均衡制約付数理計画問題(MPEC)のための最適化手法に関する研究*

Research on optimization technique for mathematical problem with equilibrium constraints (MPEC)*

穴口智也**・中山晶一朗***・高山純一****

By Tomonari ANAGUCHI**・Shoichiro NAKAYAMA***・Jun-ichi TAKAYAMA****

1. 本研究の背景と目的

最適化問題(Optimization Problem)は，与えられた制約条件の下で何らかの目的関数を最小もしくは最大にするような解を求める問題であり，従来から経営学やオペレーションズリサーチ(OR)の中心テーマであったが，今日では計算機技術の進捗によって自然科学，工学，社会科学などの幅広い分野に浸透，利用されている．この中でも有限次元ベクトル空間，すなわち扱う変数の数が有限個かつ与えられる条件の数も有限個の場合における最適化問題を総称して数理計画問題(Mathematical Programming Problem)といい，さらに均衡問題を制約条件として組み合わせた数理計画問題を均衡制約付数理計画問題(MPEC：Mathematical Problem with Equilibrium Constraints)という．これらの最適化問題を解く代表的な手法として，最急降下法やニュートン-ラフソン法(Newton-Laphson Method)，共役勾配法，遺伝的アルゴリズム(Genetic Algorithm, GA)などが挙げられる．

交通ネットワーク均衡モデルは交通ネットワークの計画，分析の際に重要な役割を果たしている．その中でロジット型利用者均衡（確率的利用者均衡）は，離散選択モデルによる経路選択に基づいた均衡である．ロジットモデルを用いた場合，経路効用Fは最も簡単な場合でも$F=-\theta\cdot t+\varepsilon$であり，パラメータ$\theta$を推定する必要がある．ここで$t$は経路の旅行時間，$\varepsilon$は確率項である．ロジット型利用者均衡では，このパラメータにどのような値を用いるべきかが問題となることが少なくない．また，$-\theta\cdot t+\varepsilon$よりも複雑な効用関数を定義することも可能で，その時は更にパラメータ推定が重要になる．

最適化問題を解く際，目的関数が極値を持つ関数，すなわち凸関数であれば最急降下法等を用いて最適解を求めることができる．しかし上記のような複雑なパラメータによる関数によって極値が複数あるような目的関数の場合，上記の最適化手法では局所解（局所的最適解）に陥ってしまう可能性があり，的確に最適解（大域的最適解）を求めることが困難である．そこで本研究では，交通ネットワーク均衡モデルにおけるロジットモデルのパラメータ推定を例に，焼きなまし法(Simulated Annealing, SA)を応用した最適化手法の提案を行う．そして，中山，高山[1)]の提案した最尤推定法を用いてリンク間の交通量の相関を考慮した交通ネットワーク均衡モデルに適用し，構築した最適化手法の有意性を示すことを目的とする．

2. 焼きなまし法を応用した最適化手法

(1) 最適化計算の概要と最急降下法

一般に，目的関数の最適化はパラメータの初期値をθ_0，更新回数をhとして，目的関数値が最適となるようにパラメータを順次更新していく．この過程を式で表すと以下のようになる．

$$\theta_h=\theta_{h-1}+\Delta\theta_{h-1} \tag{2.1}$$

ここで$\Delta\theta_{h-1}$は$h-1$番目のパラメータからh番目のパラメータへの変化量である．変化量を決める手法としては最急降下法やニュートン-ラフソン法がある．本研究で用いる最急降下法は1次微分を利用する方法で，目的関数を$f(\theta)$とした場合の変化量$\Delta\theta_{h-1}$は

$$\Delta\theta_{h-1}=-\alpha\frac{\partial f(\theta_{h-1})}{\partial\theta} \tag{2.2}$$

で表され，$f(\theta)$をθで偏微分した値で評価したものである．ここでαはステップサイズと呼ばれ，変化量に目的関数の偏微分値（傾き）をどれだけ反映させるかを決める値である．

(2) 焼きなまし法の概念とその特徴

焼きなまし(Annealing)とは金属を急激に加熱して分子の動きを活発にしてエネルギーの高い溶融状態にし，その後ゆっくりとエネルギーの低い結晶状態へ冷却することによって内部の欠陥を取り除いて安定した金属を作る手法である．焼きなまし法はそのエネルギーの高い溶融

*キーワーズ：交通ネットワーク分析

**学生員，工学，金沢大学大学院自然科学研究科
（石川県金沢市角間町，Mail：t-ana@stu.kanazawa-u.ac.jp）
***正会員，工博，同上
（TEL：076-423-4614，Mail：snakayama@t.kanazawa-u.ac.jp）
****フェロー会員，工博，同上
（TEL：076-423-4613，Mail：takayama@t.kanazawa-u.ac.jp）

