

概説メタ戦略

今堀 慎治, 柳浦 陸憲

メタ戦略（メタヒューリスティクス）とは何か？という問いに端的に答えることは難しい。本稿では、メタ戦略の一般的な枠組の説明と、メタ戦略に含まれる代表的なアルゴリズムの紹介を通して、メタ戦略とは何かという問いに対する回答を試みる。また、メタ戦略が有効に機能する状況とその理由、数多くあるメタ戦略アルゴリズムの中でどの手法が効果的か、という点についても考察する。

キーワード：メタ戦略, GRASP 法, 反復局所探索法, 可変近傍探索法, アニーリング法, タブー探索法, 誘導局所探索法, 遺伝アルゴリズム

1. はじめに

メタ戦略とは何か？と聞かれることがある。この問いに対して、すべての人を納得させる端的な答えを提示することは難しい。その理由の1つは、メタ戦略という言葉が、具体的なアルゴリズムを指すものではなく、多くのアルゴリズムの総称であり、さまざまなアイデアの集合体を指すものだからであろう。本稿では、メタ戦略の考え方を説明し、具体的なメタ戦略アルゴリズムを紹介することで、メタ戦略とは何かという問いに対する回答を試みる。

また、数多くあるメタ戦略アルゴリズムの中で、どの手法を選択すべきかは、メタ戦略を利用したい多くの人にとって悩ましい問題であろう。この点についても、本稿が悩みの解消に少しでも役立てばと思う。

2. メタ戦略の基礎

本節では、メタ戦略の基本的な考え方を、局所探索法を一般化した枠組として紹介する。なお、ここではメタ戦略の概要と枠組の紹介にとどめ、その実現法（具体的なアルゴリズム）は3節で説明する。また、よいメタ戦略アルゴリズムを設計するには、その基礎としてよい局所探索法を設計することが多くの場合に重要となるが、局所探索法の詳細な説明と効率的なアルゴリズムを実現するためのアイデアについては、本特集「メタヒューリスティクス事始め—まずは局所探索法から—」などを参照いただきたい。

いまほり しんじ
名古屋大学大学院工学研究科
〒464-8603 名古屋市千種区不老町
やぎうら むつり
名古屋大学大学院情報科学研究科
〒464-8601 名古屋市千種区不老町

2.1 メタ戦略の概要

メタ戦略という言葉は特定のアルゴリズムを指すのではなく、さまざまなアルゴリズムを含めた総称である。メタ戦略に含まれるアルゴリズムは、(1) 過去の探索履歴を利用して新たな解を生成する、(2) 生成した解を評価し次の解の探索に必要な情報を取り出す、という操作の反復より成る。すなわち、生成された解のどのような情報を探索履歴として記憶するか、探索履歴をどのように利用して新たな解を生成するか、に対するアイデアの集合がメタ戦略であるといえる。

メタ戦略アルゴリズムの大半は、局所探索法を一般化したものとして理解することができるが、メタ戦略が広く認知されるようになったのは、計算機の急速な進歩によるところが大きい。すなわち、現在のコンピュータでは、単純な局所探索法は高速に実現できるようになったため、多少の時間はかかっても、より精度の高い解を求める解法に対する要求が高まった。そのような要求に対する答えの1つとして、メタ戦略が広く使われるようになった。

ここで誤解の生じないように断っておくが、メタ戦略は万能というわけではなく、ふさわしい状況で適切に利用する必要がある。では、どのような状況でメタ戦略はその性能を発揮することができるだろうか。本稿では、主に最適化問題に対してメタ戦略を適用することを想定するが、以下の3つの条件が満たされるときに、メタ戦略がその真価を発揮すると考える。第一に、厳密な最適解を求めるのが困難であること。効率的な解法が知られている問題を解く場合や、そうでなくとも扱う問題例の規模が小さい場合には、実用上十分に速い時間で厳密な最適解を求めることができる。この状況においては、得られる解の性能保証が難しいメタ戦略は分が悪い。第二に、1つの解を評価する（実行

可能性を判定し目的関数値を計算する) こと自体は容易であること。例えば、クラス NP に含まれる問題では解の評価が高速にできるので相性がよい。上で述べたとおり、メタ戦略は局所探索法の一般化であり、解の評価を頻繁に行うため、解を評価すること自体が困難な問題にはメタ戦略は適さない。第三に、近接最適性 (proximate optimality principle, POP) が成り立つこと。POP が成立していれば、よい解に似通った解の中によりよい解が見つかる可能性が高いと考えられ、過去の探索履歴を用いた探索の効果が期待できる。なお、解の表現方法や近傍の定義により、同一の問題であっても POP の成立、不成立が変わることがある。効率的なメタ戦略アルゴリズムを設計するためには、解表現や近傍に工夫が必要である。

