

多項式時間仮説推論を達成する ネットワーク化バブル伝播アルゴリズム

大沢 幸生 石塚 満
東京大学生産技術研究所
〒106東京都港区六本木7-22-1

あらまし 仮説推論は、不完全な知識を仮説として扱う非単調推論系の一つで、診断や設計問題に適用できる今後の知識処理の有効な枠組みである。しかし、低い推論速度が最大の課題で計算複雑度がNP完全又はNP困難となるため、厳密な解法では指数オーダーの計算時間が避けられない。これに対し、我々は仮説推論を0-1整数計画法に帰着し、高速近似解法である掃き出し補数法により準最適解を求める方法を示したが、この方法は知識処理の観点からみると推論ネットワーク構造の上での推論と対応が取りにくい面があった。本稿では、この方法をネットワークとして構成し、その動的変化と対応付けることによって得た新しいアルゴリズムを示し、これによりさらに高速な仮説推論手法を提案する。

和文キーワード 多項式時間仮説推論, 0-1整数計画法, ネットワーク化バブル伝播アルゴリズム

Networked Bubble Propagation Algorithm for Polynomial-time Hypothetical Reasoning

Yukio OHSAWA and Mitsuru ISHIZUKA
Institute of Industrial Science, University of Tokyo
7-22-1 Roppongi, Minato-ku, Tokyo 106

Abstract A hypothetical reasoning is a useful framework for diagnosis or design problem. However, its slow inference speed is the most fatal problem for its practice use. That is, due to its non-monotonic inference nature it takes exponential inference time against the number of possible hypotheses. In order to overcome this problem, we have proposed to take advantage of a pivot and complement method, which is a polynomial-time searching algorithm for 0-1 integer programming. However, from the standpoint of the knowledge processing, a method running in the knowledge processing domain is preferable. In this paper, we reformalize the pivot and complement method using a new type of network. By showing an algorithm based on a physical propagation dynamics, we propose an even faster reasoning method.

英文 key words polynomial-time hypothetical reasoning, 0-1 programming, networked bubble propagation algorithm

1.はじめに

完全な知識に加えて矛盾の可能性を有する不完全な知識を含むことを許容し、これを操作する推論系を与えることは、知識ベースの能力拡大を行う上で重要な意義を有する。仮説推論は、不完全な知識を仮説として扱う非単調推論系の一つで、診断や設計問題に適用できる、実用性においても重要な枠組みである。しかし、仮説推論の最大の課題はNP完全又はNP困難という性質による低い推論速度である。ここでは、要素仮説に重みを付し、与えられたゴールを証明するために必要な要素仮説の重みの和（線形コスト）最小になるような解仮説を求めるタイプの、咲いて機械計算の仮説推論について考える。このような仮説推論は実用上も重要で、求められる故障診断の場合は最も可能性が高い故障、設計問題の場合は与えられた仕様を充たす最もコストが低い設計などに対応する。

このタイプの仮説推論も含めて、仮説推論の計算複雑度はNP完全、あるいはNP困難となることから、厳密な最適解を求める手法を使う限りは指数オーダの計算時間となることは避けられない。

これに対し、我々は仮説推論を0-1整数計画法に帰着し、近似解法である掃き出し補数法⁹⁾を用いることによって多項式時間で準最適解を求める方法を示した⁹⁾。この方法は知識処理の観点からみると、推論ネットワーク構造の上での推論と対応が取りにくく、知識処理向きの機能の導入が難しい面があった。

ここでは、この方法を新しいネットワークとして再構成し、その動的変化と対応付けることによって得られるアルゴリズムを示す。そして、これによりさらに高速な仮説推論手法を提案する。

2.仮説推論とそのネットワーク構造

紙面の都合から仮説推論の説明は他^{1,2)}にゆずることとし、詳細は記述しない。ここでは、視覚による平易な理解を促し、以下の議論との対応を容易にすることを目的としてこの知識ベースの木構造を示すにとどめる。