状態からエネルギーの低い結晶状態に至る過程と最適化問題における目的関数の最小化の過程との密接な類似性を模擬し確率的なゆらぎを導入した最適化手法である．

最急降下法やニュートン-ラフソン法は変化量を 1 次や2次微分を利用して決定しているため，現在の傾きや傾きの変化といった局所的な情報のみに基づいてパラメータを更新している．このため，最急降下法やニュートン-ラフソン法を用いてパラメータの更新を行う場合，最適化計算の過程で一旦局所解に陥ってしまうとそこから脱出する術はないことになる．そこで，確率的なゆらぎを導入して局所解からの脱出を可能とし，最適解への収束を可能とした手法が焼きなまし法である．焼きなまし法の概念を模擬し最適化計算に組み込むと，式(2.1)は以下のような式に書き換えられる．

$$\theta_h = \theta_{h-1} + \Delta\theta_{h-1} + \varepsilon_h \tag{2.3}$$

式(2.3)において，右辺第2項が変化量，右辺第3項がゆらぎ項である．仮に一旦局所解に陥って右辺第2項の変化量がほぼ0になったとしても，右辺第3項のゆらぎ項により局所解の近傍をランダムウォークするため，局所解から脱出できる可能性が発生する．

(3) ゆらぎ項の数式表現

式(2.3)におけるゆらぎ項ε_hは以下のように表現することとする．

$$\varepsilon_h = \gamma \times \sqrt{T(h)} \tag{2.4}$$

ここでγは標準正規分布（平均値 0，標準偏差 1）に従う正規乱数，$T(h)$は温度減少関数，hは反復計算回数である．

温度減少関数$T(h)$とは，ゆらぎ，すなわち生成した正規乱数を最適化計算の過程で徐々に減少させていくための関数であり，焼きなまし法を効果的に実行するためには最も重要な関数である．本研究ではより高速に温度減少関数が小さくなる，Szu，Hartley[3]が提案した

$$T(h) = \frac{T(0)}{1+h} \tag{2.5}$$

を用いる．

(4) 定式化

今回構築した計算式は目的関数を$f(\theta)$，パラメータをθとして以下のように定式化できる．

$$\theta_h = \theta_{h-1} + \alpha \frac{\partial f(\theta_{h-1})}{\partial \theta} + \varepsilon_h \tag{2.6}$$

ここでαはステップサイズであり，またゆらぎ項ε_hは式(2.4)によって決定される値である．

3. ロジット型確率ネットワーク均衡の定式化

(1) ロジット型確率ネットワーク均衡

中山，高山[1]の研究では，OD 交通量はポアソン分布に従い，経路選択は確率的に行われると仮定している．このとき，経路交通量m_{ij}は独立なポアソン分布に従う．経路交通量が十分に大きい場合，ポアソン分布の平均と分散はともにm_{ij}であるため，中心極限定理により平均と分散がともにm_{ij}である正規分布$\mathrm{N}[m_{ij}, m_{ij}]$に従うと近似することができる．このとき，リンク交通量$\mathbf{x}$は以下の多変量正規分布として与えることができる．

$$f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n|\boldsymbol{\Sigma}|}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right\} \tag{3.1}$$

ただし$\boldsymbol{\mu}$は平均リンク交通量ベクトルでその要素はμ_a，$\boldsymbol{\Sigma}$はリンク交通量の分散共分散行列，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$は$\boldsymbol{\Sigma}$の逆行列，$|\boldsymbol{\Sigma}|$は$\boldsymbol{\Sigma}$の行列式，$n(=|A|)$はリンクの総数である．

リンク交通量の観測が行われたとして，その場合の観測リンク交通量を$\tilde{\mathbf{x}}$とする．観測リンク交通量は式(3.1)の分布の周辺確率として以下の確率密度関数に従う．

$$f_{\mathbf{X}}(\tilde{\mathbf{x}}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{\tilde{n}}|\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}|}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{x}}-\tilde{\boldsymbol{\mu}})^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}(\tilde{\mathbf{x}}-\tilde{\boldsymbol{\mu}})\right\} \tag{3.2}$$

また，本研究では実用的に利用可能なロジットモデルによる経路選択確率を仮定する．各道路利用者は次式のロジットモデルに従い，経路選択確率$\mathbf{p}_i$を決定していると仮定する．

$$p_{ij} = \frac{\exp(-\theta\,\bar{c}_{ij})}{\sum_{j' \in J_n} \exp(-\theta\,\bar{c}_{ij'})} \tag{3.3}$$

