プロダクション規則と
局所評価関数による最適化の方法と
その計算過程におけるマクロなふるまい

新情報処理開発機構

金田　泰

目次

- ■ はじめに
- ■ 計算モデル CCM
- ■ CCM にもとづく最適化の例 — TSP (巡回セールスマン問題)
- ■ TSP に関する実験とその結果の評価
- ■ 交叉の問題に関する考察
- ■ CCM による計算のマクロ・モデル — マルコフ連鎖モデル
- ■ 結論

はじめに

- 計算モデル CCM (化学的キャスティング・モデル) を提案している．
  - 現実世界の問題をとくための自己組織的計算をめざす．
  - プロダクション・システムにもとづくモデル．
  - 局所秩序度 (一種の評価関数) を導入．
  - 非決定的 (確率的) な計算制御法を導入．
- CCM の計算過程のマクロ・モデルを研究している．
  - 複雑で大局的解釈・制御が困難な計算をマクロにみる．
  - 計算過程を確率過程として (マクロに) みる．
- TSP への CCM とマクロ・モデルの適用法・結果をしめす．
  - 最適化や制約充足は CCM が本来めざす計算ではないが，そこへの第 1 歩．
  - 彩色，*N* クウィーンなどの制約充足問題も実験した．

目次

- はじめに
- 計算モデル CCM
- CCM にもとづく最適化の例 — TSP
- TSP に関する実験とその結果の評価
- 交叉の問題に関する考察
- CCM による計算のマクロ・モデル — マルコフ連鎖モデル
- 結論

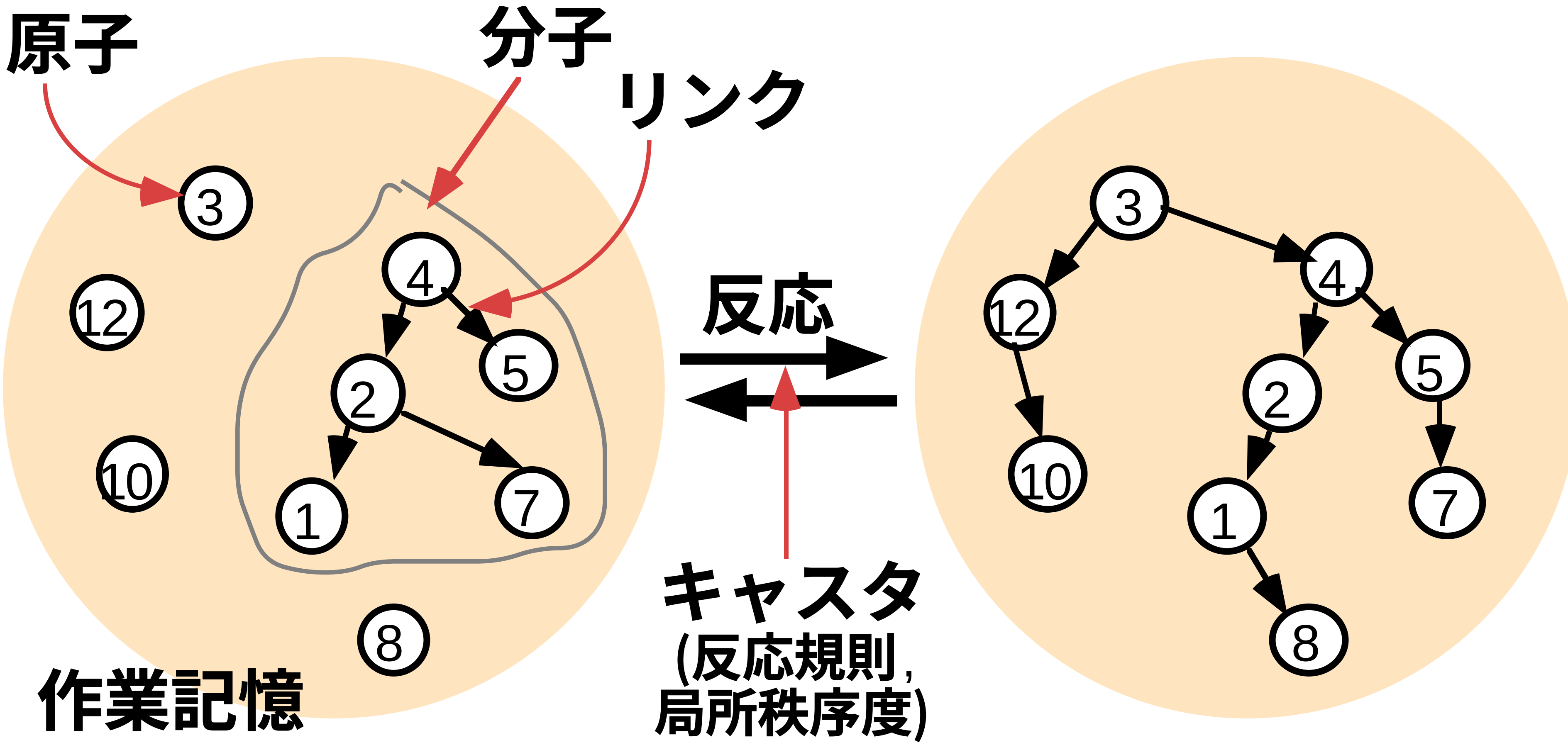
計算モデル CCM

- 自己組織的計算のための計算モデルを考案した．
  - 「自己組織」の意味などについては他の発表を参照．
  - 散逸構造理論，シナジェティクスなどから影響をうけた．
- このモデルを化学的キャスティング・モデル (Chemical Casting Model) とよぶ．
  - “キャスティング” は “プログラミング” や “計算” にかわることば．
  - 以前は CPM または MCP (化学的プログラミング・モデル) とよんでいた．
- CCM では計算を秩序化 (“自己組織化”) とみなす．
  - 局所的情報にもとづく計算によって大域的な “秩序的構造” をつくることをめざす．

CCM におけるシステムの構成要素

- 作業記憶 — オブジェクトのあつまり
- オブジェクト (作業記憶要素, WME)
  - 原子：データの単位．原子は内部状態をもつ．
  - 分子：原子がリンクによって結合されたもの．
    - リンク：原子を結合するもの．
      向きがあり，ラベルがつく点が化学結合とことなる．
- キャスタ (プログラム)
  - 局所秩序度：局所的な評価関数 (秩序化の程度をあらわす).
  - 反応規則：系の局所的な変化のしかたをきめる規則
    (前向き推論によるプロダクション規則).
    - 化学反応式に相当し，双方向に動作しうる．
    - 反応順序は非決定的 — 複数の反応がおこりうるとき．
  - 局所秩序度 (の和) が増加する時だけ規則が適用される．