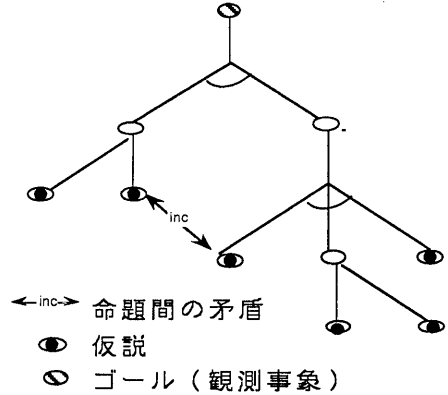


図1.仮説推論の木構造

簡単に枠組みを要約すると、図1で、葉ノードとして仮説を与え、最上段のゴール節を真とする仮説の組み合わせを求める問題がここでの議論の対象である。ここで、incで示された仮説は同時に解としてとることが出来ない。これだけのことだが、その計算複雑さはNP完全またはNP困難な問題に属する。

3.掃き出し補数法を用いた高速解法

あるNP完全問題を多項式時間で他のあるNP問題に帰着することが可能な場合、後者はNP完全問題である。これはNP完全の定義より明らかである。ここでは、仮説推論がNP完全問題として知られる0-1計画問題と互いに帰着可能であることを示す。

3.1.仮説推論から0-1計画問題への帰着

ここでは、与えられた仮説推論の問題を空間探索に置き換える変換の記述法について紹介する。まず、次のような論理積を右辺にもつホーン節で与えられるルールを考える。

$$Y \leftarrow X_1 \wedge X_2 \wedge \dots \wedge X_{n-1} \wedge X_n \quad (1)$$

通常の論理式の場合は、xを命題Xの真理値などとおくと、この式は次の式と等価になることが知られている⁹⁾。

$$x_1 + x_2 + \dots + x_{n-1} + x_n - n + 1 \leq y \quad (2)$$

これに加えてさらに仮説推論の目的を考慮する

と、選ばれる仮説集合はゴールを演繹的に導出する必要があるのである。

右辺としてこの要請を付加できることは文献⁹⁾で既に指摘されているが、4節との対応のためにここで新たに(3)式によってこれを記述することにする。(両辺の係数を1/nと等しくした点に意義がある。4節参照)

$$\frac{x_1+x_2+\dots+x_{n-1}+x_n \cdot n+1}{n} \leq y \leq \frac{x_1+x_2+\dots+x_{n-1}+x_n}{n} \quad (3)$$

更に(4)式から(5)式への書き換え規則によって全体の推論系が多次元真理値空間探索に置き換えられる。

$$Y \leftarrow X_1 \vee X_2 \vee \dots \vee X_{n-1} \vee X_n \quad (4)$$

{ $Y \leftarrow X_1, Y \leftarrow X_2, \dots, Y \leftarrow X_n$ を一つの論理式にまとめたもの}

$$\frac{x_1+x_2+\dots+x_{n-1}+x_n}{n} \leq y \leq \frac{x_1+x_2+\dots+x_{n-1}+x_n+n-1}{n} \quad (5)$$

更に、XとYが矛盾する場合は、(3)で $y=0$ とすれば不等式が得られるので全てのルールはこれらの不等式によって記述できる。

以上のような記述によって最適解を求める仮説推論は、これらの不等式を満足する0-1真理値の変数集合が(6)式で表される評価関数を最小にする0-1整数計画問題に帰着される。

$$\text{cost} = c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_{n-1}x_{n-1} + c_nx_n \quad (6)$$

3.2. 多次元空間探索から仮説推論への帰着

枠組みとして互いに帰着可能であることを示すために、筆者の考案した証明を述べる。(従って、上記書き換え規則に必ずしも基づかない)以下は両問題が共にNP完全であることの証明でもある。まず、次の線形不等式を考える。

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_{n-1}x_{n-1} + a_nx_n \leq b \quad (7)$$

