

相互作用を考慮した同時行動選択の 量子計算による決定方法の提案

浦田 淳司¹

¹正会員 東京大学大学院 工学系研究科 (〒 113-8656 東京都文京区 7-3-1)
E-mail: urata@bin.t.u-tokyo.ac.jp

本研究では、相互作用ネットワーク下にあるエージェントの同時行動選択確率を算出するための計算アルゴリズムの提案を行った。相互作用がある場合、同時行動選択の組合せ数はエージェント数のべき乗となり、同時選択確率算出はNP困難となる。そのため、既存エージェントシミュレータでは、相互作用を考慮した同時行動選択を扱うことができなかった。本研究では、同時選択確率の最大化問題を制約なし2値変数2次形式最適化問題に変換し、量子計算によって最大同時選択確率を示す行動組合せを得ることができる手法を提案した。また、近似変換により、同時選択確率を個別選択確率へと分解する方法を示し、その求解アルゴリズムを示した。

Key Words : *Social Interaction, Quantum Computing, Behavior Loading*

1. はじめに

これまでの交通需要予測においては、平常時の出発時刻選択、目的地選択、交通手段選択、経路選択というトリップを表現するための代表的な選択問題を中心に研究が進められてきた。これは、交通ネットワークの計画策定には、定常的な状態を想定し、日々の主要なトリップの再現が必要であるためである。一方で、近年、交通計画の対象が広場スケールの空間計画やMicro Transit (デマンド型のミニバス等)となる場合も増えている。例えば、道路空間再配分や相乗りサービス、自動運転といった施策・サービス・新技術の評価には、従前の主要な活動者の代表的な行動選択を予測する手法では不十分となりつつある。また、大規模自然災害への備えも求められており、災害直後や復旧期の交通行動は、当然、定常状態を想定した交通行動の予測技術では表現しきれない。

こうした背景の下、非均衡的な時々刻々と変わる状況における意思決定のモデリングが必要である。災害避難や復旧期は、明らかに状況が刻々と変化しており、動的な状況下での意思決定が行われている¹⁾。また、日常においても、歩行者の二次元経路選択やドライバーの車線選択、シェアリングサービスの利用選択等のシーンは、その日・その時間のみに見られる状況であり、非定常下での意思決定である。上記のシーンにおいて、非定常である主な要因は、意思決定に影響を与える周辺他者が異なっていることにある。他者からの行動をみながら意思決定する状況において^{2),3),4)}、他者の性質や行動は逐時違っており、意思決定者には相応の時々刻々

の選択が必要となる。つまり、他者からの相互作用を表現することで、こうした動的な意思決定のモデリングの可能性も広がるといえよう。

相互作用のモデリングやその行動選択決定方法には課題が多い。社会的相互作用を扱ったモデル^{6),5)}のうち、効用最大化モデルを基に他者群の影響(グローバルインタラクション)を評価し、駐輪行動⁷⁾や買い物行動⁸⁾のモデル分析や小規模なネットワークでの1対1の影響(ローカルインタラクション)を考慮した避難開始選択のモデル分析²⁾は存在するものの、数少ない。また、こうした研究も行動分析にとどまっており、相互作用を評価したアクティビティシミュレーションはさらに少ない。筆者の知る限りでは、世帯内の送迎等のスケジューリングがCEMDAP⁹⁾に組み込まれているのみであり、空間的に近くにいる他者等との相互作用を評価したシミュレータはない。また、マルチエージェントシミュレータにおいて、作用を受ける他者の“存在”を説明変数として評価する場合はあるものの、他者の次の行動予測を取り入れたモデル構造にはなっていない場合がほとんどである。つまり、(非相互的に)他者の作用を扱っているのみである。

相互作用を考慮した行動モデルの実装が困難となる主な理由として、計算コストの問題がある^{10),11)}。ローカルインタラクション型の相互作用モデルを導入した行動選択確率を用いて、アクティビティシミュレータ上でローディングする際には、意思決定者全員の同時選択確率を算出する必要がある。同時選択の組合せ数は選択枝数の人数乗であり、最尤となる同時選択確率の算出の計算コストはNP-hardとなる。そのため、都市