CCM の図説



■ CCM は，局所的な情報だけにもとづいて，非決定的に反応規則を反復適用して，大域的な “秩序” (目的状態 ?) を実現することをめざすモデルである．

目次

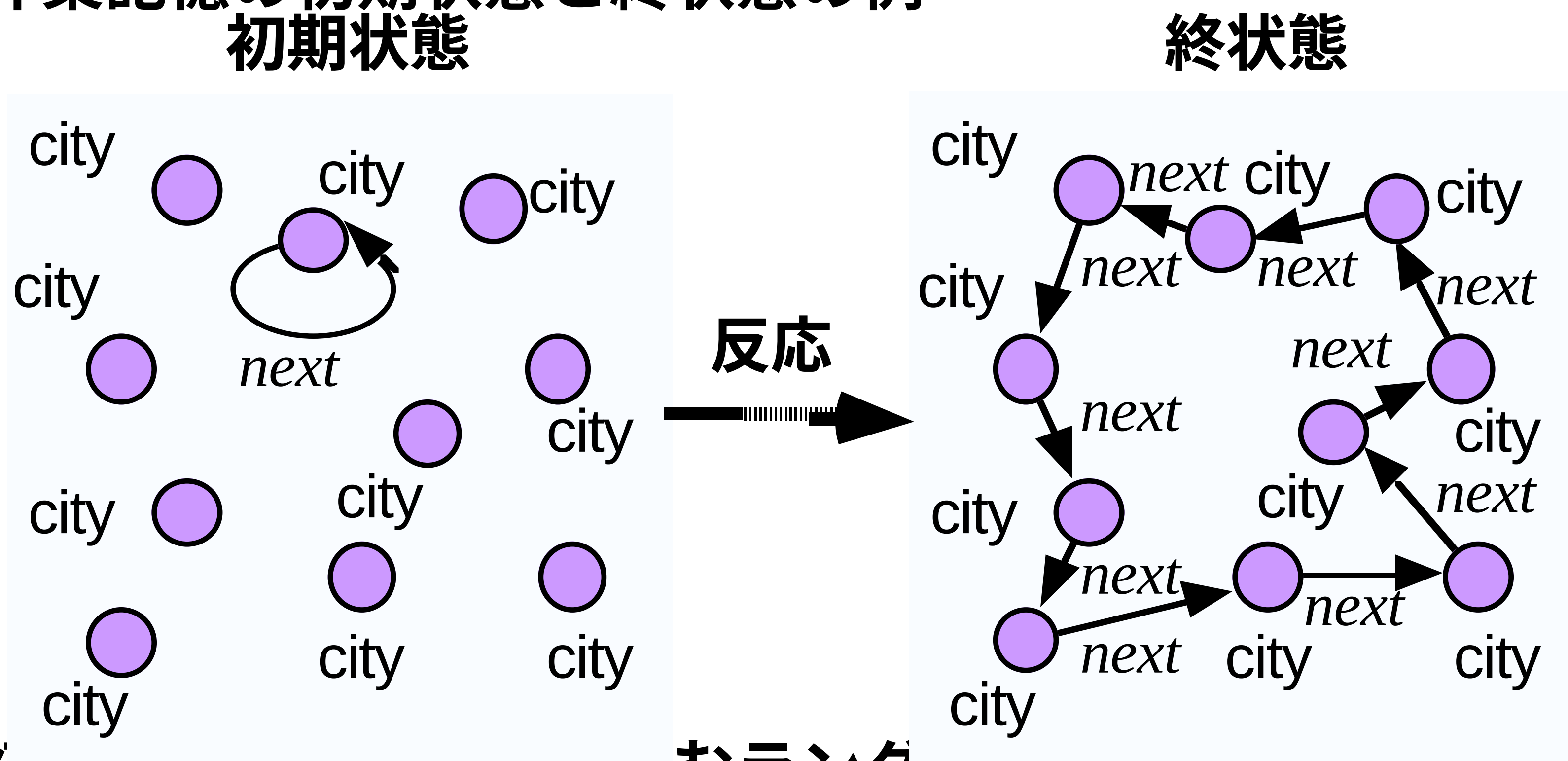
- はじめに
- 計算モデル CCM
- CCM にもとづく最適化の例 — TSP
- TSP に関する実験とその結果の評価
- 交叉の問題に関する考察
- CCM による計算のマクロ・モデル — マルコフ連鎖モデル
- 結論

CCM の最適化への適用 — その目標

- ■ アルゴリズムを記述せずに最適化する.
- ■ できるだけ単純かつ汎用的な “プログラム” によって最適化する.
  - ◆ きちんと仕様をかくこともやめたい.
- ■ ロバストな最適化.
- ■ ニューラル・ネットや遺伝的アルゴリズムによる最適化と同様の方向をめざす.

CCM による巡回セールスマン問題 (TSP)