但し、 $a_i (i=1 \sim n)$ 、は整数である。

これを次の形に変形することができる。ここで、 Dummy_i は全て0に等しいとしてxと共にホーン節の前提部とし、結論部yにも0を代入するとAND(3)の左辺となる。(ANDの右辺は $y=0$ より成立し、しかも不等式境界との間に解はない)また、(7)不等式の向きを逆にするとORの右辺となる。また、(8)式後半は一つの等式を二つの不等式で記述することによって等価に書き換えられる。

$$\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^{a_i} x_j^i \right) + \sum_{l=1+\sum_{k=1}^n a_k}^b \text{Dummy}_l \leq y + b - 1$$

$$x_j^i = x_i^j \quad (1 \leq j \neq k \leq a_i, 1 \leq i \leq n) \quad (8)$$

この記述によって任意の整数計画問題を仮説推論に置き換えることができる。

従って、ここで次の知見が得られた。

- 1) 仮説推論はNP完全である。従って、近似的なアルゴリズムによる準最適解探索により多項式時間内に結果を出力する手法に重要な意義がある。
- 2) 見通しの良い多次元空間探索に基づく組み合わせ最適化の研究は近年盛んに行われている。これらの結果を仮説推論に応用することは高速解法を見いだす上で意義のある方針といえよう。

3.2. 整数線形計画法の高速解法

(掃き出し補数法)

文献⁵⁾は多項式オーダーの計算時間で仮説推論の準最適解を求める手法である。この方式は、上記の帰着関係から0-1整数線形計画法の高速解法として1980年に提案されていた掃き出し補数法を用いるものである。

前節の2)に述べた様に、NP完全に対して指数オーダーの時間の壁を破るには近似解法が必要となる。この掃き出し補数法では、多項式オーダー(n^4)の時間で最適に近い準最適解を高い確率で導くことに成功している⁴⁾。掃き出し補数法のメカニズムは複雑なのでアルゴリズムの詳細記述は割愛するが、図2のような概要で表される。基本的には実数最適解を多項式時間で求め、これを探索の初期点として多様体の縁伝いに掃き出しによってSEARCH PHASEを実行する。これに加えてSEARCH PHASEの後半とIMPROVEMENT PHASEにおいて整数の変数値の補数(0/1の反転)を3つまでとって改良を行う。

4. ネットワーク化バブル伝播法

上記の掃き出し補数法をネットワーク上で実現し、しかも計算時間が理論上掃き出し補数法を上回る手法がここで提案するネットワーク化バブル伝播法(NBP)である。基本的には掃き出し補数法の構造変数を推論ネットワークにおける命題ノードに、スラック変数をORまたはANDノードに対応させた上で、整数とは限らない実数真理値を

ネットワーク上で伝播させる。これにより、元のネットワークの形をそのまま用いて、その特性を利用した推論が可能となる。

本稿ではこのネットワーク構造の基本的な理論と、その特性を生かして高速仮説推論（多項式時間準最適解探索）を達成できることを述べる。

<NBPのメカニズム>

図3にNBPの基本的な概念を示す。黒く塗りつぶされたノードが式(3)などの不等式におけるスラック変数の境界値（等式成立）、又は0あるいは1の真理値をとる命題に対応するノードである。

NBPでは真理値スラック変数値を連続な実数の範囲で変化させることにより推論を行う。この操作は、ネットワーク上で「黒」を「白」と交換させることによって伝播させ、最終的には全ての円

の指数深さは3、ノード2の指数深さは6。

影響度 当該ノードの変域の上限又は下限（1または0）との現在の値との差を指数深さで割った比。あるノードの値の変化は影響度に比例した大きさで伝播する。

有向リンク 次の規則に従った操作を繰り返し全てのリンクの向きを決定する。

- 接する全てのリンクを外向きにする。
- 接する全てのリンクを内向きにする。
- 接する一つを内向きにし、これを除く全てのリンクを外向きにする。
- 接する一つを外向きにし、これを除く全てのリンクを内向きにする。

伝播パス 当該■ノードから有向リンクにそって至る全てのノードとその有向リンクの集合。

この中に、またこの中にのみ交換の相手となる白ノードが存在する。従って、これに含まれる白ノードにのみ影響度を与え、その最小のものを

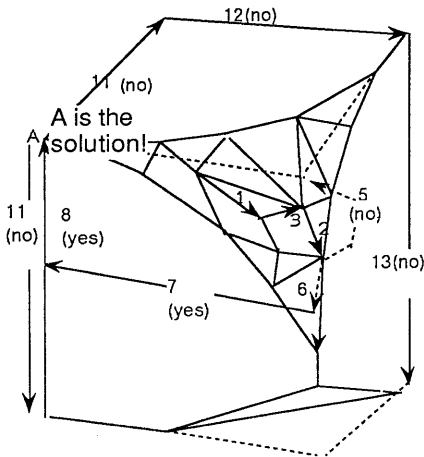


図2.掃き出し補数法のご概念図

形（命題）を黒くしたあとこれらの改良を行う。先ず、初めて使用する用語を定義する。

○ノード, □ノード ○は各命題ノード, □はANDまたはORノード（色が変わしても同じ）
指数深さ 推論ツリーにおいて、ゴールから下に向かい枝分かれの数を掛けた積。図3でノード1

