

創発的計算のためのモデル CCM による問題解決における 局所性の制御法

金田 泰*

新情報処理開発機構 (RWCP) つくば研究センタ

CCM (Chemical Casting Model) は、たえず変化する環境に対してひらかれた創発的計算にもとづく問題解決法の確立をめざして開発した、非決定的(ランダム)に動作する計算のモデルである。CCM においては局所的な情報をつかって計算がおこなうが、局所的な極限においては解をもとめることはできない。したがって、計算、とくに評価関数の計算の局所性を制御して、局所最適点におちいらないように探索空間内での局所性を制御する必要がある。この報告では4つの局所性の制御法をしめす。それらは、触媒の加減、反応規則の合成またはトンネリング、シミュレーテッド・アニーリング(SA)、フラストレーション蓄積法(FAM)である。これらを比較した結果、制約充足のばあいは触媒の加減とFAMが有効だが、これらだけでは従来法に計算時間のうえでおとるばあいがあることがわかった。また最適化のばあいはトンネリングすなわち反応規則の動的な合成が有効だとわかった。

Methods of Controlling Locality in Problem Solving using CCM: A Model for Emergent Computation

Yasusi Kanada*

Tsukuba Research Center, Real-World Computing Partnership

CCM (Chemical Casting Model) is a model of nondeterministic, or random, computation. CCM is developed toward establishing a problem solving methodology based on emergent computation, which is open to continually varying environment. Computation in CCM is based on local information. However, a solution cannot be found if the locality is at the limit. Thus, the locality of computation, especially computation of the evaluation functions, must be controlled properly, and the locality in the search space must be controlled properly not to fall into local optima. Four methods of controlling locality are shown in this report. They are addition or removal of catalysts, composition of reaction rules (or tunneling), simulated annealing (SA) and frustration accumulation method (FAM). We found that catalysts and FAM are effective in constraint satisfaction, but that the performance is worse than conventional methods when only using these methods in a case. We also found that tunneling, or dynamical composition of reaction rules, is effective in optimization.

* E-mail: kanada@trc.rwcp.or.jp

1. はじめに

人間は個人的生活や社会的生活のさまざまな場面でさまざまな問題解決の必要にせまられる。このような問題解決は、コンピュータをつかうにせよ、つかわないにせよ、一種の計算とみなすことができる。そこで、このような計算をおこなうシステムを計算システムとよぶことにする。実世界の計算システムは刻々と変化する環境に対してひらかれた複雑なシステムである。このような状況ではつねに予測不能な変化がおこる可能性があるため、閉じた完全なシステム仕様を記述することはできない。また、複雑であるということは問題が非線形である、またはうまくモジュール分解あるいは分割統治することができない。ところが、従来のシステム開発法とくにソフトウェア開発法は閉じた仕様の存在を仮定していて、かつ本来は線形(単純)なシステムにだけ適用できるはずのモジュール分解を基本としている。したがって、実世界のシステム開発には限界があるとかんがえられる [Kan 92, Kan 94a]。

金田 [Kan 92, Kan 94a] はこのような状況のもとでの創発的計算 [For 91] にもとづくソフトウェア開発法の確立をめざして、化学反応系とのアナロジーにもとづいた化学的キャストリング・モデル (Chemical Casting Model, CCM) という計算モデルを提案している。上記のような状況のもとでは問題解決のために必要な情報をあらかじめ完全にあつめることはおぼつかない。また、とじた完全な情報をもとにした従来のシステムは環境の変化によわいとかがえられる。そこで、CCM は局所的・部分的な情報だけによるひらかれた計算をめざしている。

この研究はまだ初期段階にあるため、これまで CCM によって静的な問題を中心にといてきた。古典的な制約充足問題として N クウィーン問題 [Kan 93c, Kan 94a] やグラフ彩色問題 [Kan 93d]、最適化問題として巡回セールスマン問題 [Kan 93a] や整数計画問題 [Kan 94b] などをつかってきた。また、動的な問題への適用についても検討してきた [Kan 94c]。これらの問題をとくにあたって、いくつかの方法で計算の局所性や探索範囲の局所性(局所最大値へのおちいりやすさなど)を制御してきたが、この報告ではそれらについてまとめる。

第2章では CCM とそれにもとづく問題解決の例についてかんたんにのべる。第3章では“局所性”ということばの意味をしめしてから局所性の制御のためのいくつかの方法について説明する。第4章でそれらの方法を比較し、第5章で結論をのべる。

2. CCM とそれにもとづく問題解決法

この章では化学的キャストリング・モデル (CCM) について説明し、それにもとづく問題解決の例をしめす。ただし、CCM についてはこれまでの報告においても説明しているので、ここでは最小限の説明をするにとどめる。

2.1 計算モデル CCM

まず、CCM の構成要素についてかんたんに説明する(図1参照)。CCM はプロダクション・システムにもとづくモデルであり、化学反応系とのアナロジーにもとづいている。古典的なプロダクション・システムにおけるのと同様に、データを格納する領域のことを作業記憶とよぶ。規則ベースすなわちプログラムに相当するものはキャストとよぶ。

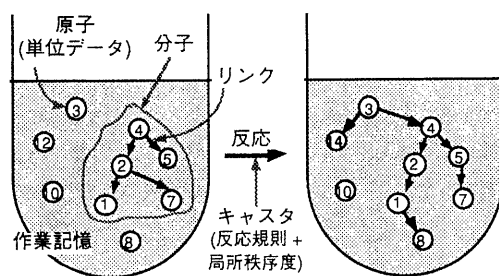
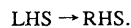


図1 化学的キャストリング・モデルの構成要素

作業記憶にふくまれるべきオブジェクトあるいはデータとして原子がある。原子はデータの単位であり、内部状態をもつ。原子どうしをリンクによって結合できる。リンクは無向でも有向でもよい。無向のリンクは化学結合に似ている。