- 2 次元ユークリッド空間上の TSP をとく．
- 各都市は座標 (*x*, *y*) とつぎの都市へのリンクをもつ．
- 作業記憶の初期状態と終状態の例



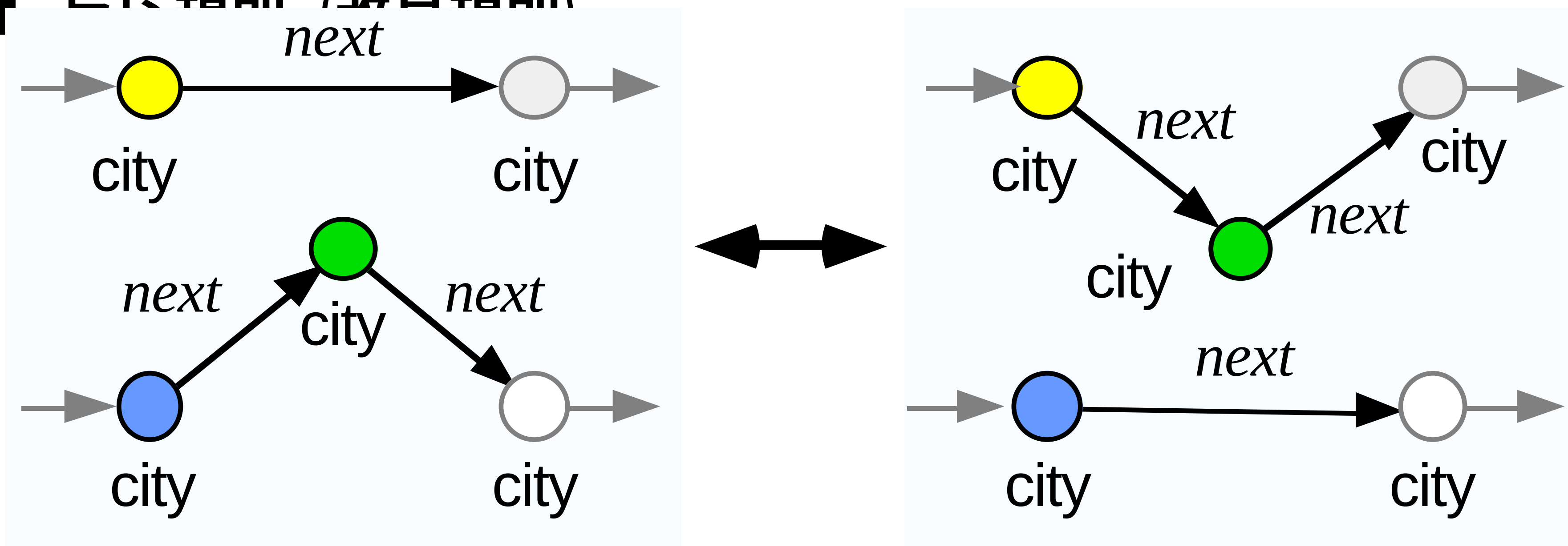
- 初期状態で全都市をふくむランダムな巡路をとってもよい．

TSP ソルバ

- 巡回セールスマン問題をとく，CCM にもとづくシステムを TSP ソルバとよぶ．
- TSP ソルバはつぎの要素からなりたつ．
  - 作業記憶とオブジェクト
    - 「都市」のデータ型宣言が必要だが，ここでは省略．
    - 作業記憶の初期設定が必要．
  - 反応規則の宣言
    - ランダム巡路のばあいは 1 個だけ (改良規則)．
    - 1 都市だけからなる巡路のばあいは 2 個 (挿入 + 改良)．
  - 局所秩序度の宣言
    - 1 個だけ — 「都市」の自己秩序度．

TSP の反応規則と局所秩序度

- 反応規則 (改良規則)



- **都市の局所秩序度 ＝ – つぎの都市までの距離**

$$o_{city}(c) = -\,sqrt((c.x - c.next.x)^2 + (c.y - c.next.y)^2) \quad \textbf{when } c.next \neq \text{nil}$$

$$-\infty \quad \textbf{when } c.next = \text{nil}$$

TSP ソルバの動作

- 定義： 大域秩序度 (総秩序度)
  - 作業記憶全体にわたる局所秩序度の和．
  - TSP ソルバのばあいは巡路長に負号をつけたもの．
- 個々の反応は，それに関与する都市の距離の和をちぢめる．
  - 規則にマッチする原子の局所秩序度の和が増加するときだけ規則が適用されるため．
- したがって，TSP ソルバは巡路をちぢめる方向に動作する．
  - TSP ソルバにおいては反応により大域秩序度が減少することはない (協調的動作)．
  - 他のシステムにおいては反応により大域秩序度が減少するばあいもある (競合的動作)．
- TSP ソルバによって近似解をもとめることができる．

TSP ソルバの動作の柔軟性

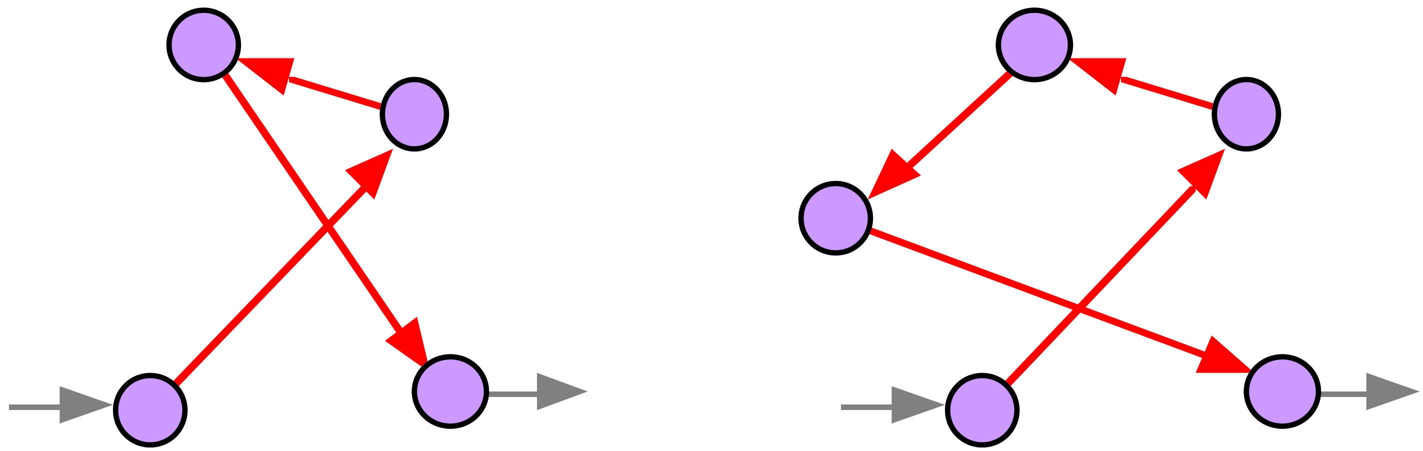
- TSP ソルバには，つぎのような動作の柔軟性がある．
  - 動作が漸進的 — 一時停止後，再動作しうる．
    - 外部から都市が追加されたとき．
    - 外部から既存の都市の座標が変更されたとき．
  - 動作が可逆
    - 都市の座標変更によって逆方向に動作することがある．
    - 可逆性は規則の対称性と関係している
      (対称ならば可逆)．
- CCM にもとづくシステムには柔軟性をもたせやすい．
- 柔軟性がロバスト性につながる (?)