ここで、POP に基づいてよい解の近くを集中的に探索しようとする考え方は、探索の集中化と呼ばれ、メタ戦略の基本原則の 1 つである。一方、似通った構造の解を探索することに力を入れすぎると、現在の解とは構造の異なるよい解を発見することが難しい。ときどきは構造の異なる解を生成しようとする考え方は、探索の多様化と呼ばれ、メタ戦略のもう 1 つの基本原則である。

2.2 メタ戦略の一般的枠組

本稿では、メタ戦略を局所探索法の一般化ととらえ、メタ戦略の枠組として、次のものを考える。

メタ戦略の枠組

- I (初期解生成): 初期解 x を生成する。
- II (局所探索): x を (一般化された) 局所探索法により改善する。
- III (反復): メタ戦略の終了条件が満たされれば暫定解を出力して探索を終了する。そうでない場合は I に戻る。

ここで、暫定解は、探索中に得られた最良の実行可能解のことをいう。また、ステップ II の (一般化された) 局所探索法を、探索空間を F 、解 x の近傍を $N(x)$ とし、以下のように定義する。

局所探索法: 与えられた初期解 $x \in F$ から始め、近傍 $N(x) \subset F$ 内の解に一定のルールで移動する操作を、局所探索の終了条件が満たされるまで反復する。

なお標準的な局所探索法 (近傍内の改善解への移動を繰り返し、局所最適解に到達したらアルゴリズムを終了する) を、本稿では単純局所探索法と呼ぶ。局所探

索法の動作を定めるには、枠組の II において、

- A. 近傍 $N(x)$ の定義,
- B. 解の評価関数 f ,
- C. 移動戦略,
- D. 終了条件,

を決める必要がある。A は、現在の解 x から新たな解をどのように生成するかを定める。B は、生成した解 x' のよさを判定する基準を定める。C は、近傍 $N(x)$ 内の解をどのような順序で調べ、どの解に移動するかを定める。D は、探索をいつ終了するかを定める。

このように考えると、メタ戦略とは、上述の I, II-A, II-B, II-C, II-D および III のいずれかに対する工夫であるととらえることが可能である。次節では、I から III にさまざまな工夫を加えた、具体的なメタ戦略アルゴリズムを紹介する。

3. メタ戦略の実現

本節では、メタ戦略に含まれる代表的なアルゴリズムを紹介する。紙数の都合上、ここでは紹介することのできないアルゴリズムが多数あり、その中には興味深いアイデアに基づくものもある。また、本節で扱うアルゴリズムについても、簡単な紹介にとどめざるをえないものも多い (原著論文の情報も省略している)。より多くのメタ戦略アルゴリズムの詳細については、文献 [1, 2, 3, 4] およびそれらに引用されている文献などを参照いただきたい。

なお、以下ではいくつかのアイデアについて巡回セールスマン問題に対する具体的な実現例を与える。巡回セールスマン問題は、 n 個の都市とそれらの間の距離が与えられたとき、すべての都市をちょうど 1 度ずつ訪れて出発地に戻る巡回路のうち、総移動距離最小のものを求める問題である。都市を点で表し、2 都市間の移動を距離を重みとした辺で表すとき、全体で 1 つの閉路となる n 本の辺集合で、総重み最小のものを見つける問題ということもできる。

3.1 反復による実現

2.2 項で、メタ戦略の枠組を提示した。ここでは、II の局所探索に標準的な (単純) 局所探索法を用い、I の初期解生成と III の反復に対する工夫によって解精度の向上を図るアルゴリズムを紹介する。

多スタート局所探索法 (multi-start local search)

局所探索法の限界として、質の悪い局所最適解に陥る可能性を排除できないことが挙げられる。つまり、ある (運の悪い) 初期解から局所探索を開始すると、質の悪い局所最適解に到達し、そこで探索が終了することがある。この可能性を減らすため、複数の初期解か