キャストは反応規則と局所秩序度とで構成される。反応規則はシステムの局所的な変化のしかたをきめる規則であり、ユーザが定義する。第3章でよりくわしく説明するが、ここで「局所的」ということばは計算において参照される原子数がすくないということを意味する。反応規則はつぎのような前向き推論によるプロダクション規則として記述する。



反応規則の左辺 LHS および右辺 RHS には原子とマッチする1個または複数個のボタンがあらわれる。反応規則は化学反応式に相当するものだといえる。後述する2つの問題をはじめとして、おおくの単純なシステムにおいては反応規則は1個だけ存在する。しかし、複数の変化のしかたをみとめるより複雑なシステムにおいては複数個の反応規則が存在する。

局所秩序度は局所的な“組織化”あるいは“秩序

化”の程度をあらわす一種の評価関数であり、作業記憶の局所的な状態が“よりよい”ほどおおきな値をとるように、ユーザが定義する。局所秩序度は負号をつけた一種のエネルギー(化学反応系とのアナロジーからすると原子間の結合エネルギーのようなもの)とかがえられることができる。

反応はつぎの2つの条件をみたすときにおこる。第1の条件は左辺のすべてのパタンのそれぞれにマッチする原子が存在することである。第2の条件は反応に関係する(規則の両辺にあらわれる)原子の局所秩序度の和が反応によって減少しないことである。そして、いずれかの反応規則と原子のくみあわせが上記の2条件をみたしているかぎり、反応はくりかえしおこる。これらの条件をみたすくみあわせが存在しなくなると実行は中断する。

ただし、一般には上記の2つの条件をみたすくみあわせは複数個存在する。条件をみたすくみあわせが複数個生成される原因としては、ひとつの反応規則の条件部をみたす原子の組が複数個存在するばあいと、複数の反応規則についてその条件部をみたす原子の組が存在するばあいとがある。いずれのばあいでも、これらのくみあわせのなかのどれがどのような順序で、あるいは並列に反応するかは基本的にはランダムにきめる。

2.2 CCM にもとづく問題解決

CCM における問題解決は、一種のランダムな近傍探索と見なすことができる [Kan 93d]。CCM においては、局所的にみて“よりよい”状態はなにかということ局所秩序度が定義し、近傍の状態への遷移のしかたを反応規則が規定する(逆にいえば、反応規則によって近傍が定義される)。局所秩序度の平均値を平均秩序度とよぶことにする¹⁾。平均秩序度は観測または推定によってもとめられる量であり、システムの動作を決定するために平均秩序度を計算

¹⁾ これまでの報告では局所秩序度の総和である大域秩序度という量をつかってきた。そのかわりに平均秩序度をつかうようにした理由はつぎの3点である。第1に平均秩序度はより局所的に定義することもでき、より大域的に定義することもできるため、さまざまなレベルの局所性をかんがえるときにつごうがよい。第2に平均秩序度はひらかれた状況(原子がランダムに入力されるときなど)のもとも定義できる。第3に平均のとりかたとして上記のようなアンサンブル平均(ことなる原子についての平均)だけではなく時間平均やアンサンブルと時間の両方についての平均もかんがえられるという点において、平均秩序度のほうが柔軟性がある。実際に秩序度を観測するとき、ある時間の経過のなかで観測することになるから、この柔軟性は必要なものだとかがえられる。とくに並列処理をおこなうばあいは必要性がたかいであろう。

するわけではない。しかし、システムは平均秩序度が増加する方向に揺動的(stochastic)に動作する。

平均秩序度はミクロなレベルでもマクロなレベルでも定義することができる。前節でのべたように反応はそれに関係する原子の局所秩序度の和が増加する方向におこる。したがって、システムはミクロなレベルではたしかに平均秩序度の増加方向に動作する。しかし、ミクロなレベルにとどまらず、マクロなレベルでも平均秩序度が増加するようにシステムは動作する(図2)²⁾。したがって、“よりよい”状態としてよりおおくの制約がみたされた状態をとれば制約充足問題をとくことができるし、より最適化された状態をとれば最適化問題の近似解をもとめることができる。

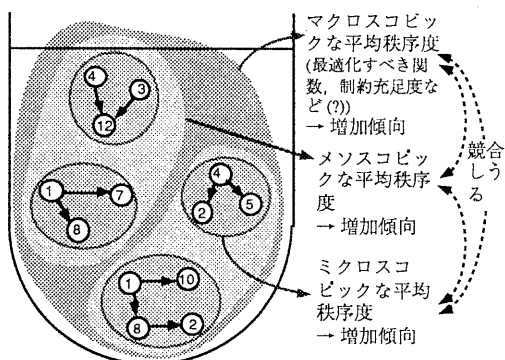


図2 各レベルの平均秩序度とその変化

システムを動作させるにはなにが局所的にみてよりよいかがわかっていさえすればよいから、大域的にみてなにが最適であるかがわかっていなくても、なにがしかの解をもとめることができる。したがって、CCM にもとづく問題解決法はひらかれた計算を実現しやすいとかがえられる。すなわち、システムが完成してから環境が変化しても、あるいは問題をといているあいだに問題じたいが変化するようなことがあっても、それに適応しやすいとかがえられる。

ただし、古典的な制約充足問題や最適化問題のばあいには、この方法ですべての制約をみたすことができるかどうか、あるいは大域最適解に到達できるかどうか、またそれらの状態で停止するかどうかは、ただちには結論づけることができない。なぜなら、局所最大点のようなものにとらわれる可能性もあるし、有限時間で解がもとめられる保証もないからで