ここで$\bar{c}_{ij}$は OD ペアiの経路jの平均旅行時間，θは正のパラメータである．

確率的ネットワーク均衡モデルを定式化するにあたり，式(3.3)を含んだ関数

$$\mathbf{g} = (g_{11}, \ldots, g_{21}, \ldots)^{\mathrm{T}} \tag{3.4}$$

を考える．関数$\mathbf{g}$の要素g_{ij}を以下のように定義する．

$$g_{ij}(\mathbf{m}) = \lambda_i \frac{\exp(-\theta\,\bar{c}_{ij}(\mathbf{m}))}{\sum_{j' \in J_n} \exp(-\theta\,\bar{c}_{ij'}(\mathbf{m}))} \tag{3.5}$$

確率ネットワーク均衡は関数（写像）$\mathbf{g}$に関する以下の不動点問題として定式化できる．

$$\mathbf{m} = \mathbf{g}(\mathbf{m}) \tag{3.6}$$

(2) 最尤推定法

リンク交通量の実現値，つまりリンク交通量の観測値$\tilde{\mathbf{x}}$が与えられた場合，式(3.2)に関して，以下の対数尤度関数$L(\boldsymbol{\theta}|\tilde{\mathbf{x}})$を定義することができる．

$$L(\boldsymbol{\theta}|\tilde{\mathbf{x}}) = \ln f_{\tilde{\mathbf{x}}}(\tilde{\mathbf{x}}) \tag{3.7a}$$

$$= \sum_{a \in \tilde{A}} \ln f_{X_a}(x_a|\mathbf{x}_{-a}) \tag{3.7b}$$

ただし$f_{X_a}(x_a|\mathbf{x}_{-a})$はリンク$a$以外のリンク交通量が与えられた場合のリンク$a$の交通量の確率密度関数である．

なおリンク交通量の観測が複数回行われた場合において，異なった回の観測値が独立ではない場合は，観測回間での関係を考慮した尤度関数を個別に設定することが必要になる．以降では断りがない限り $\tilde{\mathbf{x}}$ は観測回数が 1 回のみのデータとする．そして尤度関数を $l(\ln l = L)$ と表すこととする．

(3)　定式化

以下に示すように，前節で述べた確率ネットワーク均衡が下位問題となった均衡制約付数理計画問題（MPEC）として，最尤推定法を用いた $\boldsymbol{\theta}(=\theta_k(k \in K))$ を求めるパラメータ推定を定式化することができる．

$$\max_{\boldsymbol{\theta}} \quad L(\boldsymbol{\theta}|\tilde{\mathbf{x}},\mathbf{m}) \tag{3.8}$$

$$s.t. \quad \mathbf{m} = \mathbf{g}(\mathbf{m}) \tag{3.9}$$

4.　金沢市道路ネットワークへの計算プログラムの適用

(1)　金沢市道路ネットワークの概要

本章では前章までに構築した最適化手法と交通ネットワーク均衡モデルを金沢市道路ネットワークへ適用する．用いるネットワークデータについて，リンクの距離や制限速度，交通容量は平成 11 年度道路交通センサス一般交通量調査のデータを，OD 交通量については平成 7 年度・第 3 回金沢都市圏パーソントリップ調査のデータを用いている．また，リンク間の所要旅行時間は BPR 関数によって表され，自由走行時間はリンクの距離を制限速度で除した値を用いる．ここでノード数は 140，リンク数は 472，経路数は 9934 である．対象となる道路ネットワーク図を**図 4.1** に示す．