規模のシミュレーションにおいて、インタラクションが広範囲に繋がる相互作用を考慮した計算は困難である。

本研究では、相互作用を考慮した同時行動選択の計算方法を提案する。これまでの研究^{10),11)}とは異なり、社会的相互作用モデルを近似せずに、最大確率となる行動組合せを得る方法を提案する。イジングモデル型に選択確率の式を変換することで、量子計算を可能とし、組合せ最適化問題を求解することができる。

2. 量子計算による組合せ最適化問題の求解

まず、既存研究^{12),13)}を参考に、組合せ最適化問題の量子アニーリングマシンによる求解方法について、概説する。最適化問題には、制御変数（決定変数）が連続量の問題（線形／非線形計画問題）と離散量の問題（整数計画問題）がある。組合せ最適化問題は整数計画問題に属する。組合せ最適化問題では、複数の制御変数の選択肢のうち、目的関数を最大化する組合せを求める最適化問題である。組合せ最適化問題は、制御変数の数が増えるほど、解候補の組合せが増えるため、組合せ爆発を起こし、最適解の求解が困難になる。

量子アニーリングマシンにより組合せ最適化問題の解を得るにあたり、最適化問題をイジングモデルに再定式化する必要がある。量子計算機は、問題を物理現象に写像し、自然現象に備わる収束動作を実行・観測することで解を得るナチュラルコンピューティング技術を用いており、計算実行には再定式化が求められる。量子アニーリングマシンは、イジングモデルに対して量子揺らぎとして横磁場効果を導入し、その磁場を徐々に弱めていくという計算方法を採用し、基底状態（安定状態）を求める。組合せ最適化問題をイジングモデルに置き換えることで、元の問題の最適解は、イジングモデルのエネルギー最小解（基底状態）と一致する。イジングモデルのエネルギー関数は、量子のスピン変数 $s_i (i = 1, \dots, N)$ を二値 ($s_i = \pm 1$) として、

$$E_{ising}(\{s_i\}) = - \sum_{i \in V} h_i s_i - \sum_{ij \in E} J_{ij} s_i s_j \quad (1)$$

と記述でき、 V は無向グラフ G のノード、 E はリンクを表す。グラフ G 内にあるすべてのノード（量子）とリンク（量子間の相互作用）により、エネルギー関数を決定する。なお、 $|V| = N$ であり、 h_i, J_{ij} はパラメータである。式 (1) は、二値が 0, 1 をとるバイナリ変数 a_i の場合も等価に変換でき、

$$E_{QUBO}(\{a_i\}) = - \sum_{i \in V} l_i a_i - \sum_{ij \in E} m_{ij} a_i a_j \quad (2)$$

$$\left(a_i = \frac{s_i + 1}{2}, h_i = \frac{l_i}{2} + \frac{1}{4} \left(\sum_{j \in \partial_i} m_{ij} \right), J_{ij} = \frac{m_{ij}}{4} \right)$$

となる。なお、 l_i, m_{ij} はパラメータ、 ∂_i はノード i の隣接ノード集合を示す。式 (2) の最適化問題は、Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO: 制約なし 2 値変数 2 次形式最適化) と称される。厳密には、QUBO は

$$\min_a (\text{or } \max_a) E = a^t Q a \quad (3)$$

と、全ての制御変数 a を二次式で表す必要があるが、式 (2) の一次項は、 $a_i = a_i^2$ と等価に置き換えることができ、QUBO による定式化が可能となる。

以上より、組合せ最適化問題を、QUBO により定式化できれば、量子計算機で計算可能であることを示した。しかしながら、QUBO は制約条件なしの最適化問題であり、組合せ問題が制約条件を持つ場合は、ペナルティ関数等の導入により、問題を制約なしの問題に変換する必要がある。その方法については、既往文献^{13),14)}を参照されたい。また、二値以外の離散制御変数がある場合も、二値変数に置き換えることで求解できる。なお、量子計算機のシステム構成にも依存するが、量子計算において相互作用リンクが多いほど計算コストが高くなってしまいう問題¹⁵⁾や、計算機の計算可能な量子数には上限により求解できる制御変数の数に制約があるといった問題がある。現在利用できる量子計算機における計算時間が、ノイマン型計算機と対象の組合せ最適化問題に適した計算アルゴリズムを用いて計算した場合よりも、必ず短くなるわけではないことに留意されたい。