TSP ソルバの問題点

■ おおくのばあい巡路の交叉が除去できない．

◆ 除去可能な交叉

◆ 除去不能な交叉

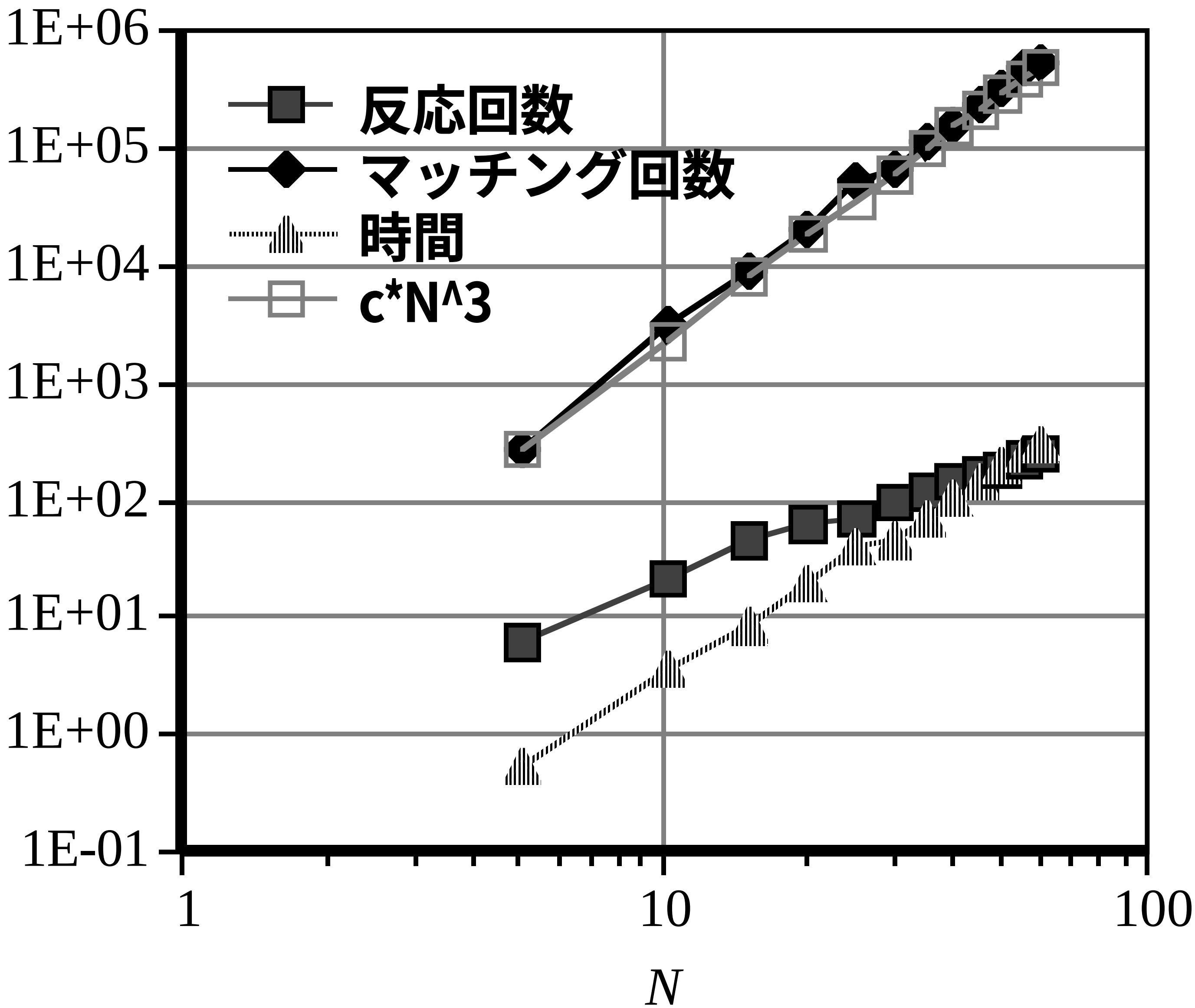


目次

TSP ソルバに関する実験 — その方法

- ■ 問題の規模など
  - ◆ ランダムな座標をもつ 5 〜 60 個の都市を正方形の領域に配置した．
- ■ ランダム・スケジュリング戦略を採用
  - ◆ 反応順序の決定において，都市はランダムに選択する．
- ■ 処理系
  - ◆ CCM にもとづく計算言語 SOOC-92 (Self-Organization-Oriented Computing) によって記述し，その処理系で実行させた．
  - ◆ 測定は SUN4 上でおこなった (SOOC-92 は Kyoto Common Lisp によって記述されている)．

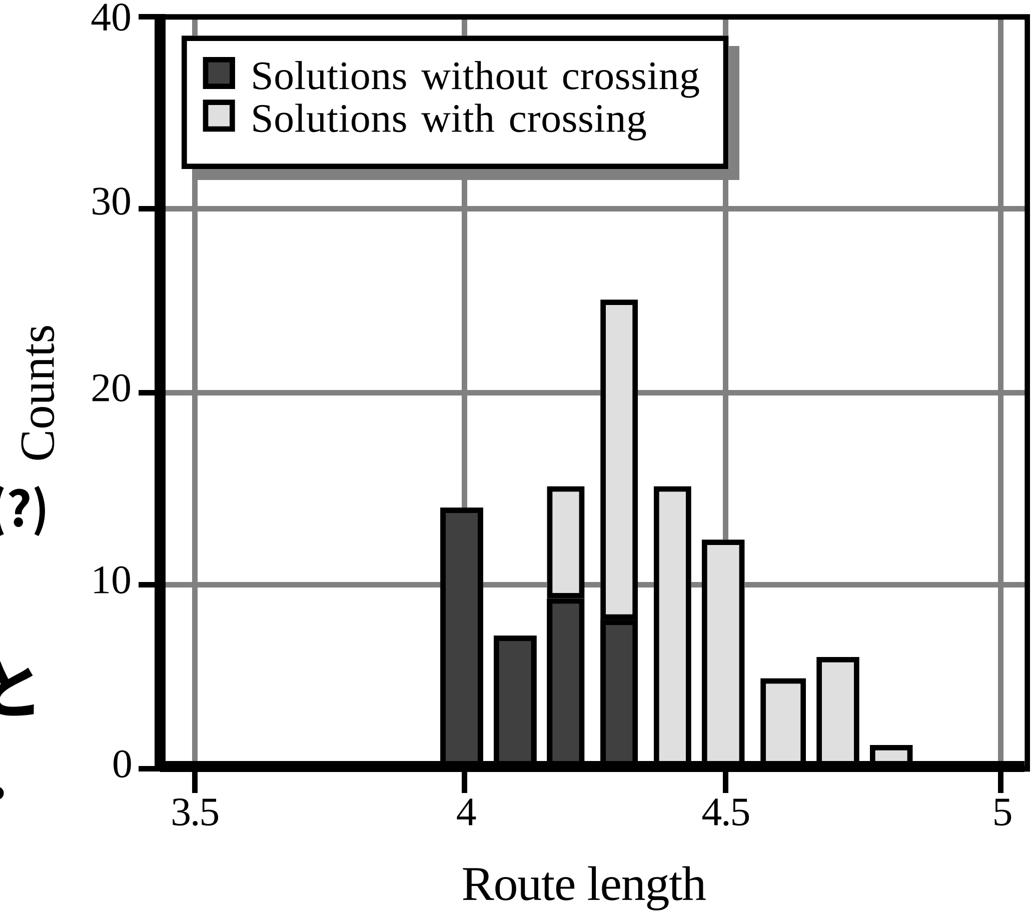
計算時間の評価



- 計算時間はほぼ O(N^3) (マッチング回数に比例)

解の質の評価

- 10 都市と 20 都市の例題について 100 回の計算をおこない，巡路長の分布をしらべた．
- 10 都市の例題
  - 97 回は最適解．
  - 3 回も最適にちかい．
  - よい結果がえられたのは問題が容易だから (?)
- 20 都市の例題 (右図)
  - 交叉が除去できないことが解の質を低下させる．
  - TSP ソルバは都市数がおおいと質のよい解をあたえないと結論される．