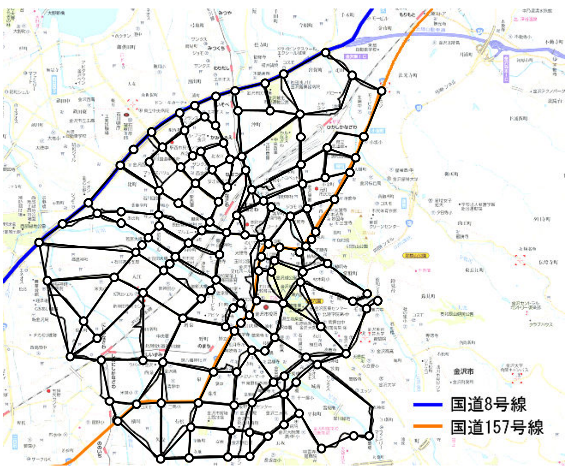

図 4.1　金沢市道路ネットワーク概要図

(2)　推定結果とその考察

これまでに示した諸データを用いて，金沢市道路ネットワークにおけるロジットパラメータ θ の推定を行う．今回は焼きなまし法の有意性を確かめるため，従来法である最急降下法との比較を行う．最急降下法と焼きなまし法を金沢市道路ネットワークへ適用した結果を**表 4-1**，焼きなまし法によって推定されたロジットパラメータ θ を用いて配分された経路交通量 $\mathbf{m}$ を変換して生成した配分リンク交通量 $\mathbf{x}$ と観測されたリンク交通量 $\tilde{\mathbf{x}}$ の相関図を 4-2 に示す．

表 4-1　計算結果の比較

	最急降下法	焼きなまし法
ロジットパラメータ θ	0.167	0.166
目的関数値 L	-16128.648	-16128.560
重回帰係数	0.975	0.975
重決定係数 R^2	0.968	0.968
重相関係数 R	0.984	0.984

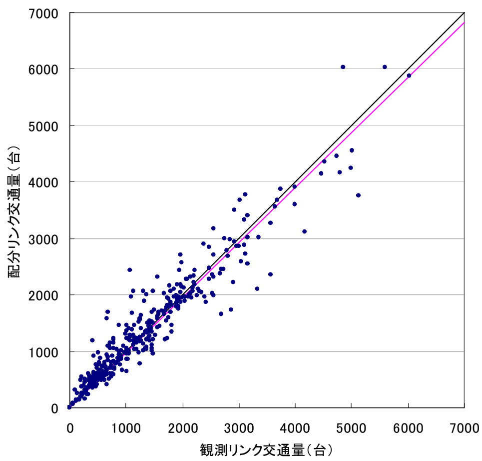

図 4-2　焼きなまし法による配分結果

前節で示したリンクパラメータによる金沢市道路ネットワークにおけるパラメータ θ の値は最急降下法を用いた場合 $\theta = 0.167$，焼きなまし法を用いた場合 $\theta = 0.166$ となり，僅かではあるが差が生じる結果となった．

表 4-1 より，焼きなまし法を用いた方が目的関数値は若干減少しているが，回帰係数や決定係数，相関係数にはほとんど影響しない程度の差であった．**図 4-2** のような配分結果を比較してみてもほとんど差がみられない結果となった．しかし，これらの結果から焼きなまし法を用いた場合の方が正確によい最適解を導くことができるのではないかと考えられる．また，最急降下法と比較して目的関数値がよりよい方向へ変化しているということは，最急降下法による最適化計算の過程で局所解に陥り，同条件で焼きなまし法を適用した場合ではゆらぎの効果により局所解からの脱出に成功し，より最適解へ近づいたのではないかと予想できる．

5.　同時推定法の構築と提案

(1)　本研究における MPEC の問題点

前章では 3 章で定式化した MPEC（(3.8)，(3.9)式）を，最急降下法と焼きなまし法を用いてそれぞれ計算し，そ

の結果の比較を行った．しかし，この MPEC はただ 1 つのパラメータθにのみ依るものであり，目的関数が複数の極値を持っていないという可能性が考えられる．また，この MPEC では均衡制約条件式（(3.9)式）

$$\mathbf{m} = \mathbf{g}(\mathbf{m}) \tag{5.1}$$

を満たすような平均経路交通量ベクトル$\mathbf{m}$を収束計算によって算出した上で，目的関数式（(3.8)式）

$$L(\boldsymbol{\theta}|\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{m}) \tag{5.2}$$

を最大化させるという計算手順を踏んでいるため，計算に非常に時間がかかってしまうという欠点もある．ここで，均衡制約条件式を満たす平均経路交通量ベクトル$\mathbf{m}$を算出するとは，均衡制約条件式（(5.1)式）における左辺と右辺の差のユークリッドノルム，すなわち

$$\|\mathbf{m} - \mathbf{g}(\mathbf{m})\| \tag{5.3}$$

が任意で定められた基準値よりも小さくなるように繰り返し計算を行うということである．

(2) 既存の同時推定法

前節で述べた問題点に対し，Connors[4]らは，先に均衡制約条件を満たす平均経路交通量ベクトル$\mathbf{m}$を算出するのではなく，均衡制約条件に新たなパラメータを掛け合わせて，目的関数に組み込んで同時にパラメータを推定する手法を提案している．Conners らは，目的関数をZ，均衡制約条件をV，パラメータベクトルを$\boldsymbol{\theta}$として，以下に示すように目的関数と均衡制約条件を組み合わせている．

$$\max \quad Z(\boldsymbol{\theta}) - \eta\|\boldsymbol{\theta} - V(\boldsymbol{\theta})\| \tag{5.4}$$