3. 相互作用下の選択確率の導出

(1) 問題のフレームワーク

本研究では、1. で述べたように、相互作用ネットワークの下でのエージェントの行動選択確率の導出を行う。マルチエージェントシミュレータにおいて、相互作用を受けるエージェントの行動選択を決定する際、相互作用ネットワーク下の全エージェントの行動を選択確率に応じて決定する必要がある。相互作用が働いている状態では、互いの選択に相手の行動選択が依存するため、行動選択の同時選択問題となる。連結ネットワークで接続するエージェント数が N で、エージェントの選択枝数が 2 の場合、全エージェントの行動組合せの数は 2^N となる。つまり、 2^N 個の同時選択確率が存在しうる。これは NP-hard であり、確率的にエージェントの行動を選ぶ場合でも、指数時間の計算時間がかかることになり、実規模のシミュレーション計算は一般に困難である。

この相互作用下での同時確率配分問題に対して、本研究では、二つの計算手法を提案する (図 1)。一つは、問題の QUBO 化を行い、量子計算によって最大確率の

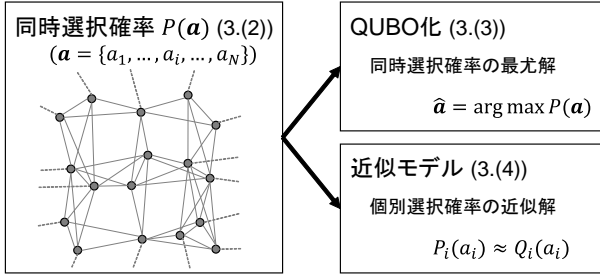


図-1 提案する配分計算手法

算出を得る計算手法である。この計算手法では、同時選択確率を最大にする行動組合せ $\hat{\mathbf{a}}$ を得ることができ、確率的な計算シミュレーションにおいても、確率が最大となる行動を選択し、配分計算を行う方法は一般にありえる。もう一つの計算手法は、同時選択確率を近似した個別の選択確率を得る計算手法である。この二つ目の計算手法では、個別の選択確率 $Q_i(a_i)$ を得ることができる。個別の選択確率を得られれば、モンテカルロアプローチにより、確率的な配分計算を行うことができる。

(2) 同時選択確率の定式化

次項以降で、同時選択確率の QUBO への変換および確率伝播法アプローチを用いた確率近似の定式化を行う準備として、相互作用下での同時選択確率の定式化を行う。本定式化では、同時選択確率を、ネットワーク上でリンクをもつエージェント i, j に関して対称なポテンシャル関数 $W_{ij}(a_i, a_j)$ により表すことを目指す。真の同時確率 $P(\mathbf{a})$ は、ポテンシャル関数を用いて、

$$P(\mathbf{a}) = \frac{\prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j)}{\sum_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}} \prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j)} \quad (4)$$

と定義する。なお、行動主体 $i (1 \leq i \leq N)$ の選択を a_i とし、 \mathbf{a} は全主体の行動選択の結果、 B は全無向リンクの集合、分母は正規化定数であり、 \mathbf{A} は全主体の行動選択の組合せ \mathbf{a} の全組合せを示す。

式 (4) とローカルインタラクションモデル⁶⁾ による選択確率の対応を説明する。ローカルインタラクションモデルでは個人 i の選択肢 $a (= \{0, 1\})$ の効用 V を

$$\begin{aligned} V(a_{it}, \mu_{it}(a_{-it}), \epsilon_{it}(a_{it})) \\ = u(a_{it}) + S(a_{it}, \mathbf{a}) + \epsilon_{it}(a_{it}) \end{aligned} \quad (5)$$

と社会的効用 S 、個人効用 u 、誤差項 ϵ を用いて、定義する。社会的効用 S は、Brock and Durlauf (2001)⁶⁾ より、

$$S(a_{it}, \mathbf{a}) = -E \sum_{j \in c_{it}} J_{ijt}(a_{it} - a_{jt})^2 \quad (6)$$

