

確率的技法を用いた組み合わせ最適化手法の情報理論による考察

須藤 敦史¹・星谷 勝²

¹正会員 博士(工学) (株)地崎工業 技術開発部 主任研究員(〒105-8488 東京都港区西新橋2-23-1)

²正会員 Ph. D. 武蔵工業大学教授 工学部土木工学科 (〒158-8557 東京都世田谷区玉堤1-28-1)

組み合わせ最適化問題は、多数の候補から制約条件に適合する特定の組み合わせを探索する決定論的な問題であり、連続変数の最適化手法のように接線勾配などの情報を用いることができないため最適解の探索は難しく、かつ局所解への滞留問題も生じる。このような問題の解法として Simulated Annealing, Genetic Algorithm, Random Sampling を基本とした手法などの発見的探索法が用いられており、これらの方法は候補やアルゴリズムに対して確率的な考え方を導入することで、効率的な探索や局所解回避を図っている。そこで本報告では、組み合わせ最適化問題の特徴を整理し、同時に確率化の効用を明らかにしている。さらに情報エントピーを指標とした局所解を回避するサンプリング方法を提案し、その妥当性を数値解析により検証している。

Key Words: combinatorial optimization problems, simulated annealing, genetic algorithm, random sampling, information entropy

1. はじめに

目的関数(評価指標)を設定し、それを最大あるいは最小化して構造物などを設計することは最適設計と呼ばれているが、実際の設計においてはさまざまな制約条件より設計変数が離散量を示す場合が多く、組み合わせ最適化問題を解かなければならないのが現状である。しかし、このような問題では目的関数が不連続になるため、接線勾配など目的関数からの情報が得られず、最適解の探索には連続変数の最適化手法とは基本的に異なった解法が必要とされる。

このような組み合わせ最適化問題の解法として Genetic Algorithm: GA¹⁾, Simulated Annealing: SA²⁾, Random Sampling³⁾ を基本とした Modified Importance Sampling⁴⁾(以後 MIS と呼ぶ) など探索アルゴリズムに確率・統計的な考え方や技法を導入した発見的探索法と称される近似解法が有効とされている。しかし、その有用性にも関わらず探索アルゴリズムの基本概念が不明瞭であったり、加えてアルゴリズムの構成や制御パラメータの設定などが経験的になることも指摘されている。

したがって、このような発見的探索法を有効に活用して、より汎用的な解法として発展させるためには、組み合わせ最適化問題の特徴を整理するとともに探索アルゴリズムに対する基本的な考え方を明確にする必要が生じる。

そこで本報告では、まず組み合わせ最適化問題の特徴

を明確にすることより、探索上の問題点を整理している。次に発見的探索法における組み合わせ最適化問題の捉え方を考察し、探索アルゴリズムに確率・統計的な技法を導入する意義やその効果を離散化過程および情報理論により明らかにしている。最後に候補集合の情報エントピーを指標とした局所解滞留を回避するサンプリング方法を提案し、簡単な数値解析例でその妥当性を検証している。

2. 組み合わせ最適化問題の確率(マクロ)化

組み合わせ最適化問題の探索アルゴリズムを評価するときに探索空間の複雑さがどのようなものか明らかにすることが重要である。そこで組み合わせ最適化問題の特徴を整理して発見的探索法における問題の捉え方を考察する。

(1) 組み合わせ最適化問題の特徴

組み合わせ最適化問題は実数の目的関数 $f(x)$ を用いて式(1)のように定義される。

$$\min_{(x)} \{f(x) \mid x \in X\} \quad (1)$$

x : 離散状態変数ベクトル, X : 状態空間における有限集合

ここで組み合わせ最適化問題は、すべての候補を探索すれば最適解が求められる決定論的な問題である。

また一つ一つの解候補に対する評価を必要とするため、 M 知問題とも呼ばれている。しかし実際の問題では離散変数が膨大になるなどの理由により、以下の問題が生じる。

- (1) 設計変数が極端に多い場合には計算量が爆発的に増加するため、完全に解の探索をすることは不可能となる。加えて局所解への滞留問題も生じる。(計算量の増大と解の唯一性の問題、局所解への滞留問題)
- (2) 接線勾配のような目的関数からの情報が得られないため、何らかの方法により探索情報を得なければならぬ。(探索情報の問題)
- (3) 得られる少ない情報を活用した探索アルゴリズムを構成しなければならない。(効率的アルゴリズムの構成問題)