²⁾ ただし、後述するエイト・クウィーン問題をとくシステムにおいては、ミクロな平均秩序度が増加するときにマクロな平均秩序度が増加するとはかぎらない。このようなシステムを競合型システムという [Kan 93b, Kan 94a]。

ある。CCM にもとづくシステムのあるまいに関しては、金田 [Kan 93a, Kan 93b] などが解析しているが、まだよくわかっていない部分がおおい。

なお三上ら [Mik 94] は、大域的な関数を最適化するようなあるまいを局所的な評価関数をつかって強化学習させている。この研究は CCM にもとづく最適化と同様に最適化すべき関数が局所的な評価関数の和であらわされるばあいの学習をあつかったものであり、CCM と関係がふかいとかんがえられる。

2.3 CCM によるエイト・クウィーン問題

この節では CCM にもとづく問題解決の例としてエイト・クウィーン問題をとりあげる。エイト・クウィーン問題は、チェス・ボードにたがいにとりあわないように 8 個のクウィーンを配置する制約充足問題である。N 行 N 列の“チェス・ボード”に N 個のクウィーンをおくように問題を拡張すると、いわゆる N クウィーン問題になる。これも同一のキャストをつかってとくことができる。

キャストを図 3 にしめす。この反応規則は図 4 にしめすように 2 個のクウィーンをえらんでその列を交換する操作をあらわしている。この操作を反復して解をもとめる。反応がおこるかどうかは、2 個のクウィーン x, y が対角線方向にないとき秩序がたかいというように定義された図 3 の局所秩序度 $o(x, y)$ につかってきめられる。

ただしこの反応規則においては、交換すべき 2 個のクウィーンをあらわすバタンのほかに、もう 1 個のクウィーンをあらわすボタンがふくまれている。かんたんにいえばこの第 3 のボタン (これを後述するように触媒とよぶ) が存在することにより、クウィーンの列を交換するかどうかをきめる際に、その 2 個のクウィーンだけでなく他のもう 1 個のクウィーン (だけ) の状況も評価するということを意味する。すなわち、ボタン Queen1, Queen2, Queen3 にマッチしたクウィーンをそれぞれ Q1, Q2, Q3 とすれば、

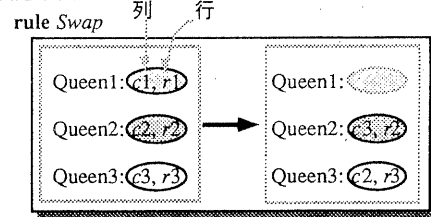
$$o_b(Q1, Q2) + o_b(Q1, Q3) + o_b(Q2, Q3) \leq o_a(Q1, Q2) + o_a(Q1, Q3) + o_a(Q2, Q3)$$

がなりたつときに反応がおこる。ただし、ここで o_b は反応前、 o_a は反応後の局所秩序度をあらわす。

このような反応規則と局所秩序度とをつかうことによって N クウィーン問題をとくことができる。図 5 は上記の方法によってエイト・クウィーン問題をといたときの平均秩序度の変化をしらべた例である [Kan 93c]。88 回の反応で平均秩序度は 1 になっている、すなわち解に到達している。ここでは、平均秩序度は局所秩序度の総和 (大域秩序度) からもとめて

いる。このような平均秩序度の時系列はマルコフ連鎖とみなせることがわかっていて [Kan 93b]。

■ 反応規則



■ 局所秩序度 (相互秩序度)

2 個のクウィーンのあいだで秩序度を定義する。

$$o(x, y) = 0 \text{ if } x.\text{column} - y.\text{column} = x.\text{row} - y.\text{row} \text{ or } x.\text{column} - y.\text{column} = y.\text{row} - x.\text{row}, \\ 1 \text{ otherwise.}$$

図 3 CCM による N クウィーン問題のキャスト

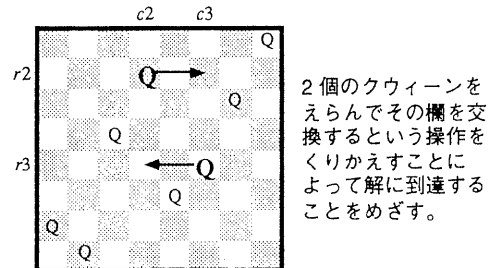


図 4 エイト・クウィーン問題の反応規則の意味

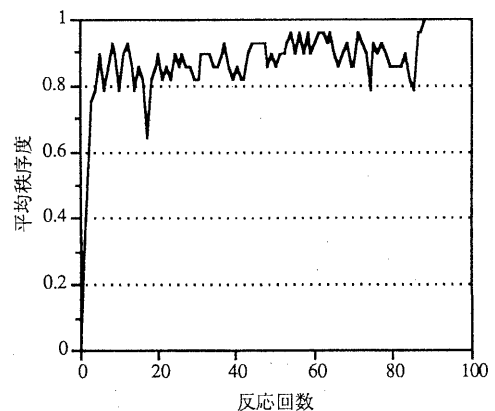


図 5 エイト・クウィーン問題における平均秩序度の実測値例

エイト・クウィーン問題はいうまでもなく静的な問題であり、この研究が本来の目標としているひらかれた問題ではない。しかし、クウィーンの動的な追加・削除をみとめることによって、ある程度ひらかれた問題にすることもできる [Kan 92]。このばあ

いでもキャストに変更をくわえる必要はない。

他の制約充足問題についても、全制約が2個のオブジェクトの関係として表現できれば、上記のような方法で問題を表現できる [Kan 93b]。このように定義したとき、平均秩序度は0と1のあいだの値をとり、全制約がみたされた状態において1になる。