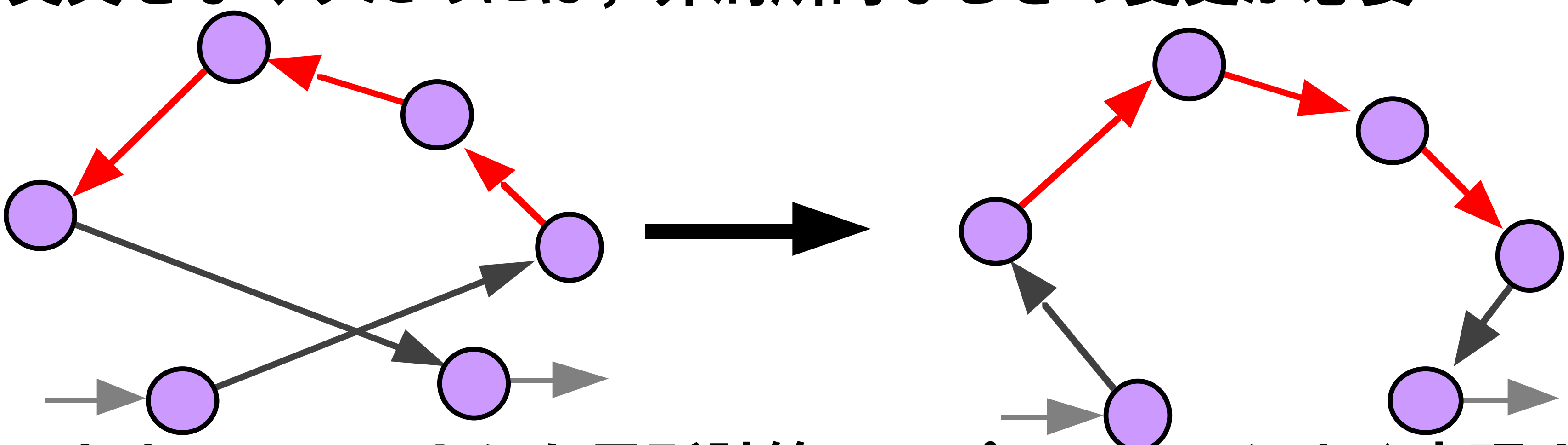
目次

- はじめに
- 計算モデル CCM
- CCM にもとづく最適化の例 — TSP
- TSP に関する実験とその結果の評価
- 交叉の問題に関する考察
- CCM による計算のマクロ・モデル — マルコフ連鎖モデル
- 結論

交叉の除去 1

データ表現にむきがあるばあい

- 前述のキャスタでは巡路にむきがあった．
  - 都市をつなぐリンクにむきがあるため．
- 交叉をなくすためには，非局所的なむきの変更が必要．

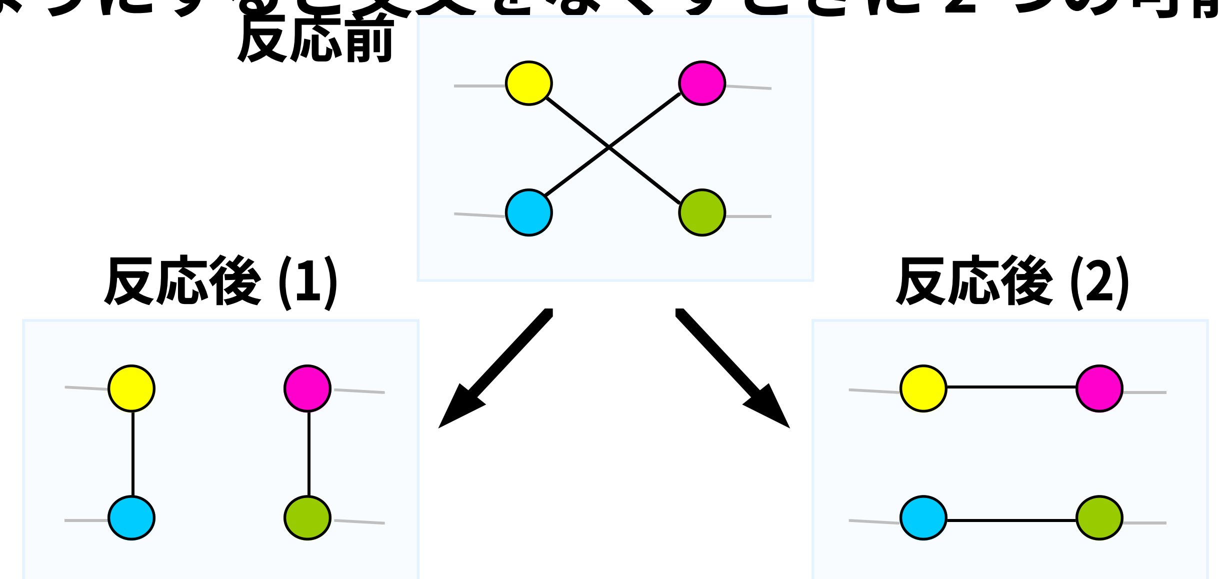


- これを CCM のような局所計算のアプローチでうまく実現するのはむずかしい．

交叉の除去 2

データ表現にむきがないばあい

- むきのないリンクか双方向のリンクを使用すれば，むきをなくすことができる．
- このようにすると交叉をなくすときに 2 つの可能性が生じる．



- これらのうちの一方は巡路を 2 つに分裂させてしまう．
- どちらがただしいかは，局所的な情報だけではわからない．

交叉の除去と大域的制約の保持

- CCM では一般に自由な操作と大域的な制約の維持は両立困難
  - TSP では巡路にむきをつけても，つけなくても，うまく交叉をなくせない．
  - TSP では一般に，全都市を巡路にふくむという大域的な制約をみたしつつ巡路に自由な局所的操作をするのは困難．
  - TSP 以外でもおこりうる．
- この問題点は CCM 以外の非手続き的方法によって大域的な制約をもつ問題をとくときにも生じやすい．
  - たとえばニューラル・ネットや遺伝的アルゴリズムにおいて．
- CCM における解決策はみつかっていない．
  - 大域的な情報を参照する以外は．

目次

- はじめに
- 計算モデル CCM
- CCM にもとづく最適化の例 — TSP
- TSP に関する実験とその結果の評価
- 交叉の問題に関する考察
- CCM による計算のマクロ・モデル — マルコフ連鎖モデル
- 結論