とする。 J_{ijt} は選択主体 i が他者 j から受ける影響の重み、 c_{it} は個人 i が影響を受ける周辺他者の集合である。

ここで、社会的効用は自分と (相互作用を持つ) 他者の行動選択に差異がある場合に生じる不効用である。個人 i が a_{it} を選択する確率 $P_{it}(a_{it})$ は、誤差項に i.i.d ガンベル分布を仮定すれば、

$$P_i(a_{it}) = \frac{\exp(u(a_{it}) - E \sum_{j \in c_{it}} J_{ijt}(a_{it} - a_{jt})^2)}{\exp(u(a_{it}) + S(a_{it}, \mathbf{a})) + \exp(u(a'_{it}) + S(a'_{it}, \mathbf{a}))} \quad (7)$$

となる。なお、本研究は二項選択問題を仮定しており、 $a'_{it} \neq a_{it}$ とする。式 (7) の分子は、

$$\prod_{j \in c_{it}} \exp\left(\frac{u(a_{it})}{|c_{it}|} - \frac{J_{ijt}}{|c_{it}|}(a_{it} - a_{jt})^2\right) \quad (8)$$

と等価に変換できる。なお、以降は、簡略化のため、時刻 t の表記は省略する。ポテンシャル関数を、式 (7) を参考に、

$$\begin{aligned} W_{ij}(a_i, a_j) &= \exp\left(\frac{u(a_i) - J_{ij}(a_i - a_j)^2}{|c_i|}\right) \\ &\times \exp\left(\frac{u(a_j) - J_{ji}(a_i - a_j)^2}{|c_j|}\right) \end{aligned} \quad (9)$$

と定義する。ローカルインタラクションモデルによる全主体の選択 $P(\mathbf{a}) = \prod_i P_i(a_i)$ であり、その分子は、

$$\begin{aligned} &\prod_{\forall i} \left(\prod_{j \in c_i} \exp\left(\frac{u(a_i)}{|c_i|} - \frac{J_{ij}}{|c_i|}(a_i - a_j)^2\right) \right) \\ &= \prod_{ij \in B} \left(\exp\left(\frac{u(a_i)}{|c_i|} - \frac{J_{ij}}{|c_i|}(a_i - a_j)^2\right) * \right. \\ &\quad \left. \exp\left(\frac{u(a_j)}{|c_j|} - \frac{J_{ji}}{|c_j|}(a_j - a_i)^2\right) \right) \\ &= \prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j) \end{aligned} \quad (10)$$

となる。式 (4) および (7) の分母はどちらも確率の和を 1 にするための正規化定数である。ローカルインタラクションの個人の選択確率式 (7) を基にした同時選択確率 $\prod_i P_i(a_i)$ は、ポテンシャル関数による同時選択確率式 (4) と一致する。

(3) 同時確率配分問題の QUBO への変換

次に、同時確率の厳密式 (4)(9) の最大化問題を QUBO に変換する。量子コンピュータで組合せ最適化問題を解く場合、目的関数を QUBO の形式に変換する必要がある。エージェントの組合せ選択の真の同時確率 $P(\mathbf{a})$

の最適化問題は、

$$\begin{aligned}
\max_{\mathbf{a}} P(\mathbf{a}) &= \max_{\mathbf{a}} \frac{\prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j)}{\sum_{\mathbf{z}} \prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j)} \\
&\Rightarrow \max_{\mathbf{a}} \prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j) \text{ (分子のみ)} \\
&\Rightarrow \max_{\mathbf{a}} \sum_{ij \in B} \log(W_{ij}(a_i, a_j)) \text{ (対数化)} \\
&\Leftrightarrow \max_{\mathbf{a}} \sum_{ij \in B} \left(\log \left(\exp \left(\frac{u(a_i) - J_{ij}(a_i - a_j)^2}{|c_i|} \right) \right) \right. \\
&\quad \left. + \log \left(\exp \left(\frac{u(a_j) - J_{ji}(a_i - a_j)^2}{|c_j|} \right) \right) \right) \\
&\Leftrightarrow \max_{\mathbf{a}} \sum_{ij \in B} \left(\frac{u(a_i) - J_{ij}(a_i - a_j)^2}{|c_i|} \right. \\
&\quad \left. + \frac{u(a_j) - J_{ji}(a_i - a_j)^2}{|c_j|} \right) \quad (11)
\end{aligned}$$