Selman ら [Sel 93b] は GSAT という大域的な評価にもとづく充足可能性問題の確率的な探索法によってグラフ頂点の彩色問題をとくばあいに、評価関数の値が探索の初期に急激に解にちかづくことを指摘している。CCM においても図5のように初期段階で平均秩序度が急激に解にちかづくことがおおい。

3. 局所性とその制御法

この章では、計算の局所性と探索空間における局所性とその制御法についてのべる。

3.1 局所性とその極限

この節では、局所性ということばとその必要性について説明するとともに、もっとも計算が局所的である極限についてかんがえる。

第2章であれたように、計算が局所的であるというとき、このことばは計算において参照される原子数がすくないということを意味する。「局所的」ということばは距離がちかいことを意味することがおおいが、CCM においては化学反応系のように物理的な意味での距離の概念が導入されていないから、距離と直接の関係はない。

計算の局所性を問題にするのは、環境に対してひらかれた状況での問題解決においては、大域的情報を参照することはできないからである。問題が複雑であればあるだけ、また環境の変化がはげしければそれだけ、より局所的な情報だけで問題解決をおこなわなければならないであろう。

しかし、完全というか極限的に局所的な計算によっては、解をもとめることはできないであろう。たとえば図6のような反応規則をつかえば、クウィーンの列を交換するかどうかをきめる際に、交換すべき2個のクウィーンだけを評価してきめることになる。このばあいの反応がおこるための必要条件は

$$o_b(Q1, Q2) \leq o_a(Q1, Q2)$$

であり、その値はつねに真である。したがって、この反応規則をつかえば探索は完全な酔歩 (random walk) になり、解に到達するまでに膨大な時間がかかるうえに、解に到達しても到達したことが検出されないで他の状態に遷移してしまう。したがって、

局所的な情報にもとづく計算をめざすといっても極限的に局所的な計算をすればよいわけではなく、よりよい計算がおこなえるように局所性の度合を制御する必要があることがわかる。すなわち、非局所性の度合と計算速度、局所最適な解へのおちいりにくさとのあいだには、およそ図7のような関係があるとかんがえられる。

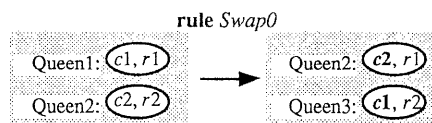


図6 エイト・クウィーン問題におけるもっとも局所的な反応規則 (触媒をふくまない反応規則)

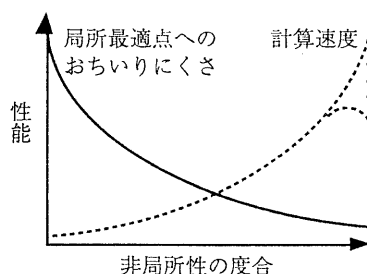


図7 非局所性の度合と計算性能との関係

ところで、局所探索ということばにおける局所性は、計算の局所性におけるそれとは同一ではない。すなわち、このばあいには探索空間内の近傍の状態にだけ遷移するというをあらわしている。ただし、探索空間内の近傍の状態どうしは一部のデータの状態だけがことになっているとかんがえられるから、これらの局所性のあいだにはある関係があるとかんがえられる。これらの両方をともに局所性ということばで表現するのはまぎらわしいが、とりあえず局所性の制御ということばは、これらのうちのどちらか、あるいは両方をあらわすことにする。これらにくべつするには、「計算の局所性」および「探索空間内での局所性」ということばをつかう。

3.2 局所性制御のための方法

局所性制御のための方法は、おおきくわけて2つある。それらは、反応規則のマクロ化・ミクロ化およびアニーリングとよぶことができる。

反応規則のマクロ化とその逆のミクロ化は反応規則にあらわれるバタンの数を増加(または減少)させる方法である。これにより計算の局所性が変化し、その結果、探索空間内での局所性も変化する。反応規則のマクロ化・ミクロ化のためのより具体的な方

法として触媒の加減と規則の合成・分解とがある。

アニーリングは、評価関数の値と、反応をおこすかどうかの決定とのあいだの関係をかえることによって、探索空間内での局所性に影響をおよぼす方法である。ただし、この方法では1回の反応において参照するデータ数はかわらないし、1回の反応で探索空間内ではなれた状態に遷移することもない。アニーリングの具体的な方法としてはさまざまなものがかんがえられるが、たとえばボルツマンマシンをまねたシミュレーテッド・アニーリングやフラストレーション蓄積法がある。

上記の4つの方法について次節以下で説明する。

3.3 触媒の加減

触媒とその加減については金田 [Kan 93d] がのべているが、ここでは例をかえて説明する。

まず触媒について説明する。触媒とは反応によって変化しないが評価関数の計算にだけつかわれる原子にマッチするパタンのことである。図3の反応規則においてはQueen1が触媒である。図6の反応規則には触媒は存在しない。触媒を2個以上ふくむ反応規則をつくることもできる。図8の反応規則は2個の触媒 Queen3, Queen4 をふくんでいる^{注3}。

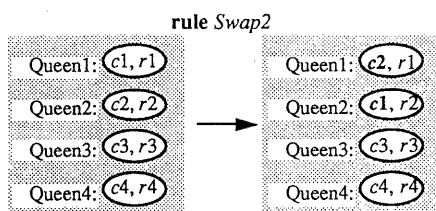


図8 エイト・クウィーン問題における触媒を2個ふくむ反応規則

このように触媒を加減することによって反応規則にあらわれるパタンの数が変化し、1回の反応において参照される原子数が変化する。したがって触媒の加減は反応規則のマクロ化またはミクロ化とみなすことができ、それによって計算の局所性が変化する。触媒の加減によって反応の内容すなわち反応によって変化する原子の数や反応後の状態が変化することはないが、触媒をくわえるとよりマクロなレベルにおける平均秩序度が増加することが保証される。