計算過程のマクロ・モデルの必要性

■ 複雑な計算過程をマクロなふるまいを説明するためのモデルを研究している．

■ 計算過程のマクロなモデルを研究するひとつの目的：計算の自動制御の実現．

- ◆ バグ，ノイズなどの撹乱につよい，安定な計算システムの構築．

■ 確率過程としての計算過程のマクロ・モデルは情報処理学会プログラミング研究会 (93.3.11) で発表予定．

CCM のマルコフ連鎖モデル

CCM にもとづく計算のためのマクロ・モデル

- 大域秩序度が離散値をとると仮定する．
- 大域秩序度がことなる状態間の遷移をマルコフ連鎖でモデル化する．
- マルコフ性がなりたつことを仮定する．
  - 時刻 t における確率ベクトル (確率分布) を $\boldsymbol{p}_t$ とする．
  - $\boldsymbol{p}_t$ と $\boldsymbol{p}_{t+1}$ とのあいだにつぎのような関係がなりたつ．

    $$\boldsymbol{p}_{t+1} = T\,\boldsymbol{p}_t$$

  - 遷移行列 T の値は時刻にはよらない．
- マルコフ連鎖モデルにもとづいて，N クウィーン問題などの計算過程を解析した．

マルコフ連鎖モデルのあてはめ 1

- 前述のモデルは TSP には適用できない．なぜなら，TSP では
  - 大域秩序度が連続値をとる．
  - 大域秩序度の最大値，最小値はあらかじめわからない．
- TSP に適用するためにかんがえられる方法．
  - 連続状態のマルコフ連鎖にあてはめる．
  - 大域秩序度を離散化して離散状態のマルコフ連鎖にあてはめる．

マルコフ連鎖モデルのあてはめ 2

- 離散化する方法をとった．
  - その理由は，計算のためには，いずれにしても離散化が必要だから．
- 離散化の方法
  - 特定の問題をとく計算をくりかえしおこない，大域秩序度を実測する．
  - 計算でえられた解の大域秩序度の最大値，最小値をモデルにおけるそれらの推定値とする．
  - 最大値から最小値までの範囲を適当にくぎり，各範囲をひとつのマクロな状態とみなす．

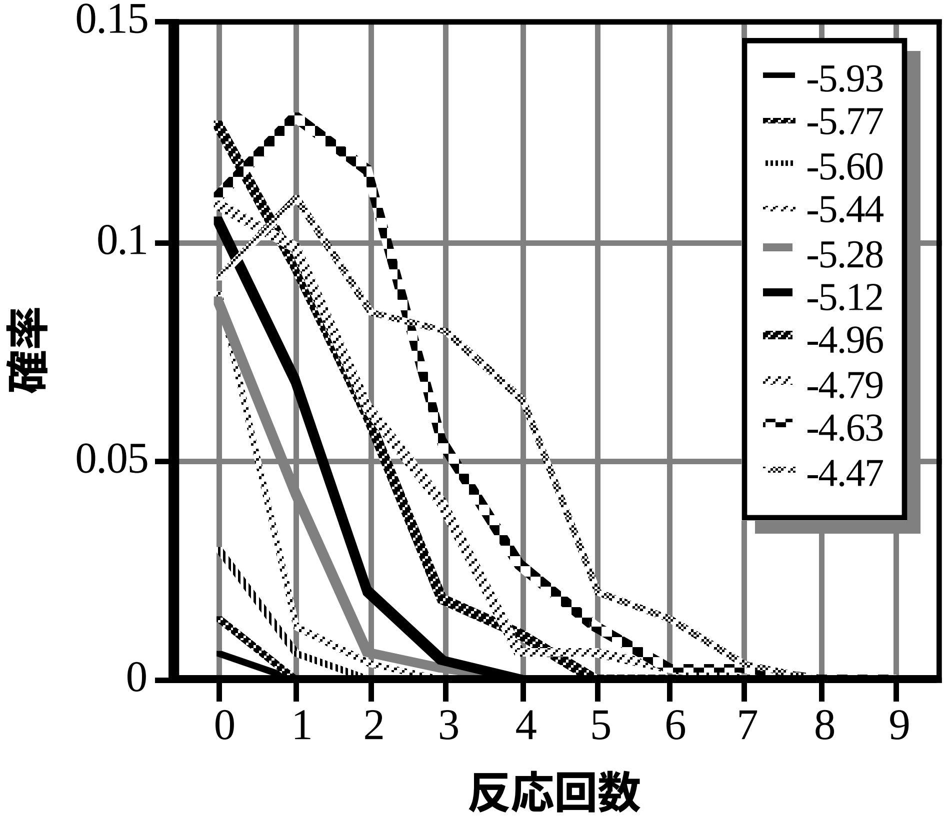
遷移行列と確率ベクトルの推定例

- マクロ状態の決定
  - 500 回の実測における最大値 –2.59 から最小値 –5.93 までのあいだを 20 分割した．
- 遷移行列 T の推定法
  - 推定には大域秩序度時系列の実測値を使用した．
  - T の要素は各マクロ状態間の遷移頻度から最尤推定した．
- 確率ベクトル $\boldsymbol{p}_t$ の推定法
  - $\boldsymbol{p}_0$ は実測値を使用した (理論的に推定したほうがよいが)．
  - $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots$ は $\boldsymbol{p}_0$ と T をつかって推定した．
- 測定条件
  - 10 都市の TSP を使用した．
  - 初期状態はランダムに生成した．