(2) 発見的探索法の基本的な考え方

発見的探索法は、計算量の軽減など効率的な探索アルゴリズムを構成する目的で a)探索過程で前回よりも良い解(最良解)が得られれば良く、b)解の最適性は収束性で判断する、という大前提で以下に示す考え方を導入している。

- (1) 複数の解候補から直接探索情報を入手する。(多点探索法)
- (2) 解候補の集合特性(平均値・分散値)に着目することで解候補一つ一つを扱う必要がなく、計算量の軽減が可能となる。(候補集合の確率・統計的性質を利用)
- (3) ダウソウの進化論(GA)、物理現象(SA)、離散マルコフ決定過程(MIS法)などを利用することで、連続変数の最適化手法とは基本的に異なった探索アルゴリズムを構成している。(自然・物理現象の最適化アルゴリズムの適用)
- (4) 仮説探索を繰り返すことで、最良解を捜し出す方法を採用している。(繰り返し探索法)

以上のように、発見的探索法は目的関数(評価尺度)を設定し、解候補(仮説)をより良い解候補で置き換えて改良していく解法である。これは「山登り法(Hill Climbing Search)」と呼ばれる解法の一つであり、目的関数の山を高く登れば登るほど優れた解候補が得られる手法である。

したがって、組み合わせ最適化問題のような(加)決定論的問題の解候補を集合的に扱うことで近似的に問題の(加)確率化を図り、少ない計算量で効率的により良い解候補を得ようとするのが発見的探索法の特徴の一つである。

(3) 組み合わせ最適化問題の確率表現

組み合わせ最適化問題の確率化は、つまり解候補 x_1, x_2, \dots, x_n の生起確率 $p(x_1), p(x_2), \dots, p(x_n)$ の分布を、候補集合の評価値などで随時設定してゆく問題であり、Simulated Annealing⁹⁾や Boltzmann Machine⁷⁾ではこの確率分布で一つの解候補が実現値として出現し、GAやMIS法では複数の解候補がこの確率分布により出現する。このとき解候補の期待値は次式で表される。

$$E[x] = \sum_{i=1}^n x_i p(x_i) \quad (2)$$

$p(x_i)$: 候補 x_i の出現確率、 n : 候補総数

$$0 \leq p_i \leq 1, \sum_{i=1}^n p(x_i) = 1$$

この確率分布の分散を小さく、期待値が最適解になるように設定すれば、出現する解候補が最適解となる確率は高くなる。したがって、効率的な探索法とはいかに少ない操作(手続き)で解候補を生起する確率分布の期待値を最適解の近傍に、同時により小さい分散値を設定する探索アルゴリズムを構成するかか決め手となり、GAではダウソウの進化論、SAでは物理現象、またMIS法では離散マルコフ決定過程によりこの探索アルゴリズムを構成している。

3. 情報理論による発見的探索法の考察

Random Samplingを基本としたMIS法や突然変異を用いないSimple GAは離散マルコフ決定過程によって定式化できるが、これを詳細に解説した文献⁸⁾は少ない。そこで最も単純なアルゴリズムを有するMIS法を例に上げて発見的探索法における確率的な考え方を整理し、加えて探索アルゴリズムにおける確率的技法の導入意義を情報理論により考察する。

(1) 離散マルコフ決定過程⁹⁾による考察

一般の組み合わせ最適化問題においてMIS法やGAでは、初回の探索過程で最適解に関する事前情報が全くない際に解候補集合は式(3)に示すように、互いが有する N 個の設計(離散確率)変数ごとに領域 D_N^1 (取り得る候補の数は M) から、それぞれ M に n 個の抽出される。