触媒の加減による具体的な効果については、彩色問題のばあいについて金田 [Kan 93d] が報告してい

^{注3} このばあい、反応がおこるための必要条件はつぎのようになる： $o_b(Q1, Q2) + o_b(Q1, Q3) + o_b(Q1, Q4) + o_b(Q2, Q3) + o_b(Q2, Q4) + o_b(Q3, Q4) \leq o_a(Q1, Q2) + o_a(Q1, Q3) + o_a(Q1, Q4) + o_a(Q2, Q3) + o_a(Q2, Q4) + o_a(Q3, Q4)$ 。

るが、ここではエイト・クウィーン問題におけるその効果をしめす。図9には、エイト・クウィーン問題の規則において触媒数 N_c を変化させたときの平均秩序度の変化例をしめす。 N_c がおこいほど平均秩序度がたかい状態を推移している、すなわち探索にバイアスがかかっていることがわかる。平均秩序度の変化が準定常 [Kan 93b] になってから停止するまでのその平均値および標準偏差をもとめると、図10のような結果がえられた。3.1節でのべたように、 $N_c=0$ のときは探索は完全な酔歩となって停止しないため、この図にはこのばあいはふくまれていない。

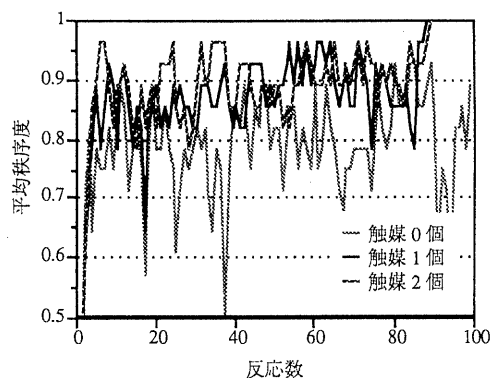


図9 触媒数0～2のときの平均秩序度時系列の例

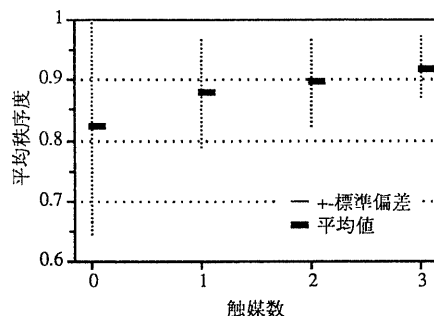
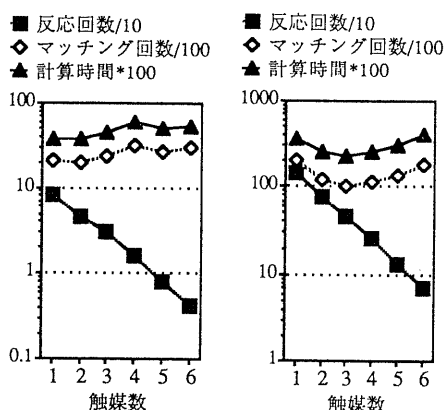


図10 準定常状態における大域秩序度の平均値と標準偏差

ところで、バイアスがつよくなると解がもとめられるまでの反応数は減少するため、この点では効率が向上する。しかし、反応がおこるまでのマッチング回数すなわち反応規則左辺の実行回数やインスタンス秩序度の計算に要する時間が増加するため、1回の反応に要する計算時間は増加する。したがって、平均計算時間を最小にする N_c が存在するであろう。図11はこの現象をエイト・クウィーン問題と12クウィーン問題についてみたものである。 N_c は $N=8$ のとき1または2、 $N=12$ のときは3が最適である

ことがわかる^{注4}。Nがさらにおおきければ、さらに触媒数がおおいほうがよいだろう。

一方、バイアスがよわいときにはシミュレーテッド・アニーリングにちかい効果がえられるため、局所秩序度の総和(大域秩序度)の局所最大点にとらわれにくい[Kan 92]。これに対して、バイアスをつよめるとやまのぼり法にちかづくため、しだいに局所最大点にとらわれやすくなる。たとえば、6クウィーン問題において触媒数を4にする、すなわちすべてのクウィーンを反応時に評価対象とすると、図12のような局所最大点が生じる。図11の測定においても、 $N=8$ 、 $N_c \geq 5$ のばあいには局所最大点におちいて解がもとまらないばあいが生じている。



(a) $N=8$ (b) $N=12$
図11 触媒数と計算時間などの関係



図12 6クウィーン問題における局所最大点

3.4 反応規則の合成・分解とトンネリング

反応規則の合成についても金田[Kan 93d]が彩色問題を例としてかんたんに説明しているが、ここではNクウィーン問題を例として説明する。

^{注4} このグラフにしめた値は50回の測定の平均値である。なお、 $N=8$ のときは触媒数が4のときより5~6のときのほうが計算時間がみじかいが、このときは後述のように局所最大点におちいているばあいがある。ここではこのようなばあいもふくめた平均をとっている。

このばあいには図13にしめすように触媒数0の反応規則を3回合成することによって触媒数1の反応規則をえることができる。同様にして触媒数が2以上の反応規則もつくりだすことができる。彩色問題のばあいには触媒をふくまない反応規則から触媒をふくむ反応規則を合成によってつくりだすことはできなかったが、このばあいはそれが可能である。

ここでは合成によって触媒数が変化する例をあげたが、これとはことなる効果をもった合成も可能である。いずれにしても、反応規則の合成またはその逆の操作である分解によって、反応規則にあらわれるバタンの数が変化し、計算の局所性が変化する。