ここでηは単調に増加するパラメータであり，Connors らはこのパラメータηをユークリッドノルム$\|\boldsymbol{\theta} - V(\boldsymbol{\theta})\|$に掛け合わせることによって均衡制約条件を考慮した，ηと$\boldsymbol{\theta}$の同時推定法の構築を行っている．また，ユークリッドノルム$\|\boldsymbol{\theta} - V(\boldsymbol{\theta})\|$の値が発散しないよう，単調に減少するパラメータ$\mu$を設定し，$\|\boldsymbol{\theta} - V(\boldsymbol{\theta})\|$の値が変数$\mu$よりも小さくなるようにあらかじめ数回の反復計算を行った後にパラメータ推定計算を行うという工夫もしている．すなわち，

$$\|\boldsymbol{\theta} - V(\boldsymbol{\theta})\| < \mu \tag{5.5}$$

を満たす場合のみ，最適化計算を続行するというものである．その際，Connors らはμの初期値を 1，10，50 の 3 通り，最終的な値を 0.005 として計算回数に応じて減少させることによって複数回の試行を行い，μの値の設定による計算結果の変化について考察を行っている．

(3) 本研究における同時推定式の構築

以上のような同時推定法では繰り返し計算初期の段階では必ずしも均衡制約条件を満たすようなパラメータベクトル$\boldsymbol{\theta}$を算出してはいないが，繰り返し計算を行っていくうちにいずれは本研究において定式化された MPEC（(3.8)，(3.9)式）を解いた場合の結果に近い推定結果を算出することができると考えられる．ただし厳密には推定されたパラメータベクトル$\boldsymbol{\theta}$が均衡制約条件を完全に満たしているとは限らないという可能性があり，これはこの同時推計法の問題点でもある．

これまでの議論を踏まえ，本研究で取り上げている交通ネットワーク均衡モデルを、パラメータ同時推定法を用いて定式化すると

$$\max_{\boldsymbol{\theta},\eta} \quad L(\boldsymbol{\theta}|\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{m}) - \eta\|\mathbf{m} - \mathbf{g}(\mathbf{m}|\boldsymbol{\theta})\| \tag{5.6}$$

と表すことができる．ここでηは任意定数，$\|\cdot\|$はユークリッドノルムである．新たにパラメータηを導入したため，(5.6)式には$\boldsymbol{\theta}$とηの複数のパラメータが存在することになる．このような複数のパラメータに依る関数の最適化問題を解く際には，本研究において構築された，焼きなまし法を応用した最適化手法が有効なのではないかと考えられる．その計算例は講演時に示すこととする．

6. 結論

本研究では焼きなまし法を応用した最適化手法の構築を行い，最尤推定法を用いた交通均衡配分モデルのパラメータ推定に適用して金沢市道路ネットワークにおけるロジットパラメータを計算した．

本研究で構築した最適化手法の有意性について，4 章で示した金沢市道路ネットワークへの適用結果から従来法である最急降下法よりもある程度よい最適化計算を行うことが可能であると考えられる．

ただし現在の最適化計算では計算に多くの時間がかかってしまい，また焼きなまし法の特徴をあまり生かせていないという問題点がある．この問題点を解消すべく，現在は計算時間の短縮と焼きなまし法を応用した最適化手法の特性をさらに発揮することを目的としたパラメータの同時推定法を構築し，その計算を行っている最中である．講演時によい成果を報告できるよう努力する次第である．

参考文献

1) 中山晶一朗，高山純一:「リンク交通量を用いた交通ネットワーク均衡モデルのパラメータ推定:リンク間相関を考慮した最尤法」土木学会論文集 D, Vol.62, No.4, pp.548-557, 2006.

2) 浅藤吉明，中山晶一朗，高山純一:「最尤推定法による交通均衡配分モデルのパラメータ推計法」平成 18 年度土木学会中部支部研究発表会講演概要集, pp.339-340, 2007.

3) Szu,H. and Hartley,R. : 「Fast simulated annealing」Physics Letters A, Vol. 122, pp. 167-162, 1987.

4) Connors,R., Smith,M.J. and Watling,D. : 「Bilevel Optimisation of Prices in Network Equilibrium Models」Mathematics in Transport, ELSEVIER LIMTED, pp.27-43, 2007.