(第1回目-解候補 n 個)

$$x_{(1)}^n = \{x_1^n \in D_1^1, x_2^n \in D_2^1, \dots, x_N^n \in D_N^1\} \quad (3)$$

$x_{(1)}^n$: 初回の解候補集合、 x_i^n : i 番目の設計変数の実現値
次にMIS法では設計変数 (N 個) ごとに解候補 (n 個) から平均値以上の目的関数値を有する候補を選抜して、それらが存在する範囲を初回の領域 D_1^1, \dots, D_N^1 から選び出し、次回の探索領域 D_1^2, \dots, D_N^2 と設定する。

一方Simple GAでは適応度(制約条件を満足する)の高い個体を取り出し、その遺伝子(確率変数ベクトル)を交配させて(組み合わせ)、次回探索の個体集団を作成する。したがって、両手法とも探索 t 回目における解候補集合は $t-1$ 回目の解候補集合に依存する離散マルコフ過程(連鎖)を

示しており、これを条件付き確率で表すと式(4)となる。

$$p(x_{(i)}^n | x_{(1)}^n, x_{(2)}^n, \dots, x_{(i-1)}^n) = p(x_{(i)}^n | x_{(i-1)}^n) \quad (4)$$

これを各設計変数ごとに、推移確率行列 P を用いた確率分布 π_i から π_{i+1} への状態推移で示すと式(5)ようになる。

$$\pi_{i+1} = \pi_i \cdot P \quad (5)$$

π_i : 状態確率分布 ($1 \times M$), M : 取りうる候補の数

$$P = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1M} \\ p_{21} & p_{22} & \dots & p_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{M1} & p_{M2} & \dots & p_{MM} \end{bmatrix} \text{ : 推移確率行列}$$

初回の探索では、それぞれの領域 D_1^1, \dots, D_N^1 における

M 個の取りうる候補からランダムに抽出(推移確率行列の各要素 p_{ij} は確率 $1/M$)される。

ここで推移確率行列の中で最適解となる要素の確率が1、それ以外の要素が0になれば、常に最適解のみが生起する唯一の分布状態となる。しかし、どの要素が最適解であるかは不明であるため、何らかの方法で確率1になる要素の位置を推定しなければならない。そこで、唯一の情報

は推移した候補(平均値以上の目的関数を有する候補)

の個数 n_{ij} であるため、これを用いて確率1になる要素位

置の推定を考える。いま、多項分布の確率分布を推移個数

n_{ij} で表すと式(6)となる¹⁰⁾。また推移確率 p_{ij} を未知パラ

メータとすると対数尤度関数 $\log L$ は式(7)となる。

$$F(p_{11}, \dots, p_{MM}) = \frac{n_i!}{\prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^M n_{ij}!} \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^M p_{ij}^{n_{ij}} \quad (6)$$

$$\therefore n_i = \sum_{j=1}^M n_{ij}$$

$$\log L = \log(n_i! / \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^M n_{ij}!) + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M n_{ij} \log p_{ij} \quad (7)$$

ここで上式右辺第1項は定数となるため、式(9)の制約条件

で式(8)を最大にする推移確率 p_{ij} を求める問題となる。

$$\log L' = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M n_{ij} \log p_{ij} \quad (8)$$

$$p_{ij} \geq 0, i, j = 1, 2, \dots, M \quad (9.a)$$

$$\sum_{j=1}^M p_{ij} = 1, i = 1, 2, \dots, M \quad (9.b)$$

よってラグランジュの未定係数法により推移確率行列の要素は、式(10)のように推移した解候補の個数 n_{ij} で表される。

$$p_{ij} = n_{ij} / n_i \quad (10)$$

したがって、推移確率行列における各要素の推定値は推移した解候補数をその総数で除した値となり、同時に分布の推定値も得られる。しかし、これはあくまで限られた解候補の数による推定であるため、MIS法では領域の限定操作(範囲を狭めた一様分布で選抜)で代替している。