ら局所探索法を実行し、その結果として得られた局所最適解の中で、最良のものを出力するアルゴリズムが多スタート局所探索法である。

初期解をランダムに生成する場合をとくにランダム多スタート局所探索法と呼ぶ。一方、ランダムに生成した解は質が悪いので、欲張り法などの手法を用いることで、質のよい初期解を生成するアルゴリズムもある。ここで、(標準的な)欲張り法は多数の解を生成するのに適さないため、ランダム性を加えた欲張り法を用いることで多様な初期解を生成する。このような手法をGRASP法 (greedy randomized adaptive search procedure) と呼ぶ。例えば、巡回セールスマン問題に対する欲張り法として、出発地を適当に定め、現在の都市から最も近い未訪問の都市へ移動する、という操作を繰り返し、すべての都市を訪問したとき出発地へ戻るというアルゴリズムがある。このアルゴリズムの「最も近い」という規則を緩和し、距離に応じた(近い都市ほど選ばれやすい)確率で移動する都市を決定することで、質の良い多様な初期解を生成することができる。

反復局所探索法 (iterated local search)

ここまで紹介した2つの方法は、局所探索法の初期解を生成する際に、過去の探索履歴を利用しなかった。これから紹介する2つのアルゴリズムは、過去の探索で得られたよい解にランダムな変形を加えたものを初期解とする。すなわち、メタ戦略のステップIの初期解生成に工夫を加えた多スタート局所探索法といえる。

反復局所探索法は、そのような手法の代表的なものであり、実現の容易さと性能の高さのバランスがよいなどの理由から、さまざまな問題に対して広く用いられている。この方法では、局所探索に用いる近傍 $N(x)$ とは別に、初期解生成のための近傍 $N'(x)$ を定義し、局所探索を終了した際に、これまでの探索中に得られたある解 x_{seed} に対し、その近傍 $N'(x_{\text{seed}})$ 内の1つの解 x' をランダムに生成し、次の局所探索の初期解とする。

初期解生成に利用する解 x_{seed} として、常に暫定解を利用する方法が最も単純であり、広く用いられている。しかし、よいメタ戦略の特徴の1つである「計算時間に応じて相応の精度の解を発見する」という性質を実現するためには、この方法では不十分なことも多い。そこで、後述するアニーリング法に類似のアイデアを用いてランダム性を導入した方法や、次項で紹介する可変近傍探索法なども提案されている。以下では、

初期解生成に利用する解 x_{seed} の決定にランダム性を導入した方法について述べる。便宜上、以下では l 回目の局所探索の初期解生成に用いる解 x_{seed} を $x_{\text{seed}}^{(l)}$ と記す。ただし、 $x_{\text{seed}}^{(1)}$ は (例えばランダムに生成した) 最初の初期解を表すものとし、以下では $l \geq 2$ の場合を考える。

初期解生成に利用する解の決め方を、直前の局所探索によって得られた局所最適解 x の評価に応じて場合分けをして考える。まず、解 x が前回の初期解生成に利用した解 $x_{\text{seed}}^{(l-1)}$ より高い評価の場合、新たに発見した局所最適解 x の付近を集中的に探索することで、さらにより解を発見できる可能性が(相対的に)高い。この状況では、次の局所探索のための初期解生成に利用する解として、今回発見した局所最適解 x を用いる。つまり、 $x_{\text{seed}}^{(l)} := x$ と更新する。また、新たに発見した局所最適解 x の評価値が解 $x_{\text{seed}}^{(l-1)}$ の評価値と等しい場合も、多様化の観点から新たに得られた解 x を $x_{\text{seed}}^{(l)}$ とする。

一方、局所最適解 x が解 $x_{\text{seed}}^{(l-1)}$ より悪い評価の場合(計算が進むにつれ、この可能性が高くなる)、集中化の観点からは新たに得られた局所最適解 x よりも $x_{\text{seed}}^{(l-1)}$ のほうが魅力的である。しかし、探索の多様化を実現するため、この場合でも解 x を確率的に採用する。具体的には、改悪量を $\Delta = f(x) - f(x_{\text{seed}}^{(l-1)})$ として、確率 $e^{-\Delta/t}$ で $x_{\text{seed}}^{(l)} := x$ とし、残りの確率で $x_{\text{seed}}^{(l)} := x_{\text{seed}}^{(l-1)}$ とする。ここで f は解の評価関数であり、関数値が小さいほど評価が高いものとする。パラメータ t は、アニーリング法のように、探索の過程で動的に制御する方法も考えられるが、通常は定数として扱う。 t を大きくすると多様化の効果は高まるが、集中化の効果が低下して、かえって性能が悪くなってしまうことがある。 t の適正值は問題や(同一の問題であっても)問題例ごとに大きく変わりうる。このため、パラメータ t に関する検討を十分に行えない場合は、 t を小さい定数や $t = 0$ (常に最新の暫定解を用いて初期解を生成する)としておくのが安全である。また、ある程度の期間同一の解 x_{seed} を用いて初期解生成を行った場合に限って、一時的に t を大きくする方法もある。