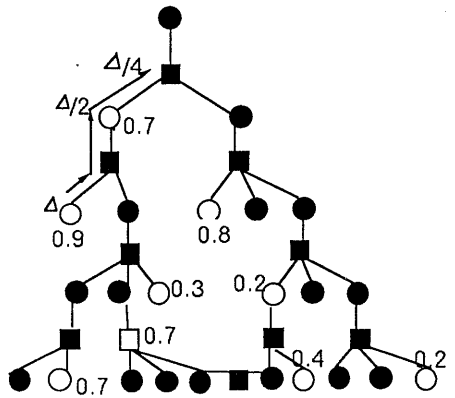


図3.NBPの構造とメカニズム

黒に変化させると同時に、当該■ノードからここに至る伝播パスの向きを逆転する。このように、一回の掃き出しは「黒」と「白」の交換で実行される。ここで黒ノードの個数が常に一定に保たれる点を比喩的に取り上げてネットワーク化バブル伝播と称している。このバブル伝播で注意すべき点は次の2点である。

- a. 黒から最小の変化で白になるように相手の白を選ばなければルールを満たさない結果となる。
- b. 評価関数あるいは非整数度指数を最小にする

交換が要求される。

次に大まかにNBPのメカニズムを述べる。

1. ネットワーク上の分岐点から白に交換する黒ノードを選ぶ。
2. 伝播パス上の全ての白ノードの指数深さ、影響度を計算し、影響度最小のものと交換を行う。
3. 全ての白ノードのうち、評価関数、非整数度指数の最小の交換を選択する。
4. 上記の1から3の交換によって●ノードが増えずかつ非整数度³⁾が減らない場合、まるめを行い、実行可能解を見いだせなければ○ノードのうちで影響度最小のものと交換を行う。
5. 全ての円形が黒となれば3つまでの黒ノードの反転(0と1の入替え)による改良を行う。

ただし、このメカニズムは完全ではない。ネットワークが閉グラフを含み複雑になると、1.と2.で伝播パスが一意に決定できず、実行不可能に陥ってしまう。強引にループを含むリンクを付与することも可能だが、取り扱い極めて複雑となる。次の節ではこの問題を解消することを目的として提案した拡張NBPについて述べる。

5. ネットワークが閉グラフを含む場合への拡張

前節までの議論は、特にネットワークが単純なツリー構造だけで構成される場合には完全に適用可能である。即ち、このような場合には伝播パスが上記の手続きで全てのリンクに対して一意に決定される。従って、4において○ノードの選択が非常に容易行われるので探索時間が掃き出し補数法より大幅に短縮される。

一方、ネットワークが閉グラフを含む場合には伝播パスをこのように容易に決定することが出来ない可能性を有する。この様な場合には、伝播パスの決定は一定の自由度を有し、以下に述べるように、この自由度の範囲内でどのように伝播パスを与えてもその結果生じる有効グラフがループを生成してしまう。ここでは、このループ生成による推論速度の低下と、これを防止する為に考案したネットワークの2段階簡略化について述べる。これにより、理論上約 10^3 個以下の命題(リンク 10^4 以下)を含むネットワークでは掃き出し補数

法を上回る推論時間を達成することを述べる。

5.1 ループを含むネットワーク

図3に示したネットワークでは、○または■のみからなる連続した部分ネットワークが全て基本木(閉グラフを含まない)形で構成されるので、全てのリンクを有向リンクとする伝播パスが張られた。このような単純なケースに対し、ネットワークが複雑になると一つ以上の閉グラフを○または■のみが構成する場合が起こりうる。このような場合の一例を図4に示す。前節での手続きだけでは太線の矢印に含まれるリンクに伝播パスを張ることが不可能である点で、図3と決定的に異なっている。