(2) 情報理論¹¹⁾による探索アルゴリズムの考察

情報とはある事象の不確定性を減少させるものであり、情報理論では定量的な評価指標として情報量という考え方を導入している。しかし実際にはある生起確率 $p(a_i)$

を有する事象 X (N_1 : 確率事象の数)の平均的な情報量として以下に示すような情報エントロピー¹²⁾を定義している。

$$H(X) = \sum_{i=1}^{N_1} -p(a_i) \log p(a_i) \quad (11)$$

ここで式(11)から分かるように、解候補の一様分布からの選抜は情報エントロピー¹²⁾が最大になる。このことは解に関する事前情報が全くない場合における偏りのない探索の試行を意味しており、前述の取りうる候補 (M 個)からのランダムな選抜は、事前情報がないときに推移確率行列の各要素を設定する合理的な手法である。(無差別原理)

いま、情報エントロピー¹²⁾の簡単な事例として桁数を振る確率モデルを考える。

$$X_1 = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 & a_5 & a_6 \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} \end{pmatrix} \quad (12)$$

ここで上段の記号 a_i は i の目が出る事象 X_1 、下段は

個々の事象 a_i の生起確率であり、このときの情報エントロピー¹²⁾

は以下の式となる。

$$H(X_1) = \sum_x -\frac{1}{6} \log \frac{1}{6} = 1.792 \quad (13)$$

つまり、桁数の一つの目が出現する不確定性の評価値を

$-\log p(a_i) = -\log 1/6$ とすれば、事象全体における不確定さの平均量が情報エントピー^oである。

次に1と6の目が候補から削除された(探索範囲を狭める操作)とすると事象の確率は式(14)となり、その時の情報エントピー^oは式(15)となる。

$$X_2 = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 & a_5 & a_6 \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$H(X_2) = \sum_x -\frac{1}{4} \log \frac{1}{4} = 1.386 \quad (15)$$

同様に2と5の目が候補から削除されたすると、情報エントピー^oは式(16)となる。

$$H(X_3) = \sum_x -\frac{1}{2} \log \frac{1}{2} = 0.693 \quad (16)$$

ここで、候補の数が少なくなるにつれて情報エントピー^oは小さくなることより、得られる解候補の不確定性の減少を示している。したがって、情報エントピー^o最小となるような解候補の選抜は、ある特定な組み合わせ(最適解)の探索を意味し、このことは推移確率行列において最適解となる要素確率を1、それ以外を0にする唯一の分布を形成することと同様の操作となる。

一方、この探索過程における解候補は一つ前の解候補状態に依存するマルコフ過程(連鎖)を示し、条件付き確率で表される。いま、以下に示す確率行列 X 、 Y とその結合確率行列 $Z = X \cdot Y$ が定義される事象の条件付き確率の情報量を考える。

$$X = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_M \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_M \end{pmatrix} \quad (17.a)$$

$$Y = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_M \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_M \end{pmatrix} \quad (17.b)$$

$$Z = X \cdot Y = \begin{pmatrix} a_i \cap b_j & i=1,2,\dots,M \\ r_{ij} & j=1,2,\dots,M \end{pmatrix} \quad (17.c)$$

r_{ij} : 事象 a_i 、 b_j が同時に生起する確率

事象 a_i が得られたときの事象 b_j に対する条件付き確率の情報エントピー^oは次式となる。

$$H(Y|X) = \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^M -P(a_i)P(b_j|a_i) \log P(b_j|a_i) \quad (18)$$

また、上式は式(19)より式(20)となる。

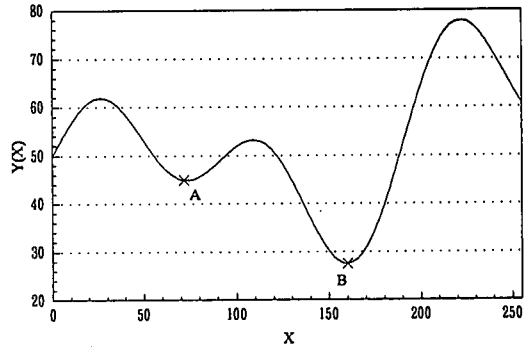


図-1 目的関数

$$P(b_j | a_i) = \frac{P(a_i \cap b_j)}{P(a_i)} \quad (19)$$

$$H(Y|X) = \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^M -P(a_i \cap b_j) \log P(b_j | a_i) \quad (20)$$