初期解生成に利用する近傍 $N'(x_{\text{seed}})$ については、近傍内の解 x' が x_{seed} のもつよい構造を多く保存し、しかも x' から局所探索を実行した際に x_{seed} へは到達しづらいという性質をもつことが望ましい。問題の性質や近傍 $N(x)$ に応じた適切な近傍 $N'(x_{\text{seed}})$ を設定することにより、アルゴリズムの性能向上が期待できる。例えば、巡回セールスマン問題で、局所探索法の近傍

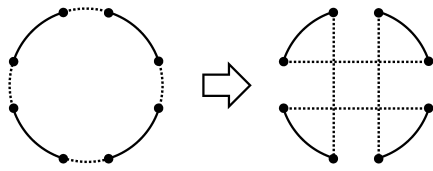


図1 double bridge 近傍の近傍操作の例 (点が都市, 実線がパス (複数の辺), 破線が辺をそれぞれ表す)

$N(x)$ に 2-opt 近傍 (現在の解から辺を 2 本取り除き, 新たに 2 本の辺を追加する操作により得られる巡回路の集合) を用いたときには, $N'(x_{\text{seed}})$ として図 1 に示すような double bridge 近傍を利用するのが効果的であるといわれている. この近傍は, 現在の解から辺を 4 本入れ替える操作で定まるが, 2-opt 近傍の近傍操作 (近傍 $N(x)$ 内の解を 1 つ生成するために解 x に加える変形操作) を 2 回繰り返しても到達できないような解の集合になっており, x_{seed} にすぐに逆戻りする現象を防ぐ効果がある. なお, $N(x)$ と異なるタイプの近傍を設計することが容易でない場合には, 近傍 $N(x)$ を定める近傍操作を解 x_{seed} に対してランダムに k 回適用することで次の局所探索の初期解 x' を生成することもある. この場合, k を 1 つの値に固定するよりも, 適当な範囲から毎回ランダムに選ぶことで性能が安定する傾向にある.

可変近傍探索法 (variable neighborhood search)

前項で述べたとおり, 反復局所探索法では, 過去の探索で得られたよい解 x_{seed} に対して, 初期解生成のための近傍 $N'(x_{\text{seed}})$ から選択した 1 つの解を新たな局所探索の初期解とする. これは一定のルールで定まるランダムな変形を x_{seed} に加えると理解することもできるが, 探索の集中化を実現したいという観点からは, 変形は小さいほうが (よい解の性質をより多く引き継ぐことができるので) 望ましい. しかし, 通常, よい解は 1 カ所に集中しているのではなく, 探索空間に複数のかたまりとして局在していると考えられるので, それらを効率的に発見することができる広い範囲の探索能力も必要である.

同じアルゴリズムを, 規模の大きく異なる問題例に適用する場合や, さまざまな終了条件 (例えば制限時間を 1 分とする場合と 1 時間とする場合) で実行する際には, 初期解生成のための近傍 $N'(x_{\text{seed}})$ のサイズとして適切なものを 1 つに定めることは難しい. そこで, $N'(x_{\text{seed}})$ のサイズを適応的に変化させる方法が提案されている. 初期解生成に用いる近傍のサイズ

を, 初めは小さく設定するが, 初期解生成に用いる解 x_{seed} を更新せず, 前回と同じものを用いる場合 (つまり $x_{\text{seed}}^{(l)} = x_{\text{seed}}^{(l-1)}$ である場合) には近傍 $N'(x_{\text{seed}})$ を徐々に大きくしていき, x_{seed} を局所探索によって新たに得られた解 x に更新した場合 (つまり $x_{\text{seed}}^{(l)} := x$ とした場合) にははじめの近傍に戻す. このような方法を可変近傍探索法と呼ぶ. 近傍のサイズを変化させる 1 つの方法として, 解 x に対してある微小な変形を k 回適用して得られる解の集合を $N'(x)$ と定め, k によって近傍サイズを制御する方法が挙げられる. 例えば巡回セールスマン問題の場合, 解 x_{seed} に対して 2-opt 近傍の近傍操作をランダムに k 回適用することで新たな初期解を生成する方法がその一例である. また, 高々 $k (\geq 2)$ 本の辺を入れ換えることで得られる巡回路の集合を k -opt 近傍と呼ぶが, このようにパラメータを含む近傍を自然に定義できる場合には, そのような近傍を N' として利用することもできる.