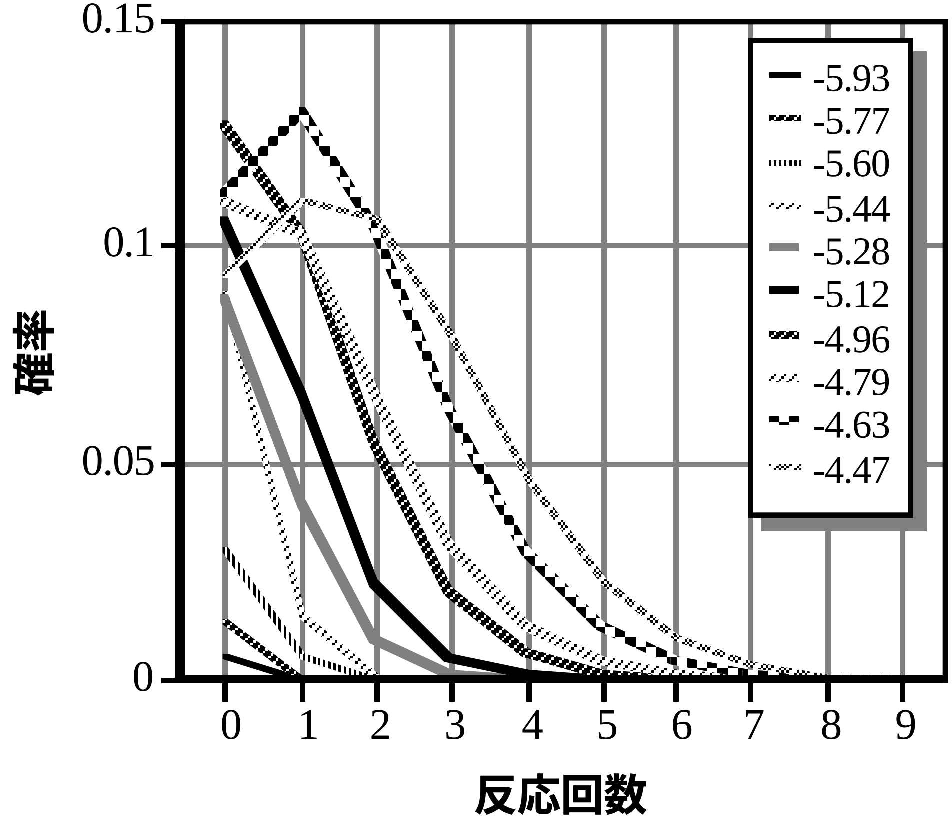
直接推定値とマルコフ連鎖モデルの推定値との比較 1

大域秩序度のひくい 10 状態における p_t

測定データからの直接推定値



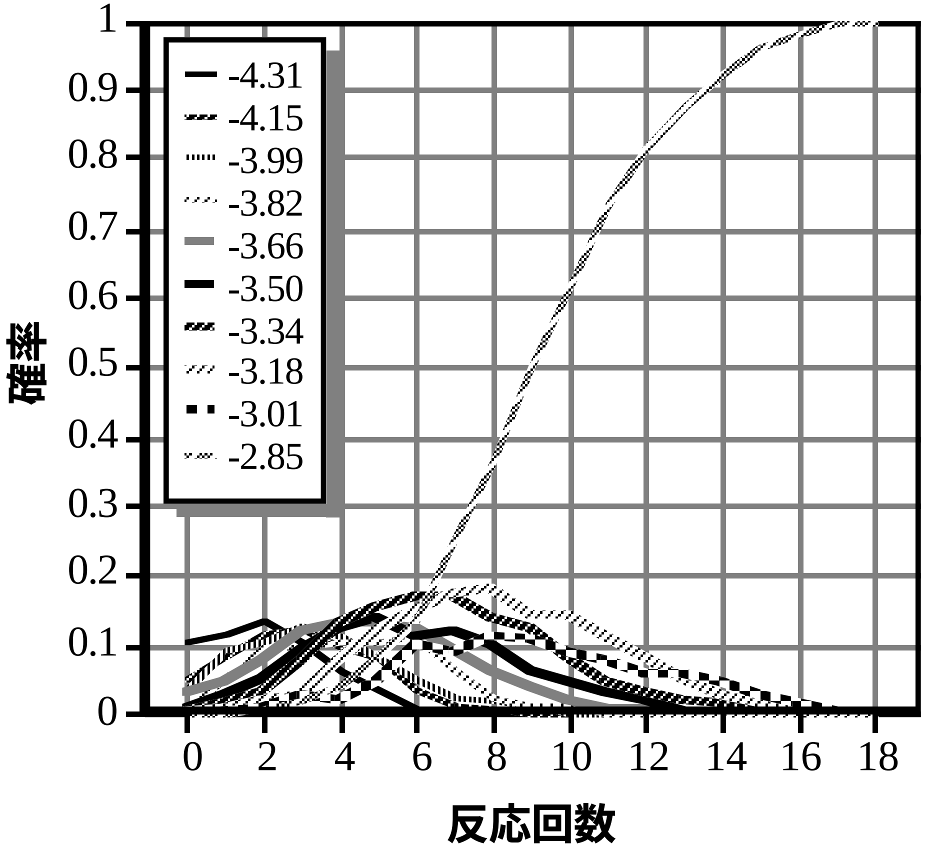
マルコフ連鎖モデルからの推定値 (モデル推定に測定データを使用)