この時、条件付き確率の情報エントピー^oにおいて事象 a_i と b_j が同時に生起した確率 $P(a_i \cap b_j)$ を実際に推移した解候補の数 n_{ij} で置き換えると式(8)で示した対数尤度関数 $\log L'$ となる。また次回の探索確率は対数尤度関数で推移確率 p_{ij} を求める問題と同様に情報エントピー^oを最大にするすることで条件付き確率 $P(b_j | a_i)$ は偏りのない生起確率として式(20)から求められ、加えて選抜された候補数をその総数で除した値となる。

4. 情報エントピー^oを用いた局所解回避アルゴリズム

従来の探索法で採用している局所解回避アルゴリズムの共通点は、以下のように次回の探索点の選定に確率という重みを付加している所にある。

(1)探索の確率的揺動(乱数アルゴリズム)

(2)解の確率・統計的許容(確率分布)

探索の確率的揺動においてGAは交叉・突然変異などの制御パラメータに乱数を用い、またMIS法では一定比率の解候補を広い探索領域からランダムに選抜することで局所解滞留の回避を期待している。一方、解の確率・統計的許容においてSAでは評価値が低い解が生起されても、ある受容確率で容認することで局所解からの脱出を期待している。

以上のようにいずれにおいても局所解の回避アルゴリズムに確率的な操作を用いている。しかし、確率的揺動では多様性を有する解候補を生成するので遠方探索を行う反面、

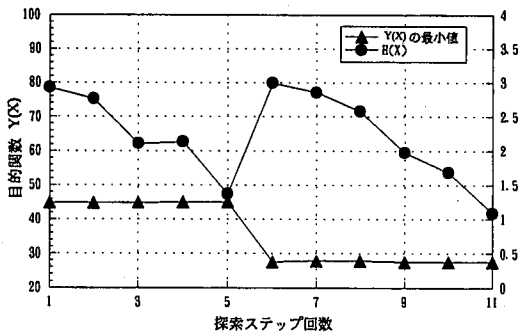


図-2 目的関数と情報エントロピー

近傍探索を行う確率が低く、一方、確率・統計的許容では前回の候補付近で探索を行う確率が高く、遠方探索を実施する確率が低いこと急峻かつ深い谷で形成される目的関数を有する場合の脱出は極めて難しい。

(1) 情報エントロピーを指標にした局所解回避

確率的揺動を基本とし、情報エントロピーを解候補の生起指標とした局所解回避アルゴリズムを考える。ここで探索過程において解候補集合の情報エントロピーが小さくなることは、特定な組み合わせが卓越することを意味し、局所解に停滞して解候補の多様性が失われている可能性が高いと判断される（同時に最適解である可能性もある）。

そこで、解候補集合の情報エントロピーに着目し、これらが小さくなった場合には、解の多様性が失われたと判断して、再度初回の候補領域から解候補をランダムに生起させる操作を行う。これより解の局所最適化を回避する可能性が高くなり、加えて無駄な候補の生起がなくなるため効率的な最適解の探索が行える。

この操作の妥当性を以下に示す関数を用いて検証する。

$$Y(X) = 10 \sin\left(\frac{X}{15}\right) + \left(\frac{X}{10}\right) \sin\left(\frac{X}{30}\right) + 50 \quad (21)$$

$$0 \leq X \leq 255$$

式(21)においてXは連続量であるが、組み合わせ最適化問題における局所解からの回避を検討するため、整数値の離散変数とする。加えて、連続変数としてY(X)が表す曲線は図-1に示すようにA点、B点の2つの極小点を持った関数となる。情報エントロピー $H(X)$ は以下のように、N個の設計変数ごとにエントロピー $H_j(M)$ を計算し、これらの総和で表している。

$$H(X) = \sum_{j=1}^N H_j(M) \quad (22)$$

$$H_j(M) = \sum_{i=1}^M -p_{ij} \log p_{ij} \quad (23), \quad p_{ij} = \frac{n_{ij}}{M} \quad (24)$$