3.2 局所探索の一般化による実現

前項では, ステップ II には単純な局所探索法を利用するメタ戦略アルゴリズムを紹介した. 単純局所探索法では, 局所最適解に到達すると探索を終了するが, 局所最適解はよい解であることが多く, この解のまわりを集中的に探索することで, よりよい解を発見できる可能性が高い. 本項では, 局所最適解からさらに探索を継続するなど, 単純な局所探索法を一般化する (ステップ II において工夫を行う) アルゴリズムの中から, アイデアの大きく異なる 3 つの手法を紹介する.

アニーリング法 (simulated annealing)

単純な局所探索法は, 改善解にのみ移動することが許されるため, 局所最適解に到達すると探索を継続することができない. 一方, アニーリング法では, 解のよさに応じた遷移確率を設定し, それに従って次の解を選ぶ. すなわち, 改悪解にも正の遷移確率を与えることにより, 局所最適解であっても探索を停止することなく, さらによい解の発見を狙う. 遷移確率はよい解ほど移行しやすいように設定され, さらに物理現象の焼きなましにアイデアを借りて, 温度と呼ばれるパラメータ t により調整される. 具体的には, 評価値が悪くならない解への遷移確率を 1 とし, 改悪解への遷移確率を改悪量を Δ として $e^{-\Delta/t}$ とする. 温度 t については, 探索の初期の段階では高めに設定しておく (すなわち, ランダムな移動が生じやすい), 探索が進むにつれて徐々に小さくしていく. 以下に, アルゴリズムの概要をまとめる.

アニーリング法

- I. 初期解 x を生成する. 初期温度 t を定める.
- II. 以下の操作をループの終了条件まで繰り返す.
 - a) $N(x)$ 内の解をランダムに1つ選び x' とする.
 - b) $\Delta := f(x') - f(x)$ とする (改悪なら $\Delta > 0$).
 - c) $\Delta \leq 0$ なら確率 1, $\Delta > 0$ なら確率 $e^{-\Delta/t}$ で解 x から x' に移動する.
- III. アルゴリズムの終了条件が満たされれば暫定解を出力して終了する. そうでなければ, 温度 t を更新して II に戻る.

アニーリング法を実現するためには, 初期温度, 温度の調整方法, ループ (一定温度での反復) およびアルゴリズムの終了条件を決定する必要がある.

初期温度の適切な値は問題例ごとに大きく異なるため, 初期温度を定数に固定するのは望ましい方法とはいえない. 通常は, 理想とする受理確率をあらかじめ定めておき, 探索の初期の段階において, 生成した解の中で受理されるものの割合がこの値程度となるように初期温度 t を調整する.

温度の調整方法は冷却スケジュールとも呼ばれる. 最も簡単で実用的とされているのは, パラメータ p ($0 < p < 1$, 例えば $p = 0.95$) を用意し, $t := pt$ と更新する方法で, 幾何冷却法と呼ばれる.

ループの終了条件を反復回数で定め, 1 回もしくは定数回とすることもあるが, 近傍サイズの定数倍程度とするのが有効な場合が多い. また, 温度が十分に低くなったときにアルゴリズムを終了するというルールが一般的であるが, そのような温度は問題例によって異なり, やはり定数として設定するのは難しい. そこで, 解の受理確率や暫定解の更新頻度が, あらかじめ定めた閾値を下回ったとき (すなわちそのような温度になったとき) にアルゴリズムを終了するという規則などがよく用いられる.

アニーリング法は, 温度が高いときはランダムウォークに近い振舞いをし, 温度が低いときには単純局所探索法と同様の動作となるので, これらの中間的な動作を長期間持続できるとよい. そこで, 暫定解が見つかったときの温度 t_{found} を記憶しておき, 暫定解がしばらく更新されないときには温度を $t := t_{\text{found}}$ といったん高くするなどの方法が考えられている.

アニーリング法に類似のメタ戦略アルゴリズムとして, 閾値受理法や大洪水法なども知られている.

タブー探索法 (tabu search)

タブー探索法では, 近傍に含まれる解をすべて評価し, 自分自身を除く最良の解を (たとえ改善解でない場合でも) 次の解として選ぶ. この規則により, 局所最適解からの移動が可能となる. しかし, 対称な近傍 ($x' \in N(x) \iff x \in N(x')$) が成り立つ近傍を用いる場合, 局所最適解から脱出した直後に元の解に戻ることが多い. 一般に, 探索がいくつかの解を経由して元に戻ることをサイクリングと呼ぶ. このようなサイクリングの挙動を防ぐため, タブーリストと呼ばれる解集合を保持し, この集合に含まれる解への移動を禁止する. ここで, タブーリストの実現方法には, 最近探索した解を直接記憶する方法もあるが, ほかの方法が使われることのほうが多い. 解の移動の際に変更した変数の値を元に戻すことを一定期間禁止する, などがタブーリストの構成法の典型例である. 例えば巡回セールスマン問題の場合, 近傍操作によって巡回路から削除された辺を再び巡回路に加えることや, 巡回路に加えられた辺を再び削除することを一定期間禁止するなどのルールが考えられる.