と変換できる。さらに、効用 $u(a_i)$ は、 $a_i = 0$ の時の効用 u_{i0} と $a_i = 1$ の時の効用 u_{i1} を用いて、

$$\begin{aligned}
u(a_i) &= a_i u_{i1} + (1 - a_i) u_{i0} = a_i^2 u_{i1} + (1 - a_i^2) u_{i0} \\
&= (u_{i1} - u_{i0}) a_i^2 + u_{i0} \quad (12)
\end{aligned}$$

と定式化できる。 \mathbf{a} の最大化問題である式 (11) において、 a_i の関数ではない式 (12) の第二項は無視でき、最適化問題 (11) は、

$$\begin{aligned}
\max_{\mathbf{a}} \sum_{ij \in B} \left(\left(\frac{u_i - J_{ij}}{|c_i|} - \frac{J_{ji}}{|c_j|} \right) a_i^2 + \left(\frac{2J_{ij}}{|c_i|} + \frac{2J_{ji}}{|c_j|} \right) a_i a_j \right. \\
\left. + \left(\frac{u_j - J_{ji}}{|c_j|} - \frac{J_{ij}}{|c_i|} \right) a_j^2 \right) \quad (13)
\end{aligned}$$

となる。なお、 $u_i = u_{i1} - u_{i0}$ とする。最大化問題 (13) は QUBO となっている。以上より、相互作用下の同時選択確率を最大化する全主体の行動選択 $\hat{\mathbf{a}}$ を量子アニーリングにより求解可能であることを示した。

(4) 近似モデルによる個別選択確率

次に、浦田ら^{10),11)}で示した他者相関の近似により、同時選択確率を独立した個別選択確率へと変換する式変形を説明する。なお、この変形は、情報統計力学における確率伝搬法のアプローチ^{16),17)}を援用している。

まず、ローカルネットワークの近似の考え方を図-2を用いて説明する。図-2は、赤丸で示した個人に対するインタラクションの捉え方のイメージを示している。図左のローカルインタラクションモデル⁶⁾では、接続したインタラクションをすべて評価することで、結果としてネットワークに含まれる全員からの影響を個人の意思決定に反映する。結果として、個人の意思決定の選択確率は互いに従属するため、前述した同時選択確率の算出にあたっての課題が生じる。対して、図右のグローバルインタラクションモデル⁶⁾では、意思決定者

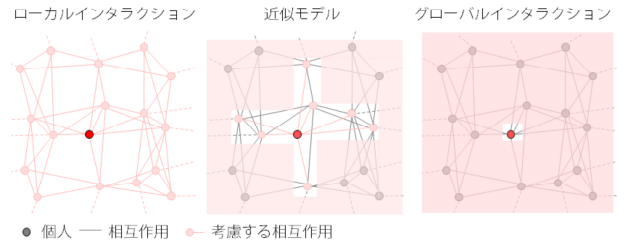


図-2 インタラクションの近似

以外の選択確率をまとめて評価し、個人の意思決定への影響として反映する。結果として、相互作用を受ける対象は自分以外の他者集合1つであり、同時選択確率の導出は可能である。図中央の(本研究で導入する)近似モデルにおいては、他者の選択確率とは独立した個人の選択確率を定義する。個人の選択確率には、直接リンクする他者の影響は反映されるが、それ以外の他者については明示的には反映されない。

導出にあたり、試行確率関数 $Q(\mathbf{a})$ を導入し、その周辺確率分布は、

$$Q_i(a_i) \equiv \sum_{\mathbf{z}} \delta_{a_i, z_i} Q(\mathbf{z}) \quad (14)$$

$$Q_{ij}(a_i, a_j) = Q_{ji}(a_j, a_i) \equiv \sum_{\mathbf{z}} \delta_{a_i, z_i} \delta_{a_j, z_j} Q(\mathbf{z}) \quad (15)$$

とする。なお、 δ_{a_i, z_i} は $a_i = z_i$ のときのみ1となるクロネッカーのデルタである。試行確率 $Q_i(a_i)$ は、他のノードの周辺確率分布に対して独立している。この試行関数 Q について、真の同時選択確率 $P(\mathbf{a})$ に対するカルバック・ライブラー情報量 $KL(Q||P)$ (以下、KL) を導入する。

$$KL(Q||P) = \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \ln \frac{Q(\mathbf{z})}{P(\mathbf{z})} \quad (16)$$

