土木学会第51回年次学術講演会（平成８年９月）

# CS-147　確率(ﾏﾙｺﾌ)過程による修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞの考察

（株）地崎工業 技術開発部　正会員　須藤 敦史
武蔵工業大学 工学部　　正会員　星谷　勝

## １．はじめに

組み合わせ最適化問題は、多数の解の中から制約条件に適合する特殊な組み合わせを見つけだす確定的な問題であり、連続変数問題のように目的関数の情報を直接用いることができないため、最適解の探索は難しい。このような状況下、生物体の進化現象や熱力学現象を離散最適化理論に応用した探索法[1),2)]が提案されている。これらの探索法は確率的な考え方をｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑに取り入れているため、確率化は効率的な探索ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを構成する上で重要である。そこで本研究では、組み合わせ最適化問題を確率化する利点を考察し、加えて著者らが提案した確率的探索法[3)]（修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞ法）の理論背景を離散ﾏﾙｺﾌ過程により解説している。

## ２．組み合わせ最適化問題の特徴

組み合わせ最適化問題が実数目的関数$f(x)$を用いて式(1)のように定義されるとする。

$$f(x) \rightarrow \min_{\{x\}} \qquad (1)$$

ここで、$x$は離散的な状態変数とし、状態空間Xは有限集合とする。この問題はFig.1に示すように制約条件を満足する特殊な組み合わせを見つけ出す確定的な問題となる。このような問題連続変数の最適化問題のように接線勾配の情報等を用いることができないため最適解の探索は極めて難しい。

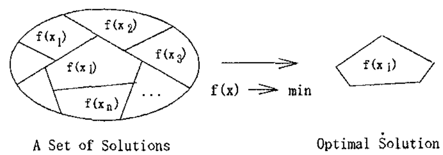


Fig.1 Diterministic Interpretation of Combinational Optimization Problems

そこで、提案されている多くの探索法はそのｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑに確率的な考え方を取り入れることで、これらの問題を解決している。この確率的探索法はFig.2に示すように、数多くの組み合わせを解集合と定義し、その分布特性や期待値・分散値に着目している。しかし、解集合の分布特性は未知であるため、修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞ法やGAではﾗﾝﾀﾞﾑｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞにより解集合の分布特性を把握し、制約条件に適合する部分集合を漸化的に推定するｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを構成している。このように探索法を確率化する利点は、解集合の確率・統計的性質に着目するため扱う変数が少なく、かつ多点探索を行うため、目的関数の接線勾配などの情報を用いることなく最適解の探索が行える点である。

## ３．離散ﾏﾙｺﾌ過程による考察[4)]

式(1)の組み合わせ最適化問題を定式化する場合に確率が導入される。基本空間$\Omega(\Omega \subset X)$，最適な組み合わせが出現する確率分布を$P$とすると、式(2)のように確率変数$x(\omega)$の期待値$g(x)$を可能領域$H$ ($x \in H$)において最大化する問題となる。

$$g(x) \equiv \int_{\Omega} x(\omega) P(d\omega) \qquad (2)$$

上記では解集合の確率分布が既知でないため、何らかの方法でその期待値を推定しながら最適解を求める必要が生じる。そこで、解空間$\Omega$にｻﾝﾌﾟﾙを発生させることにより解集合の分布特性を把握し、かつ制約条件を満たす部分集合を離散変数の領域として漸化的に視せようしてゆき、より良い解で構成される部分集合を求める方法が修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞ法であり、この手法の探索概念図をFig.3に示す。

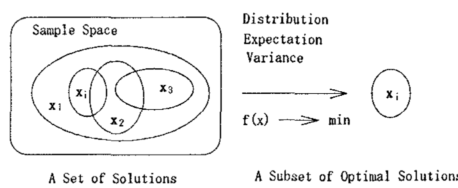


Fig.2 Stochastic Interpretation of Combinational Optimization Problems

修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞでは、ｽﾃｯﾌﾟk回目のｻﾝﾌﾟﾙﾍﾞｸﾄﾙはｻﾝﾌﾟﾙ領域$D_k$より抽出され、この領域はk-1回目のｻﾝﾌﾟﾙﾍﾞｸﾄﾙにより決定される。したがって、この過程はﾏﾙｺﾌ過程となり条件付き確率の式(3)となる。

$$f(y^i_{(k)} \mid y^i_{(1)}, y^i_{(2)}, \cdots, y^i_{(k-1)}) = f(y^i_{(k)} \mid y^i_{(k-1)}) \qquad (3)$$