誘導局所探索法 (guided local search)

局所探索法やメタ戦略では多くの解を評価するが, このための評価関数にも設計の自由度がある. 例えば実行可能解のみを探索の対象とする場合, 基本となるのは目的関数をそのまま評価関数とする方法であるが, これ以外にも, 評価関数を探索の状況に応じて変化させるなどの工夫を加えることが可能である. 誘導局所探索法は, ステップ II-B の評価関数 f の構成にこのような工夫を加えた方法で, 評価関数をアルゴリズムの途中で適応的に変形することによって局所最適解からの脱出を実現する. 具体的には, 前回の探索で得られた局所最適解 x の構成要素の中でコストの大きいものにペナルティを付加する. 次の探索では, この x を初期解とし, 新しい評価関数を用いて局所探索を行う. このとき x の構成要素 (の一部) に十分なペナルティを与えると, 新しい評価の下では x は局所最適でなくなり, x からの探索を続けることができる.

巡回セールスマン問題に対する例を紹介しておこう. 辺 e の距離を d_e , ペナルティを p_e , 解 (巡回路) x に含まれる辺集合を E_x とし, パラメータ $\alpha > 0$ を用いて各解 x を $f(x) = \sum_{e \in E_x} (d_e + \alpha p_e)$ で評価する. 探索の開始時にすべての辺 e に対して $p_e := 0$ と初期化しておき, 評価関数 f の下での局所最適解 x が得られるたびに E_x の中で $d_e/(1 + p_e)$ が最大の辺 e に対し

てペナルティを $p_e := p_e + 1$ と更新したのち、同じ x から再び局所探索を行う操作を繰り返す。このように解 x を構成する n 本の辺 E_x の中で距離が大きくペナルティの小さいもののペナルティを増やすことで局所最適解からの脱出を図るのである。

評価関数に工夫を加えたメタ戦略アルゴリズムとしては、これ以外にも評価関数摂動法、探索空間平滑化法などがある。

3.3 その他のメタ戦略アルゴリズム

本稿では、局所探索を一般化した枠組としてメタ戦略を紹介し、3.1 項と 3.2 項ではこの枠組に含まれる代表的なメタ戦略アルゴリズムを紹介した。単一の目的関数をもつ最適化問題で、評価値のよい解を 1 つ見いだすことが目的である場合には、これまでに述べたような局所探索を中心とした手法が多くの場合に有力である。しかし、そのような手法とは異なるアイデアに基づくアルゴリズムの中にも、広く用いられているメタ戦略アルゴリズムが存在する。本項では、その中から遺伝アルゴリズムについて簡単な紹介をする。なお、本特集「多点探索型アルゴリズムの基礎と最前線」に、遺伝アルゴリズムに代表される多点探索型のメタ戦略アルゴリズムについての解説があるので、興味のある読者はそちらも参照していただきたい。

遺伝アルゴリズム (genetic algorithm)

遺伝アルゴリズムは、生物の染色体の交叉や突然変異によって新しい世代が形成され、弱いものが淘汰されて強いものが生き残っていくという、生物の進化のメカニズムを最適化に応用した手法である。複数の解を同時に保持し、それらを集団として改善していくところに特徴をもつ。

アルゴリズムが保持している解集合を集団と呼ぶ。集団の中の 2 つまたはそれ以上の解を組み合わせることで新たな解を生成する操作を交叉、1 つの解に少しの変形を加えることで新たな解を生成する操作を突然変異という。現在の集団に対し、交叉および突然変異の操作によって新たな解を複数生成し、現在の集団を構成する解と生成した新しい解の中から、淘汰と呼ばれる規則に従って一定数の解を次の集団として保持する。淘汰の規則を適切に設定することによって、多様性のあるよい解を集団として保持することができる。

なお、単純な遺伝アルゴリズムは、これまでに紹介したメタ戦略アルゴリズムと比較して集中化の能力に劣ることが多く、これを補うために局所探索法を内部に組み合わせる(交叉や突然変異によって生成した解を