また、 $Q(\mathbf{a})$ を周辺確率分布を用いて、

$$Q(\mathbf{a}) = \left(\prod_{i \in \Omega} Q_i(a_i) \right) \left(\prod_{ij \in B} \frac{Q_{ij}(a_i, a_j)}{Q_i(a_i) Q_j(a_j)} \right) \quad (17)$$

という形に制限する。これは、 $Q(\mathbf{a})$ が個人の生起確率 $Q_i(a_i)$ と二者の同時生起確率 $Q_{ij}(a_i, a_j)$ のみで表現できるという仮定の上で、成り立つ。これらを確率の総和が1になる制約、同時生起確率 $Q_{ij}(a_i, a_j)$ と生起確率 $Q_i(a_i)$ の関係を制約とし、ラグランジュ未定乗数法を用いて展開し、次の選択確率が得られる。

$$\hat{Q}_i(a_i) = \frac{1}{Z_i} \prod_{i' \in c_i} \lambda_{i' \rightarrow i}(a_i) \quad (i \in \Omega) \quad (18)$$

$$\begin{aligned}
\hat{Q}_{ij}(a_i, a_j) &= \frac{1}{Z_{ij}} \left(\prod_{i' \in c_i \setminus \{j\}} \lambda_{i' \rightarrow i}(a_i) \right) W_{ij}(a_i, a_j) \\
&\quad \times \left(\prod_{j' \in c_j \setminus \{i\}} \lambda_{j' \rightarrow j}(a_j) \right) \quad (ij \in B) \quad (19)
\end{aligned}$$

となる。なお、規格化定数 Z_i, Z_{ij} は、

$$Z_i = \sum_{z_i} \prod_{i' \in c_i} \lambda_{i' \rightarrow i}(z_i) \quad (20)$$

$$Z_{ij} = \sum_{z_i} \sum_{z_j} \left(\prod_{i' \in c_i \setminus (j)} \lambda_{i' \rightarrow i}(z_i) \right) W_{ij}(z_i, z_j) \times \left(\prod_{j' \in c_j \setminus (i)} \lambda_{j' \rightarrow j}(z_j) \right) \quad (21)$$

である。ここでは $\lambda (> 0)$ は未定乗数法を用いた際の未定乗数により定義され、解となる独立確率 $\hat{Q}_i(a_i)$ を得るための未知変数である。 $\lambda_{j \rightarrow i}(a_i)$ は有向であり、その数は $2|B||a_i| (= 4|B|)$ である。 λ は、

$$\lambda_{j \rightarrow i}(a_i) = \frac{Z_i}{Z_{ij}} \sum_{z_j} W_{ij}(a_i, z_j) \prod_{j' \in c_j \setminus (i)} \lambda_{j' \rightarrow j}(z_j) \quad \forall i, j \quad (22)$$

で示され、 $2|B||a_i|$ 本の非線形連立方程式を解くことで求解できる。

4. 相互作用下行動選択の配分アルゴリズム

(1) 量子アニーリングによる最大同時確率の算出

2. で説明した通り、量子アニーリングマシンはナチュラルコンピューティング技術を用いて、計算を実行している。つまり、イジングモデルに対して量子揺らぎを導入した横磁場効果を導入し、その磁場を徐々に弱めていくことで基底状態に到達するスピンを得る。式 (13) は QUBO となっており、特別なアルゴリズムを検討することなく、最適解を得ることができる。

(2) 近似確率の算出

a) 求解アルゴリズム

非線形連立方程式の求解アルゴリズムとして、最も単純な反復法を適用する。まず、式 (22) の左辺と右辺の差分を $\lambda_{j \rightarrow i}$ で割り、

$$f_{ij, a_i}(\lambda) = 1 - \frac{Z_i}{\lambda_{j \rightarrow i}(a_i) Z_{ij}} \times \sum_{z_j} W_{ij}(a_i, z_j) \prod_{j' \in c_j \setminus (i)} \lambda_{j' \rightarrow j}(z_j) \quad \forall ij \quad (23)$$