離散ﾏﾙｺﾌ過程では、要素$P_{ij}$から構成される推移確率行列Pを用いて、個々の確率変数の状態分布$\pi_t$から$\pi_{t+1}$への状態推移として式(4)のように表す。

$$\pi_{t+1} = \pi_t \cdot P \qquad (4)$$

$\pi_t$：時刻tにおける状態確率分布($1 \cdot N$)，　$\pi_0 = [y_1, y_2, \cdots, y_N]$，N:解候補数，　$P = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1N} \\ P_{21} & P_{22} & \cdots & P_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{N1} & P_{N2} & \cdots & P_{NN} \end{bmatrix}$

ここで、推移確率行列において最適解に位置する要素が1，それ以外の要素が0になれば、ｻﾝﾌﾟﾙﾍﾞｸﾄﾙは最適解のみが得られる唯一の分布状態となる。しかし、組み合わせ最適化問題では推移確率行列のどの要素が最適解であるかは不明であるため、得られたｻﾝﾌﾟﾙﾍﾞｸﾄﾙを情報源として推移確率行列を推定する方法を考える。

いま推移確率$P=P_{ij}$をもつﾏﾙｺﾌ連鎖の時刻0からTまでの状態確率分布の履歴が$y_0, y_1, \cdots, y_T$となる確率を考えると式(5)となる。

$$P_{y0,y1}\cdot P_{y1,y2}\cdots P_{yT-1,yT}=\prod_{i=1}^{S}\prod_{j=1}^{S}P_{ij}^{n_{ij}} \qquad (5)$$

$n_{ij}$:状態iからjへの推移回数, $y_0$:Given（ｻﾝﾌﾟﾙ）

上式で推移確率行列$P_{ij}$は未知量であるが、ｻﾝﾌﾟﾙ値が得られているため、このｻﾝﾌﾟﾙ(推移)個数$n_{ij}$より推移確率行列を推定する。ここで、$P_{ij}$を未知ﾊﾟﾗﾒｰﾀとして式(5)の対数尤度関数Lを求めると次式となる。

$$\log L=\sum_{i=1}^{S}\sum_{j=1}^{S}n_{ij}\log P_{ij} \qquad (6)$$

上式を最大にする推移確率$P_{ij}$を求める問題となるが、以下の式に示す制約条件を満たす。

$$P_{ij}\geq 0,\ i,j=1,2,\cdots,S \qquad (7.\mathrm{a})$$

$$\sum_{j=1}^{S}P_{ij}=1,\ i=1,2,\cdots,S \qquad (7.\mathrm{b})$$

したがって、次式のように問題は制約条件付きの最大値問題となる。

$$F=\log L+\sum_{i=1}^{S}\lambda_i\Big(\sum_{j=i}^{S}P_{ij}-1\Big)=\sum_{i=1}^{S}\Big[\sum_{j=1}^{S}n_{ij}\log P_{ij}+\lambda_i\Big(\sum_{j=1}^{S}P_{ij}-1\Big)\Big] \qquad (8)$$

$\lambda_i$:ﾗｸﾞﾗﾝｼﾞｪ常数, $i=1,2,\cdots,S$

ここで、上式のlogLを最大にする$P_{ij}$はFを$P_{ij}$と$\lambda_i$について偏微分し、両者を連立させて解けばよい。

$$\frac{\partial F}{\partial P_{ij}}=\frac{n_{ij}}{P_{ij}}+\lambda_i \qquad (9)$$

