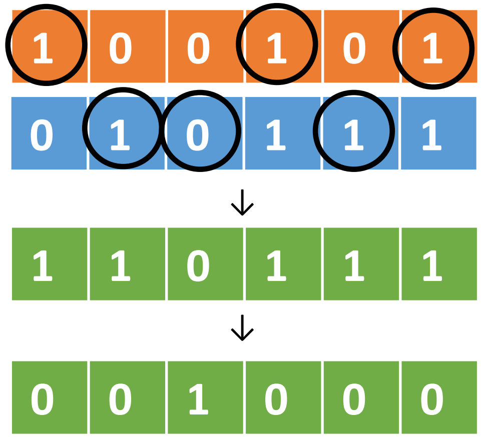
③ 親になる確率分布：$Prob_P(fitness(\alpha_{1n}))$ を算出
（適応度が高いほど親になる確率は高い）

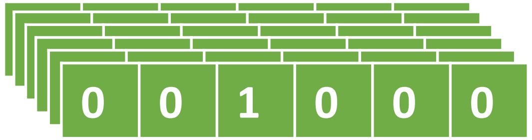
④ $Prob_P$ を用いて $N/2$ 対の両親をランダムに選択し、
交叉によって新たな実行可能解を生み出し、それを P に追加

⑤ 突然変異を起こし、適応度：$fitness(\alpha_{2n})$ を算出

⑥ 次期実行可能解：$P_2 = \{\alpha_{21}, \alpha_{22}, \ldots, \alpha_{2N}\} \subseteq P_1$ を定義

⑦ P_G で停止条件が成立しないならば ③～⑥ を繰り返す
成立するならば最良の実行可能解 α_{Gn} を出力する





4. 遺伝アルゴリズム

➢ 大域的な最適解を実現するために

① 実行可能解のサイズを大きくする
② 実行可能解をランダムに選定する
（①② は「計算時間の増大」とのトレードオフ関係に）
③ 突然変異の確率を適度に変える
④ モデルの構造自体を変える（例：島モデル）

〇 出力が実行可能解の「集合」になっている
⇒ 全ての制約や最適化条件を明示できない場合でも対応可能
× 多項式時間で、精度の高い実行可能解を導く保証はない