初期解として局所探索法を適用する)方法がしばしば用いられる。このアルゴリズムは、遺伝的局所探索法などと呼ばれ、遺伝アルゴリズムを改良したものとして理解することができるが、メタ戦略の枠組のステップ I に工夫をこらした手法として理解することもできる。このように、メタ戦略のとらえ方には柔軟性がある。

4. メタ戦略の活用

前節で代表的なメタ戦略アルゴリズムをいくつか紹介した。メタ戦略を使いたいという状況において、(紹介できなかったものも含め)膨大な数のメタ戦略アルゴリズムから、どれを選択すればよいだろうか。

メタ戦略アルゴリズムが、よい解を効率的に発見できるのは、集中化と多様化をバランスよく実現しながら解の探索を行うからである。個々のメタ戦略アルゴリズムによって集中化と多様化を実現する具体的な方法は異なるが、その設計には自由度が多く残されており、アルゴリズムの性能は、具体的にどのような設計をしたかやパラメータの値などのさまざまな要因に大きく左右される。このため、ある特定のメタ戦略アルゴリズムがほかの手法と比べて優れている、という結論を出すことは難しい。よい性能を得るためには、1 つのメタ戦略アルゴリズムにこだわらず、定評のある枠組の中からいくつかを実際の実装して比較してみるほうがよい。その際、どの枠組においても、そのアルゴリズムの特徴を活かして、集中化と多様化をバランスよく実現することが重要であるといえる。以下では、繰り返しとなる部分もあるが、メタ戦略全般の特徴をまとめる。

多くの問題に対して容易に適用可能

メタ戦略アルゴリズムは、多くの問題に対して容易に適用可能であり、さらにロバスト性を有する。つまり、個々の問題の数学的構造などに対する深い洞察がない場合でも、アルゴリズムを簡単に作ることができ、しかも、ある程度よい結果が期待できる。また、対象とする問題やアルゴリズム内部のパラメータが多少変化しても、性能が大幅に劣化しないことが多い。よって、メタ戦略を手軽なツールとして用いることが可能である。この目的には、構造が簡単で実装が容易な手法をまず試してみるのがよいと思われる。例えば、局所探索法が実装できていれば、反復局所探索法や可変近傍探索法を実現することは通常容易であり、これらの枠組を利用することでよりよい解を発見できる可能性が高い。

問題の構造に応じた工夫で性能向上

メタ戦略は、非常に柔軟性に富む枠組であるため、内部にさまざまな工夫を施すことが可能であり、そのような工夫により、アルゴリズムをより強力にできる可能性を秘めている。問題の数学的構造、扱う問題例のもつ性質、個々のメタ戦略アルゴリズムの特徴などを利用することで、アルゴリズムの高速化、高性能化に成功した事例が多数報告されている。このようにさまざまなアイデアを導入して高性能なアルゴリズムを開発することを目的とする場合には、タブー探索法や遺伝的局所探索法のように設計の自由度の高い手法ほど、さまざまな工夫を組み込みやすいといえる（メタ戦略の基礎となる局所探索法に工夫を施すことも多く、そのような工夫は大部分のメタ戦略アルゴリズムの性能向上に有効である）。

計算時間に応じた性能

メタ戦略の特徴の1つに、アルゴリズムの終了条件を容易に変更できることが挙げられる。したがって、例えばアルゴリズムが使用する計算時間を利用目的に応じてユーザがある程度自由に指定することができる。メタ戦略は、多数の解を生成、評価し、その中で最もよい解（暫定解）を出力するので、一般的に計算時間をかければかけるだけ、よい解を発見できる可能性は高くなる。ただし、限られた時間でより精度の高い解を得るためには、探索に許される時間に応じた工夫が必要である。著者の経験では、時間が比較的短い（例えば局所探索を数十回反復できる程度の）場合には、集中化に重点をおいて比較的単純なアルゴリズムを設計するだけでもかなりの効果が期待できる。一方、より長い時間が許されている場合には、探索の状況に応じて集中化と多様化のバランスを適応的に制御するようにより高度な手法を導入することで、さらなる性能向上が期待できる。

パラメータの設定

メタ戦略アルゴリズムには探索を制御するさまざまなパラメータが含まれており、高い性能を引き出すには、これらの値をうまく調整する必要がある。調整のためには、予備実験による適正値の検討が必要となるが、これは手間のかかる作業であり、極力避けたい。問題例ごとに調整が必要となるパラメータを導入することはできるだけ避け、幅広い問題タイプと問題規模に同じ値で対応できるようなパラメータを用いるのが理想