上式の左辺を0にすると式(10)となり、これをを式(7.b)に代入すると式(11)となる。

$$P_{ij}=-\lambda_i^{-1}n_{ij} \qquad (10)$$

$$1=\sum_{j=1}^{S}P_{ij}=-\lambda_i^{-1}\sum_{j=1}^{S}n_{ij}=-\lambda_i^{-1}n_i \qquad (11)$$

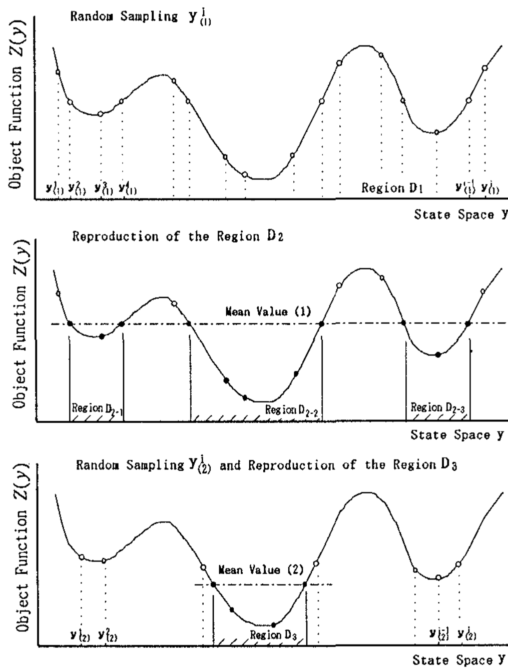


Fig.3 Processes of
Modefied Importance Sampling

式(10),(11)より、推移確率行列における要素の推定値は式(12)のように求められる。

$$P_{ij}=n_{ij}/n_i \qquad \because\ n_i=\sum_{j=1}^{S}n_{ij} \qquad (12)$$

したがって、推移確率行列における要素の推定値は、制約条件を満足したｻﾝﾌﾟﾙの各要素数を総数で割った値となる。しかし、ｻﾝﾌﾟﾙは限られた数であるため式(12)により推定された推移確率行列の要素は、正確な値を示すとは限らない。そこで、求められた各要素の範囲を次回のｻﾝﾌﾟﾙ領域として設定しｻﾝﾌﾟﾙを行う。この操作を繰り返し、制約条件を満足する解集合を推定する手法である。

以上のように、修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ･ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞ法は組み合わせ最適化問題を確率過程と考え、解集合の分布をｻﾝﾌﾟﾙﾍﾞｸﾄﾙより把握する。次に制約条件を満たすｻﾝﾌﾟﾙ個数により唯一の推移確率行列を離散ﾏﾙｺﾌ過程により漸化的に推定し、最適解のみで構成される部分集合を求めるものである。

## ４．結　論

本研究では、組み合わせ最適化問題における特徴と探索法を確率化する利点の考察した。次に修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞ法における理論背景の解説を行い、以下に示す結論が得られた。

1)組み合わせ最適化問題は確定的問題であり、この問題を確率的に考えると解候補集合の確率･統計的特性(分布特性)を扱う問題に置き換えられる。

2)修正ｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ･ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞ法は、解候補集合において確率分布の対数尤度を最大にする解を最適解とし、その漸化的な推定を離散ﾏﾙｺﾌ過程により行っている。

**参考 文献**

1)Goldberg, D. E.:Genetic Algorithm in Search, Optimization and Machine Learning, Addison-Wesly Publishing Company, 1989.

2)深尾 毅:最適化問題の確率化と熱力学, 計測と制御, Vol. 29, No. 12, pp. 11-17, 1990.

3)須藤敦史･星谷 勝･宮沢和樹:遺伝的要素を考慮したｲﾝﾎﾟｰﾀﾝｽ・ｻﾝﾌﾟﾘﾝｸﾞによる離散型変数を有するｼｽﾃﾑの最適化, 土木学会論文集, No. 519/Ⅰ-32, pp. 223-232, 1995.

4)森村英典･高橋幸雄:ﾏﾙｺﾌ解析, 日科技連, 1995.