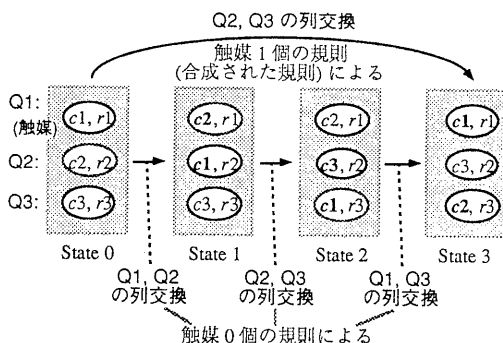


図13 触媒数0の規則からの触媒数1の規則の合成

プロダクション・システムにもとづく問題解決においては、規則の合成はマクロ作用素[Bar 81]の生成とよばれている。このばあい通常はことなる規則が合成される。CCMにおいても、複数の反応規則があたえられていれば、このような合成をかんがえることもできる。しかし、従来のプロダクション・システムとCCMとでは合成のもつ意味がちがっている。従来のプロダクション・システムにおいては規則適用時に評価関数の計算をしないため触媒は無意味であり、触媒数をふやす合成は意味がない。

CCMをすこし拡張して反応規則の合成を動的におこなう(あるいは反応時の秩序度の計算のしかたをかえて、それと等価な計算をおこなう)ようにすることにより、とくに最適化問題のばあいには一種のトンネリング[Lev 85, Yao 89, Shi 93]をおこなうことができる[Kan 94b]。すなわち、局所最適解にとらわれやすい状況にあるとき、反応規則の合成によってそこからのがれることができる。この方法では、反応規則をある回数だけ連続適用するのと等価な作用をする反応規則を動的につくる。この合成をおこなっても反応結果はかわらない。しかし、合成規則をつかえばもとの反応規則の連続適用途中の状態での秩序度の値を計算しないため、図14に描写して

いるように、平均秩序度の谷をこえることができる。整数計画問題のばあいにはトンネリングにおおきな効果があることがたしかめられている [Kan 94b]。

合成された反応規則はランダムに適用されかつ秩序度の谷をこえることができる。しかし、後述するシミュレーテッド・アニーリングのように秩序度が低下することはない。この点で、くみあわせ最適化においてちょうど連続関数の最適化におけるランダム・トンネリング [Shi 93] (トンネリング・アルゴリズム [Lev 85, Yao 89] の一種) に相当する方法だとかんがえられる。また、湯上ら [Yug 94] が制約充足問題の解決法として提案した階層型山登り法にちかい。

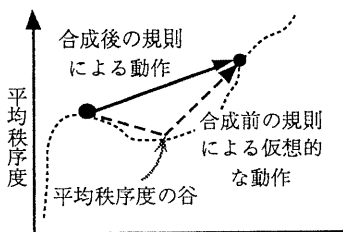


図 14 トンネリングによる平均秩序度の谷ごえ

3.5 シミュレーテッド・アニーリング

シミュレーテッド・アニーリング (SA) は、上記の反応規則の合成と同様に探索の局所性を制御することによって局所最大点からのぬけだしに寄与する。SA は反応規則の合成とはちがって 1 回の反応において参照する原子数をかえるわけではないが、反応時の秩序度の計算方法を CCM 本来の方法とはかえることによって、探索空間内での局所性を制御する。

第 2 章で説明した本来の CCM においては、局所秩序度が減少するときには反応がおこらない。しかし、このときも適当な確率で反応がおこるようにする。すなわち、反応による局所秩序度の和の増分と反応確率との関係を、ボルツマンマシンにならって、図 15 に例示した Sigmoid 関数 ($f(x) = 1 / (1 + e^{-xT})$) とする。そして、システムの動作中に適当なスケジューリングにしたがって温度を 0 にちかづけていく。この方法においてつねに温度 T を 0 にすれば、これまでの CCM にもとづく方法とほぼひとしくなる^{注5}。

3.6 フラストレーション蓄積

SA は最適化問題においても制約充足問題においても適用可能な方法だが、制約充足問題にかぎればこの節のべるフラストレーション蓄積法 (以下

^{注5} ただし詳細にみると、秩序度の和の増分がちょうど 0 であるときの確率が 0.5 になる (従来は確率 1 (または 0)) という点で、これまでの方法とはことなっている。

FAM とする) のほうがよりよいであろう^{注6}。

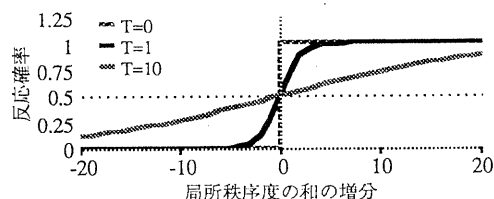


図 15 局所秩序度の和の増分と反応確率との関係

FAM においては各原子がフラストレーションとよばれるエネルギーをもっている。各原子にはあらかじめ 0 よりおおきい一定値のフラストレーションがわりあてられている。反応規則の左辺が実行されたとき、まだ左辺にあらわれるボタンにマッチした原子に関してみだされていらない制約が存在するならば、その原子のフラストレーションを増加させる。反応をおこすかどうかきめるときには反応前の状態における局所秩序度の和と反応後の状態におけるそれとを比較するが、そのときに前者の値から各原子のフラストレーションの値をひく。これにより、フラストレーションがたまると平均秩序度を減少させるような反応がおこりやすくなる。反応がおこったときには、フラストレーションは初期値にもどす^{注7}。

たとえば図 3 の反応規則においては、ボタン Queen1, Queen2, Queen3 にマッチしたクウィーンを Q1, Q2, Q3 とし、Q1, Q2, Q3 のフラストレーションを F_1, F_2, F_3 とすれば、

$$o_b(Q1, Q2) + o_b(Q1, Q3) + o_b(Q2, Q3) - F_1 - F_2 - F_3 \leq o_a(Q1, Q2) + o_a(Q1, Q3) + o_a(Q2, Q3)$$