的である。例えば、アニーリング法において、初期温度の適正値は問題や問題例によって大きく異なる。実際、ある問題例の目的関数を10倍したものに変更すると、問題例の本質は変わらないにもかかわらず、アルゴリズムが同じ動作をするためには温度を1/10倍する必要がある。したがって、初期温度を直接パラメータとするのは避けるほうがよい。一方、受理確率をパラメータとして指定し、実際の受理確率が（だいたい）指定した値となるように初期温度をアルゴリズム内部で自動的に設定する方法を用いれば、一定のパラメータ値で多くの問題タイプと問題規模に対応できる。また、アルゴリズム内部で探索の状況に応じて適応的にパラメータを調整することで、実用性を高めるといふ試みもある。

探索履歴の活用

2.1項ですでに述べたが、探索履歴を活用するところにメタ戦略の特徴がある。個々のアルゴリズムによって探索履歴の利用法は異なり、それがアルゴリズムの特徴となる。アニーリング法では、探索履歴から現在の解 x と温度 t が決まる。タブー探索法ではタブーリスト、遺伝アルゴリズムでは集団という形で、探索履歴から得られる多くの情報を保持し、次の探索に活用する。一般に、探索中に得られた情報を適切に利用することで、アルゴリズムの性能が向上する。例えば、ランダム多スタート局所探索法と反復局所探索法は、類似したメタ戦略アルゴリズムであり、初期解生成の際に探索履歴を利用しない／する点が異なる以外はほぼ同様であるが、探索履歴を活用する反復局所探索法のほうが多くの場合より高性能である。なお、問題の数学的構造や問題例の性質が利用できる場合は、探索履歴を活用する際にそれらの構造や性質を利用することでアルゴリズムの高性能化が実現できる傾向にある。

確率的な挙動

多くのメタ戦略アルゴリズムには、確率的な挙動をする部分が含まれている。アニーリング法の遷移確率や、GRASP法の初期解生成などがわかりやすい例である。確率的な挙動をどの程度取り入れるかによって、探索の集中化と多様化のバランスを制御することが可能である。また、確率的な振舞いを用いることで、アルゴリズムのロバスト性を高めることもできる。例えば、メタ戦略アルゴリズムではパラメータ値をうまく調整する必要があることを述べたが、パラメータ値がある定数に決める代わりに、パラメータ値の取る範囲

を定めておき、そのパラメータに関わる動作を行うたびに指定した範囲から確率的に値を決定する方法がある(反復局所探索法の項でこのような手法を紹介した)。このようなアイデアを組み込むことで、さまざまな問題タイプと問題規模において、性能が安定する傾向にある。問題構造に対する深い洞察がなくとも確率的な挙動を組み込むことは可能であり、とくに、メタ戦略を手軽なツールとして利用する場合には重要な要素といえる。

5. おわりに

本稿では、メタ戦略の一般的枠組に関する説明といくつかの具体的なメタ戦略アルゴリズムの紹介を行った。本稿で取り上げたもの以外にも数多くのメタ戦略アルゴリズムが存在する。しかし、それらの中に絶対に優れた万能薬のような手法が存在するわけではない。開発に使える時間や実際に使うときに許される計算時間などによっても選ぶべき手法は変わってくる。また、よいアルゴリズムを開発するためには、特定のメタ戦略アルゴリズムにこだわることなく、さまざまな

枠組を試してみる必要がある。その際、個々のメタ戦略アルゴリズムがもつ自由度を利用して、問題の数学的構造や問題例のもつ性質を探索に役立てることが重要である。

メタ戦略は、実用的なツールであり、実際に使ってみて初めてわかることも多い。メタ戦略に興味があれば、ぜひメタ戦略アルゴリズムをプログラムして、実際に使ってみてほしい。メタ戦略とは何かという問いへの真の答えは、その実感を通して初めて見えてくるのではないかと思う。

参考文献

- [1] C. Blum and A. Roli, Metaheuristics in Combinatorial Optimization: Overview and Conceptual Comparison, *ACM Computing Surveys*, **35**, 268–308, 2003.
- [2] M. Gendreau and J.-Y. Potvin (eds.), *Handbook of Metaheuristics*, Second edition, Springer, 2010.
- [3] 久保幹雄, J. P. ペドロソ, 『メタヒューリスティクスの数理』, 共立出版, 2009.
- [4] 柳浦睦憲, 茨木俊秀, 『組合せ最適化—メタ戦略を中心として—』, 朝倉書店, 2001.