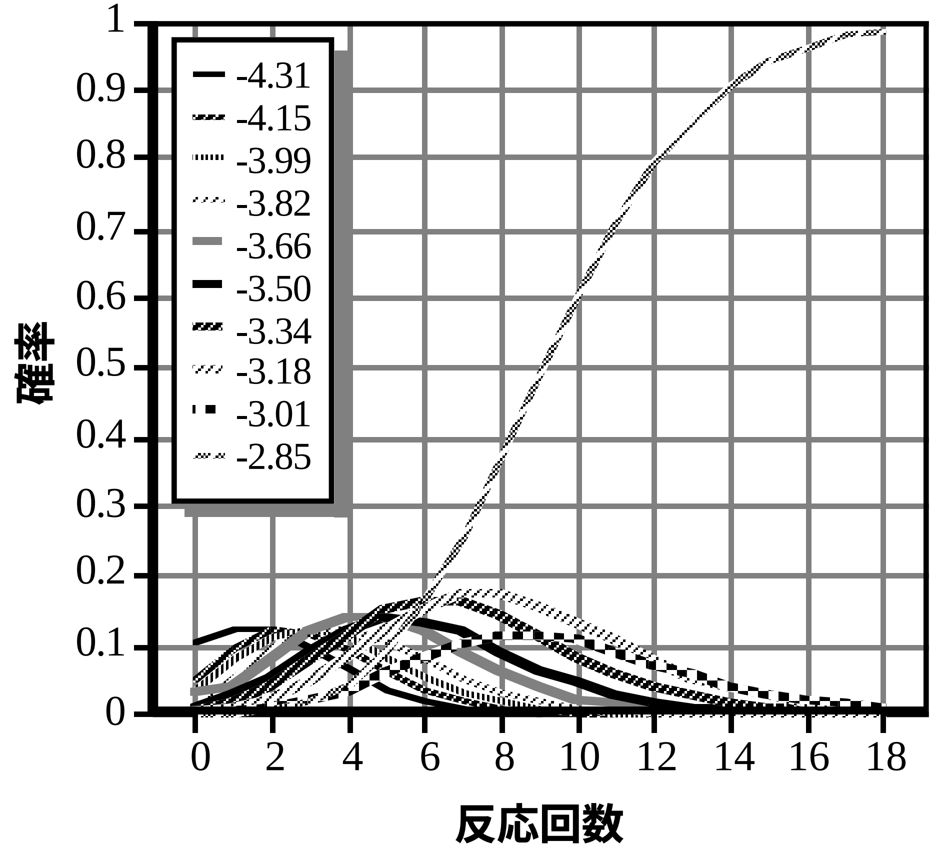
直接推定値とマルコフ連鎖モデルの推定値との比較 2

大域秩序度のたかい 10 状態における p_t

測定データからの直接推定値



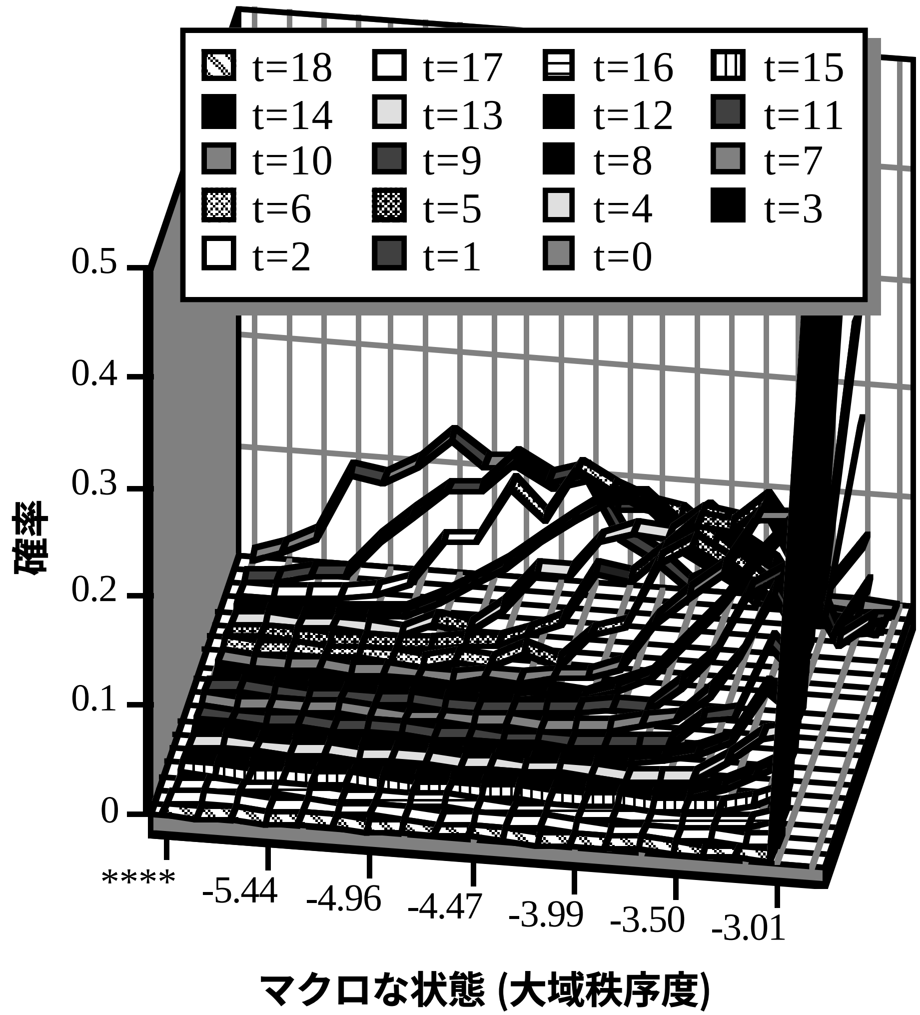
マルコフ連鎖モデルからの推定値 (モデル推定に測定データを使用)



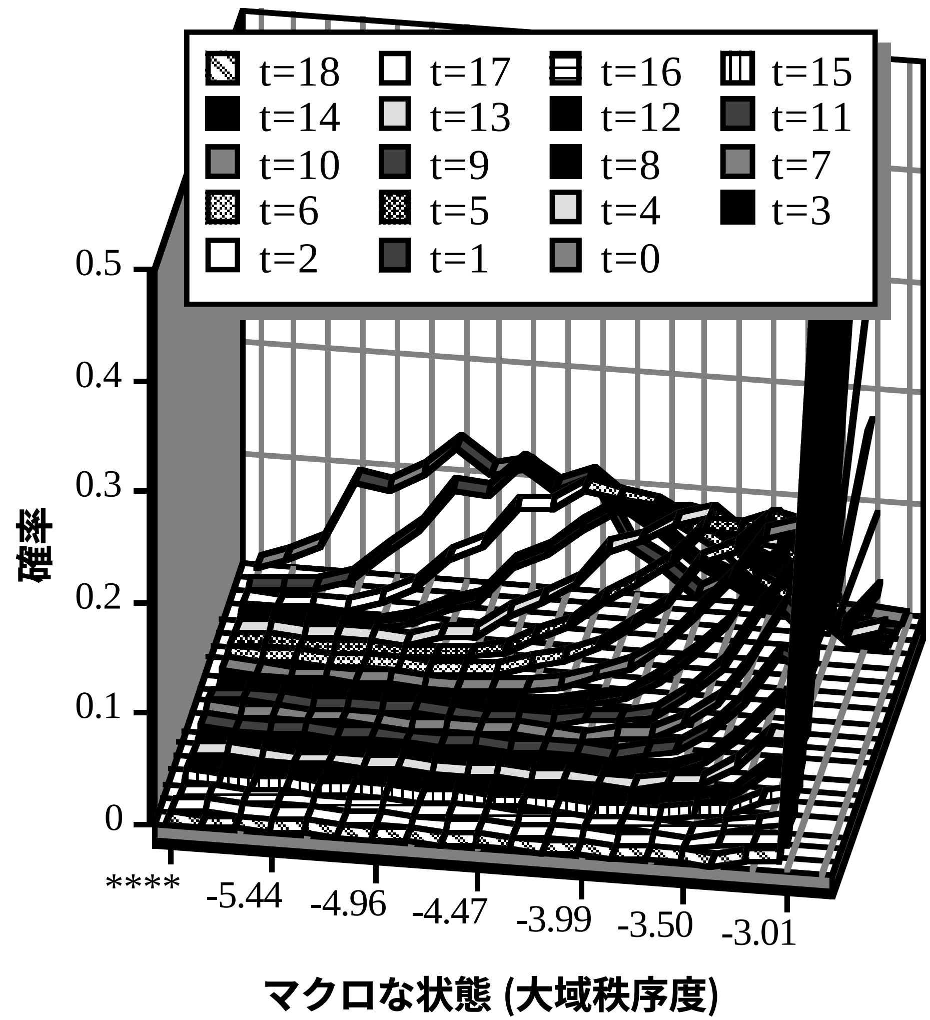
直接推定値とマルコフ連鎖モデルの推定値との比較 3

3 次元表示

測定データからの直接推定値



マルコフ連鎖モデルからの推定値 (モデル推定に測定データを使用)



結論

- TSP を例として，CCM による最適化についてのべた．
- CCM にもとづく単純な “プログラム” によって近似解をもとめることができた．
- CCM にもとづく TSP の計算過程は，マルコフ連鎖によって近似することができる．
- TSP の巡路の交叉が除去できず，解の質が低下するという問題点がある．

今後の課題

- 大域的な制約をみたしつつ十分な最適化ができる方法をみいだすこと．
- 開放系の問題にとりくむこと
  - これまでに CCM を適用してきた問題は閉鎖系の問題．
    - 制約充足問題と最適化問題．
  - CCM によってとくことをめざしていたのは開放系の問題．
    - 具体的な問題は未定．
    - 「最適化」のわくをひろげるのが一案．