がなりたつときに反応をおこす^{注8}。ここで o_b は反応前の局所秩序度、 o_a は反応後の局所秩序度である。

フラストレーションを増加させる方法としては加法的な方法、乗法的な方法などがかんがえられるが、これまでためしたかぎりでは乗法的な方法がよい。

^{注6} ただし、まだ条件をあわせた比較をおこなっていないので、SA より FAM のほうがすぐれているかどうかはたしかめられていない。

^{注7} 反応がおこったときにフラストレーションを初期値にもどすかわりに (たとえばある係数をかけて) 初期値よりたかい、あるいはひくいある値にする方法もためしたが、初期値にもどす方法よりひくい性能しかえられなかった。

^{注8} 局所秩序度が自己秩序度として (1 個の原子に対して) 定義されているときには、局所秩序度の和からフラストレーションの和をひけばよい。しかし、このように相互秩序度として (2 個の原子のあいだに) 定義されているときには、反応規則のマクロ化・ミクロ化によってフラストレーションのはたらきがかわらなくなしなければならぬから、この計算法は再検討を要する。

これは、更新前のフラストレーションを F_b 、更新後のフラストレーションを F_a とするとき、 $F_a = cF_b$ ($1 < c$) という式にしたがって更新する方法である。ここで係数 c は 1.01 ~ 1.2 程度の定数である。

Selman ら [Sel 93a] と Morris [Mor 93] は、大域的な評価関数にもとづく充足可能性問題をとくときに各節 (FAM でいえば原子に相当する) がみだされるかどうかにしたがってそれにおもみづけをすることにより、局所最小点にとらわれずに解をもとめる方法を提案している。FAM はこのような方法の局所計算にもとづく探索のための 1 変種だとかんがえることができる。Selman らはかれらの方法が局所最小点において谷をうめるはたらきをするのとべているが、FAM も (正確な理解とはいえないが) 図 16 のように山 (上下がうらがえされた谷) をけずるはたらきをしているとかんがえることができる。前記の係数 c は山をけずる加速度をあらわしているとかんがえることができるだろう。Selman らや Morris の方法と同様に、FAM も制約充足問題 / 充足可能性問題のための方法であり、最適化状態が局所的に定義できないような最適化問題に適用することはできない。

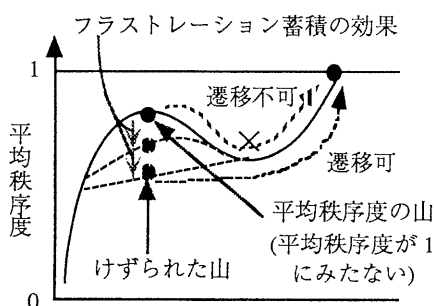


図 16 フラストレーション蓄積法の作用のイメージ

3.3 節でのべたように、制約充足問題において触媒数がおおときは局所最大点におちいりやすい。しかしこのようなときに FAM をつかえば、それをつかわないときは局所最大点におちいりやすい N クウィーン問題やグラフ彩色がほとんど 100 % とけることがわかっている。しかも、パラメタをうまくえらべば FAM をつかわないばあいにくらべて計算時間の増加を比較的ちいさくおさえることができる。

しかし、現在の FAM はまだ不十分だとかんがえられる。すなわち、Johnson ら [Joh 91] がグラフ彩色問題においてしめしている SA にもとづく方法などの測定結果にくらべるとはるかに計算時間がかかることがわかっている。たとえば DSJC125.5 という 125 頂点のランダム・グラフの 19 色彩色においては、各種の SA がいずれも 0.0 ~ 0.2 時間でぬりわけてい

るのに対して、FAM つきの CCM では 17.4 時間^{注9} かかっている。このように時間がかかる原因はまだわかっていない。

4. 各局所性制御法の比較

この章では、前章でしめた 4 つの局所性制御法を、制約充足のばあいと最適化のばあいとにわけて比較する。

まず制約充足のばあいについてかんがえる。あたえられた反応規則が非常に局所的なときは、計算を高速化するためには反応規則に触媒をくわえるのがよい^{注10}。トンネリングすなわち動的な反応規則の合成は、彩色問題に適用したかぎりではよい結果はえられなかった。すなわち、FAM とくらべると局所最大点を脱出しにくかった。その理由はまだよくわからないが、これはトンネリングによってもたらされる非局所性が制約充足問題をとくには有効でない性質のものだからではないとかんがえられる。

あたえられた反応規則が非局所的なときは局所最大点におちいりやすくなっているのので、FAM を適用することによってそれを回避することができる。計算時間が最短になるように触媒をくわえたばあいにも、局所最大点をさけるために FAM が必要になるかもしれない。FAM のかわりに SA をつかうこともかんがえられるが、おそらく FAM のほうがよいであろう (これは実験でたしかめられるべきである)。しかし、前章でのべたように FAM もまだ不十分だとかんがえられる。FAM を改良するか、またはよりよい方法を見つける必要がある。

つぎに最適化のばあいについてかんがえる。触媒の添加はこれまでの例題つまり巡回セールスマン問題や整数計画問題などにおいては効果がなかった。その理由は、これらの問題においてはマクロな平均秩序度とミクロな平均秩序度とのあいだに競合性がない、つまり後者が増加するときにはかならず前者も増加するからである。トンネリングは、前述のように整数計画問題において効果がたしかめられている。このばあい、前章でしめた SA よりトンネリングのほうがはるかに性能がよいことがたしかめられている。最適化に FAM が適用できないことは、すでにのべたとおりである。