ネットワーク上の真理値伝播において、この場合問題となるのは次の2点である。

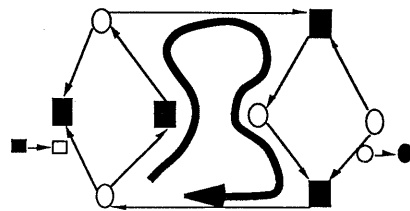


図4 伝播パスを一意に決定できない場合

- 1) ある■と交換する白ノードを探す場合に、これを限定する機能を本来有する伝播パスがないために、探索に時間がかかる。
- 2) 強引にループを含む伝播パスを与えることもできるが、これでは伝播パスを辿ろうとすると同じリンクを永久に繰り返すことになる。

したがって、リンクの向きによっては計算したい指数深さは発散してしまう。この場合、伝播パスに沿ってループ一周辺りの変化の伝播比率を求め、これから無限等比数列の和を求める手法を適用して指数深さを求めることも考えられる。しかし、例えば図5の様にループが重なってしまう場合、この一周周すること自体が非常に困難な操作になってしまう。

以下では、これらの問題を解決するために、2段階の簡略化からなる指数深さ決定手法を提案する。

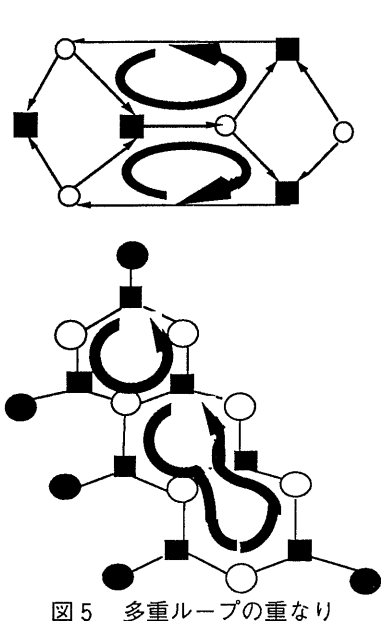
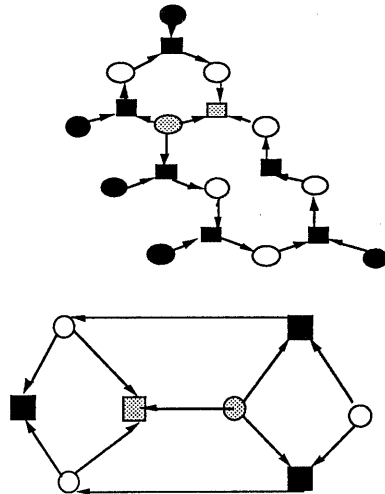


図5 多重ループの重なり

5.2. ループ解消の手法

ここで、ループ解消手法として次のような基本戦略を導入する。次に述べる手順は、上述の方法で伝播パスが付与できない場合を対象とする。

- 1) 白に変化させる■を仮に選ぶ。次に、仮に伝播パスの始点とする○を定める。
- 2) ループを許容して伝播パスを全てのリンクに付与する。(図5)
- 3) ループの数(L)と同数の○と■の対を仮に白黒反転させる。これは、図5を図6の様に変更することによってループを解消させたことに当たる。この場合、図5の見かけのループ数よりも小さなLに対して反転させるだけで済む場合が多い。



●○ 反転させるノード

(見かけのループ数2に対し、1対の反転で済む)

図6 白黒反転によるループ解消

- 4) 伝播パスの始点とした○とここに反転させた全ての○から、始めに選択した■及び全ての反転した■への変化量の伝搬比率を求める。
- 5) L行L+1列の行列演算によって、全ての反転した■の変化量を0とするように、全ての○の変化量の比を求める。
- 6) 5) で求めた結果から全ての白ノードの変化比率を求め、これを拡張指数深さとする。これから影響度を求め、最小値を求める。
- 7) 以上をこれを全ての■に対して行い、評価関数の比較を行う。

5.3.2 段階の簡単化による高速伝播

5.2.において、行列演算の計算時間は L^3 に比例する。掃き出し補数法では一回の白黒交換が N^2 に比例する時間を要したのに対し、後述するようにこの部分のみが L^3 かかってしまう。