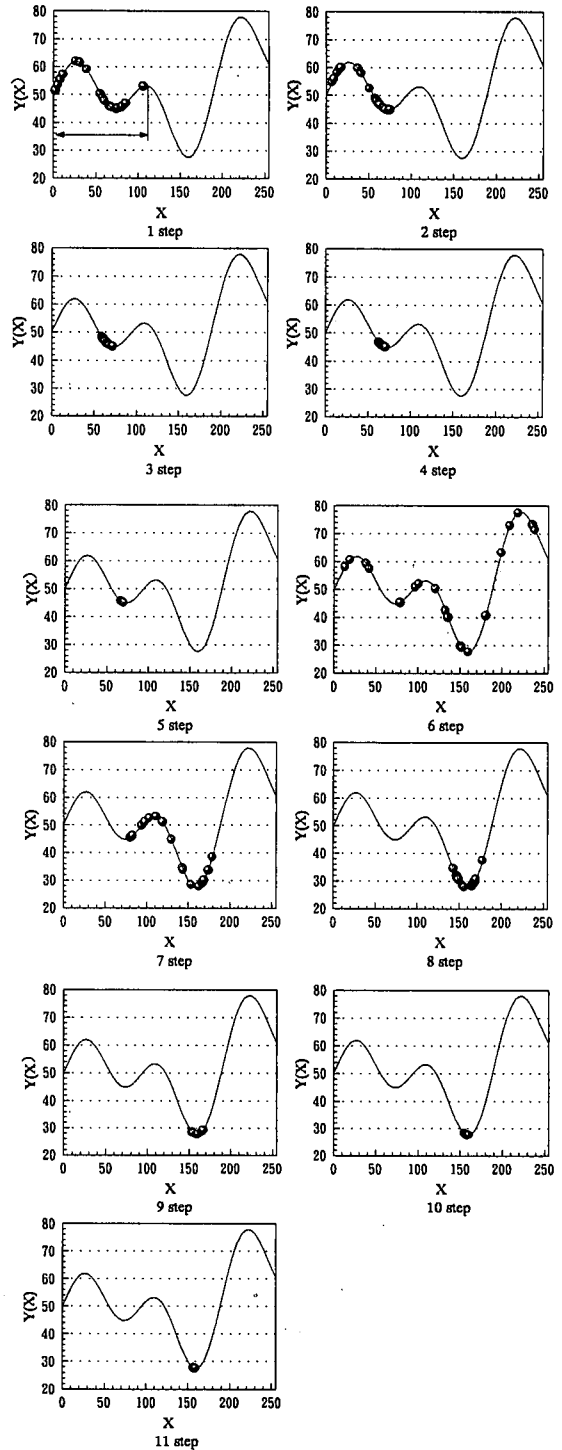


図-3 解候補の分布状況

ここで n_{ij} は解候補において j 番目の位置に取りうる候補 M 個から i 番目の候補が出現した個数を表しており、この情報エントロピーの総和が小さくなった場合に解候補集合

の多様性が減少したものと判断して解候補を初回の候補領域から改めてシグムに生起させる。検証解析では解候補数は 20 個とし、情報エントロピーにおける基準の設定法は自由エントロピーを参考にする方法もあるが、ここでは単純に最大情報エントロピーの約半分 1.4 を規準として設定した。つまり候補集合の情報量が基準値以下になった場合、解候補が再度シグムに生起される。

ここで効果を明確にするため、あえて初期の解候補を A 点近傍の領域 ($0 < X < 110$) から生起させ、情報エントロピーが小さくなった場合の広い生起領域は ($0 < X < 255$)、加えて広い領域からの生起数は初期候補数と同数とした。