以上のように制約充足のばあいと最適化のばあいとで、各方法の効果が大きくことになっている。そ

^{注9} Mac Quadra 840 AV 上の SOOC 処理系で 1 回だけ測定。

^{注10} ただし、どのようなバタを触媒としてくわえるかによって性能が変化する。たとえばグラフ彩色のばあい、触媒として隣接点をつかうと向上するが、隣接しない点をくわえても無意味である。

の理由は十分あきらかにはなっていないが、基本的には問題の局所性(どれだけ局所的な計算で解がもとめられるか)からきているとかんがえられる。すなわち、制約充足問題は(CCMでとくためにはそれを一種の最適化問題としてあつかってはいるものの)局所的な計算に適した問題であるのに対して、最適化問題をとくには大域的な情報が必要だということと関係しているとかんがえられる^{註11}。

5. 結論

この報告では創発的計算のための計算モデルCCMによる問題解決における計算と探索空間内での局所性の制御法についてのべた。とくに、ラストレーション蓄積法(FAM)については、ここではじめて報告した。

比較の結果、制約充足問題のばあいには触媒の加減が有効であり、FAMも有効であることがわかった。ただし、これらの方法だけでは従来のシミュレートッド・アニーリングなどの方法に、彩色問題においては計算時間のうえでまടることができないこともわかった。また、最適化問題のばあいにはトンネリングすなわち反応規則の動的な合成が、他の方法より有効であることがわかった。

しかし、ここでのべた4つの方法についての研究もまだ十分ではないし、これら以外の方法もかんがえていく必要がある。これらは今後の課題となる。

参考文献

- [Bar 81] Barr, A., and Feigenbaum, E. A. 編.: 人工知能ハンドブック 第I巻, 共立出版, 1983.
- [For 91] Forrest, S., ed.: *Emergent Computation*, MIT Press, 1991.
- [Joh 91] Johnson, D. S., Aragon, C. R., McGeoch, L. A., and Schevon, C.: Optimization by Simulated Annealing: An Experimental Evaluation; Part II, Graph Coloring and Number Partitioning, *Operations Research*, 39:3, 378-406, 1991.
- [Kan 92] 金田 泰: コンピュータによる自己組織系のモデルをめざして, 第33回プログラミング・シンポジウム報告集, 1992.
- [Kan 93a] 金田 泰: プロダクション規則と局所評価関数による最適化, 第11回計測自動制御学会システム工学的な問題解決においては最適化問題というかたち^{註11}に定式化することがおおい。しかし、これによって本来は必要なかった大域的な情報が必要になり、問題解決が困難になるばあいがあるようにおもわれる。このような問題解決においては、CCM(にかぎらず創発的な計算法)が従来の方法にまさる可能性があるとかんがえられる。
- テム工学部会研究会, 27-34, 1993.
- [Kan 93b] 金田 泰: 確率過程としての計算 — 計算過程のマクロ・モデルの必要性和その例 —, 電子情報通信学会コンピュータセッション研究会/ソフトウェアサイエンス研究会, COMP92-93, SS92-40, 1-10, 1993.
- [Kan 93c] 金田 泰, 廣川 真男: プロダクション規則と局所評価関数による制約充足問題の解法, 情報処理学会記号処理研究会, 93-SYM-68-2, 9-16, 1993.
- [Kan 93d] 金田 泰: プロダクション規則と局所評価関数にもとづく計算モデルCCMによる問題解決法の特徴, *SWoPP '93* (情報処理学会人工知能研究会), 93-AI-89-2, 11-20, 1993.
- [Kan 94a] Kanada, Y., and Hirokawa, M.: Stochastic Problem Solving by Local Computation based on Self-organization Paradigm, *27th Hawaii International Conference on System Sciences*, 82-91, 1994.
- [Kan 94b] 金田 泰: プロダクション規則の合成による記号的ランダム・トンネリング — 計算モデルCCM*による制約充足と最適化 —, 計測自動制御学会システム第14回工学分科会研究会“組合せ問題とスケジューリング問題の新解法,” 45-52, 1994.
- [Kan 94c] 金田 泰: 創発的計算のためのモデルCCMによる動的なグラフ彩色, 人工知能学会並列人工知能研究会資料SIG-PPAI-9401, 7-12, 1994.
- [Lev 85] Levy, A. V., and Montalvo, A.: The Tunneling Algorithm for the Global Minimization of Functions, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 6:1, 15-29, 1985.
- [Mik 94] 三上 貞芳, 嘉数 侑昇: マルチエージェント強化学習による交通信号機群の制御, 日本機械学会第71期通常総会講演会, I, 126-128, 1994.
- [Mor 93] Morris, P.: The Breakout Method For Escaping From Local Minima, *AAAI 93*, 40-45, 1993.
- [Sel 93a] Selman, B., and Kautz, H.: Domain-Independent Extensions to GSAT: Solving Large Structured Satisfiability Problems, *IJCAI 93*, 290-295, 1993.
- [Sel 93b] Selman, B., and Kautz, H. A.: An Empirical Study of Greedy Local Search for Satisfiability Testing, *AAAI 93*, 46-51, 1993.
- [Shi 93] 鳥 孝司: 徐冷型ランダム・トンネリング・アルゴリズムによる大域最適化, 計測自動制御学会論文集, 29:11, 1342-1351, 1993.
- [Yao 89] Yao, Y.: Dynamic Tunneling Algorithm for Global Optimization, *IEEE Trans. on Systems, Man, and Cybernetics*, 19:5, 1222-1230, 1989.
- [Yug 94] 湯上 伸弘, 太田 唯子, 原 裕貴: 階層型山登り法: 制約充足問題の高速な解法, 情報処理学会第48回全国大会, 3N-3, 3-5-6, 1994.