従って、もし簡単化を行わずに1)で全てのノードを反転させるならば、掃き出し補数法以下の推論速度に留まってしまう。そこで、以下に示す様にネットワークの簡略化を行ってNより充分小さなLにすれば逆に掃き出し補数法を大幅に上回る推論速度を達成できる。

5.4 ネットワークのエリア分割

理解を容易にするために、先ず図7に第1段階

の簡略化の概要を示す。

この図で、ループがどこにも存在しないことに容易に気づく。これは、次の規則で有向リンクを与えたものである。これをエリア分割がそれ以上不可能となるまで繰り返す。

- 1) 一つの○エリアは、○と、隣接する○が2つのみである■を含む。
- 2) 一つの■エリアは、■と、隣接する■が2つのみである○を含む。

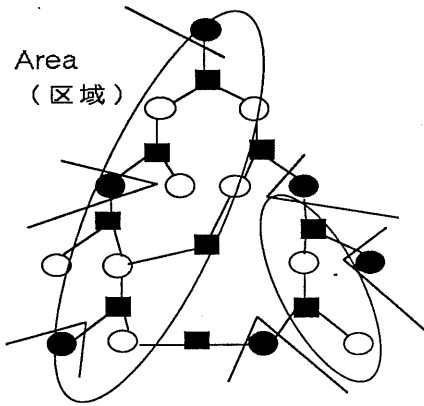


図7 第1段階の簡略化（エリア分割）

一回の分割ごとに一定の比率でネットワークを簡略化できるので、簡略化の所用時間は N に対して線形である。大きさ N のネットワークに伝播パスの終点として仮に一つの■与えた場合のエリア

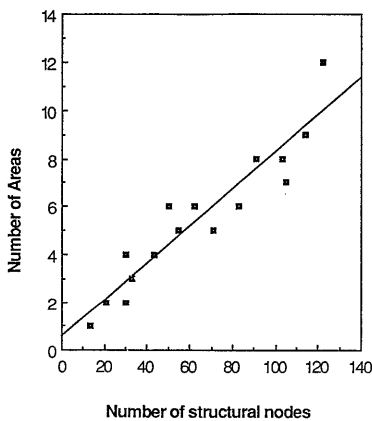


図8. エリア分割におけるエリア／ノードの比例関係

の数は図8のグラフのように N と線形関係にある。このことから、第1段階の簡略化によって平均値を取るとネットワークの大きさはもとの14.4分の1に縮小される。(R1=14.4)

5.5 ネットワークのグループ分割

次に、第2段階の簡略化を行う。

この場合もやはり先ず図を示す。図9でループは存在しないことが分かる。これは、第1段階が終了したネットワークに対し以下の要領でグループ分割を行ったものである。

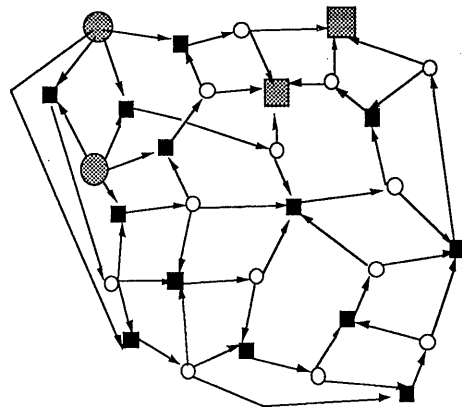


図9 第2段階の簡略化（グループ分割）

- 1) 任意の○を始点とし、有向リンクを張る。
- 2) 一つ前のグループまでと現在拡張中のグループの有向リンクを合わせることによって新しいエリアへ拡張できる（有向リンクを延ばせる）場合はその拡張を行う。

これに要する時間も N に対して線形である。尚、エリアの数と第2段階の簡略化によるグループの数の間には、図10の様に線形関係がある。

このことから、この簡略化によって更にネットワークは24.4分の1に縮小される（正確には、リンクの数の約103分の1の L を得る。ここでは、実用的な多くの場合の■一つ辺りの隣接リンク数 S について統計的に求めたものである。このとき、Full Adderの場合、 S は4.2本/■ということになる。）(R2=24.4)ことが分かる。