探索の回数を 11 回として目的関数の最小値と情報エントロピーの変化を図-2 解候補の分布状況を図-3 に示す。

図-2 より、探索 5 回目まで情報エントロピーは基準値を下回り、6 回目の探索では広い領域から解候補の生起が行われている。また、情報エントロピーは急激に増加しているが、解候補は良い値を示していることより局所解から抜け出したと判断される。加えて、図-3 より探索回数 1 回~5 回目までは局所解 A 点付近に解候補が集中している。しかし 5 回目の探索で情報エントロピーが基準値以下となり、探索 6 回目以降では最適解 B 点付近の解候補が得られている。このことより情報エントロピーにより解候補の多様性が評価ができ効率的な局所解回避アルゴリズムの構成が可能となった。

5. まとめ

本報告では、組み合わせ最適化問題における特徴の整理、発見的探索法の離散マルコフ決定過程および情報理論による考察を行った結果、以下に示す結論が得られた。

- (1) 発見的探索手法は、組み合わせ最適化問題の確率化を図ることで近似的に解を得ようとする解法である。つまり解候補が生起する確率分布を候補集合の情報より、分散が小さく期待値を最適解近傍に設定する

問題に置き換えている。

- (2) 離散マルコフ決定過程では、推移確率行列の唯一の分布が最適解を生起する状態となり、推移した候補の数からその要素位置は推定される。
- (3) 情報理論では、解候補を情報エントロピーが最大(偏りのない一様分布)になるように生起させ、情報エントロピーが最小となる特定な組み合わせが最適解となる。加えて次回の探索確率は推移確率行列を求める問題と同様に選抜された候補数をその総数で除した値となる。
- (4) 情報エントロピーにより解集合の多様度を評価でき、これを利用して計算量を軽減させた局所解回避アルゴリズムの構成が可能となる。

参考文献

- 1) Goldberg, D.E.: *Genetic Algorithms*, Addison-Wesley, 1983.
- 2) Aarts, E. and Korst, E.: *Simulated Annealing and Boltzmann Machine*, John Wiley, 1989.
- 3) Rubinstein, R.Y.: *Simulation and Monte Carlo Method*, John Wiley, 1981.
- 4) 須藤政史・星谷勝・宮沢和樹・徳伝の要素を考慮したイボ・タスガリシカによる離散型変数を有するシグムの最適化, 土木学会論文集, 第519号, 1-32, pp.223-232, 1995.
- 5) Hoshiya, M. and Sutoh, A.: Optimization Analysis by Importance Sampling, GA procedure and other MCS-Based Algorithms, *Jour. of Prob Eng Mch*, Vol. 12, No.14, pp. 221-223, 1997.
- 6) Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D. and Vecchi, M.P.: Optimization by Simulated Annealing, *Science* 220, pp. 671-681, 1983.
- 7) Ackley, D.H., Hinton, G.E. and Sejnowski, T.J.: A Learning Algorithm for Boltzmann Machines, *Cognitive Science* 9-1, pp. 147-169, 1983.
- 8) 山村雅幸, 織田悦子, 小林重信: マルコフ過程による Simple GA の解析, 日本機械学会第 2 回 FAN シボシグム論文集, pp. 383-388, 1992.
- 9) 森村英典, 高橋幸雄: マルコフ解析, 日科技連, 1985.
- 10) 西尾勝: 自然科学の統計学, 東京大学出版会, 1996.
- 11) 有本卓: 確率・情報エントロピー, 森北出版, 1994.

(1998 7. 10 受付)

A BASIC CONSIDERATION ON COMBINATORIAL OPTIMIZATION PROBLEM USING INFORMATION THEORY

Atsushi SUTOH and Masaru HOSHIYA

This paper deals with an interpretation on stochastic combinatorial optimization algorithm using Markov process and Information theory. Combinatorial optimization problems are essential for seeking a specific set among other alternatives. These problems cannot be solved by standard optimization techniques such as the Newton method. And, these problems are almost always exposed to the danger of falling in local minima. Under these circumstances, techniques which integrate biological evolution process, physical process, and stochastic processing have been developed. These techniques are usually cast into a probabilistic and information framework via such paradigms as combinatorial optimization, stochastic-based algorithm.