5.6.NBPの計算時間

以上から、計算時間 T_{pp} は次の様に与えられる。

$$T_{pp} = N + \frac{1}{R_1^2 R_2} N^2 + \frac{1}{R_1^3 R_2^3} N^3$$

$$\cong N + 10^{-4} N^2 + 10^{-7} N^3 \quad (6)$$

このことから、 $N \leq 1000$ (仮説数は少なく見積って100程度、通常は500程度) に対して、 T_{pp} は

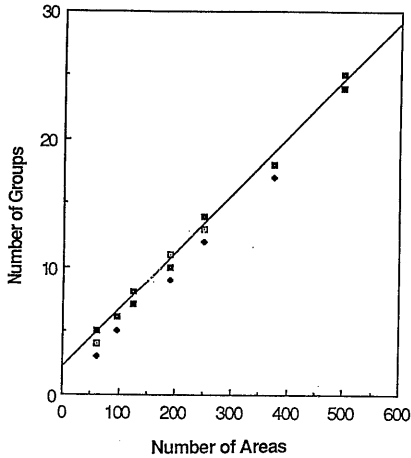


図10.グループ分割におけるグループ/エリアの比例関係

ほぼ N に比例する。この点で、この程度の仮説数まで T_{pp} が N^2 に比例する掃き出し補数法を大幅に上回る理論を得たことになる。

即ち、掃き出し補数法を用いた従来の研究においては、制約不等式が全ての構造変数の個数より充分少ない構造変数を含んでいる場合でも、その値(真理値)の変化は値の変化は単体表の全ての成分値の入れ替えで実行された為、計算時間は少なくとも成分の個数=制約の個数×構造変数の個数だけかかっていた。

これは、ネットワーク上ではルールの個数×命題の個数に対応するが、ここで提案した推論方式では、ネットワーク上の各リンクを一度だけ通って黒ノードの変化量を伝播させるので、掃き出し補数法の冗長性がない。

例えば、Full Adderの故障診断では通常AND節よりも含まれる命題数の多いOR節のルールでもたかだか6命題までしか含まず、これは命題の数に依存しない。このように、実用上ではリンク数は命題の個数に比例しているところを掃き出し補数

法では構造変数の二乗に比例するものとして取り扱った点を改良したということも出来る。(基底化すべき非基底制約の個数と非基底化すべき基底構造変数の個数は正確に一致する。)

このことから、掃き出し補数法を用いた結果が問題の規模の4乗程度の計算時間を得たのに対し、NBPではこれが3乗程度になり命題数1000程度大規模な仮説推論に適した解法であると考えられる。

6. 結論

仮説推論の計算速度を向上させることを目的とし、ネットワーク上の実数真理値伝播を行う新しい手法を提案した。これは多項式時間の推論が保証される近似解法で、その理論上の実行時間の最悪値は掃き出し補数法による仮説推論の実行時間を上回る。

ここに示すようにネットワーク化によって最適化を迅速に行う方法は、高速手法として最近徐々に注目を集めている^{7),8)}が、仮説推論をこの形に帰着できたのは実数真理値に一旦問題を拡張したことによる。実数問題(P)が整数問題(NP)よりも一般に簡単であることを考えると興味深い点である。

参考文献

- [1]石塚:次世代エキスパートシステムへ向けて、エキスパートシステム(石塚,小林(編著))、丸善,第7章(1991)
- [2]石塚:仮説推論,日本ファジイ学会誌,Vol.4, No.4, pp.620-630 (1992)
- [3]伊藤, 石塚:推論バスネットワークによる高速仮説推論システム Vol.6, No.4, pp.501-509(1991)
- [4]E. Balas & C. Martin: Pivot and Copplement-A Heuristic for 0-1 Programming, Manag. Sci. 26, pp.86(1980)
- [5]岡本, 石塚: 0-1整数計画法を用いて最適解を得る仮説推論法 情報研究会資料AI-81-7(1992,3)
- [6]J.N. Hooker: A quantitative approach to logical inference. Decis. Support Systems 4,1(1988)
- [7]K. Hasida: Dynamics of Symbol Systems -An Integrated Architecture of Cognition Proc. FGCS'92, pp.1141(1992)
- [8]H. Kasahara & S. Naria: Practical Multiprocessor Scheduling Algorithms for Efficient Parallel Processing, IEEE Trans. CMP, c-33-11(1984)