と置く。これを用い、 $\mathbf{f}(\lambda^*) = \mathbf{0}$ となる λ^* を求める。具体には、 $\|\mathbf{f}(\lambda^k)\|$ を最小化する微分方向への更新を繰り返すため、

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k + \alpha_k \frac{\mathbf{d}^k}{\|\mathbf{d}^k\|} \quad (24)$$

$$\mathbf{d}^k = - \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \lambda^k} \right)^{-1} \mathbf{f}(\lambda^k) \quad (25)$$

により、 $k+1$ 回目の更新を行う。なお、 α_k は線形探索の結果から得られる正のパラメータである。ただし、 $\left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \lambda^k} \right)$ は \mathbf{f} のヤコビアン行列であり、本研究では BFGS 公式を用いて算出する。最終的には、 $\|\mathbf{f}(\lambda^k)\| < H$ と $\mathbf{f}(\lambda^k)$ が十分に $\mathbf{0}$ に近づいた段階で更新探索を終了す

る。閾値 H は 0 に十分近い正の値とする。また、条件 $\lambda > 0$ を明示的に考慮しておらず、また、 $\lambda = \mathbf{0}$ は解となってしまう。 $\lambda = \mathbf{0}$ を解として得ることを避けるため、ある $\lambda_{j \rightarrow i}(a_i)$ で式 (23) を割り、かつ $\lambda^0 > 0$ となる初期値を与え、更新探索を行う。なお、偏微分 $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \lambda^k}$ の導出は、付録 I で説明する。

対象とする問題は非線形連立方程式の求解であり、問題は明らかに非凸であるため、局所解回避のアルゴリズムが必要である。つまり、式 (24)(25) の更新探索過程のみでは、局所解に陥った場合に抜け出すことができない。局所解を抜け出すための工夫として、メタヒューリスティクス¹⁸⁾における改悪解を許す焼きなまし法と反復局所誘導探索法の考え方を援用する。具体には、 k 回目までの最小の $\|\mathbf{f}(\lambda^k)\|$ の値 \mathbf{f}_{\min}^k を $k+K$ 回目までに更新できなかった場合は、局所解に陥っていると判断し、最急降下方向 \mathbf{d}^{k+K} 以外の方向に λ^{k+K+1} を移動させる。これにより、一旦、 $\|\mathbf{f}^{k+K+1}\|$ は増加するが、この後の更新過程において局所解を離脱しうる。また、移動先は乱数を用いて決定し、移動幅 $\|\lambda^{k+K+1} - \lambda^{k+K}\|$ の最大値は \mathbf{f}_{\min}^k に応じて、小さくする。これは、 \mathbf{f}_{\min}^k が小さい場合は、近傍に解があると想定するためである。一方で、改悪を許した更新過程を行っても \mathbf{f}_{\min}^k が更新できなかった場合は、 $\lambda^{k+A} = \lambda_{\min}^k$ とし、一旦、最小値を記録した λ_{\min}^k に λ を戻し、更新探索過程を再開する。つまり、 $A (> K)$ 回の更新探索を行っても最小値を更新できなかった場合は、改悪を許す乱数更新を用いた更新が有効に機能しなかったと判断し、元の最小解の近傍を探索する。

b) 複数解の問題

求解アルゴリズムにより局所解を回避し、 $\|\mathbf{f}(\lambda^k)\| \approx 0$ を満たすある λ^k を得ることができる。ただし、非線形連立方程式は複数の解 (最大で $|B||a_i|$ 個) をもちうるため、得られた解はその解の一つに過ぎない。一方で、本研究で対象としている動的な意思決定過程における選択確率は一つあれば充分である。そこで、動的な意思決定過程においては、前時間帯の確率を初期値としてインプットし、当該時間帯の確率を求解すればよいと考える。これにより、前時間帯の近傍にある解を得ることができ、確率の妥当な推移を得ることができよう。なお、この場合においても、最初の時間帯における初期値の与え方については、課題が残る。

5. おわりに

本研究では、相互作用ネットワーク下にあるエージェントの同時行動選択確率を算出するための計算アルゴリズムの提案を行った。同時選択算出は指数時間計算量の問題であり、既存エージェントシミュレータでは、相

表-1 場合別の偏微分式

ケース	偏微分式
(1) $m = j, n = i, a_m = a_j$	$\frac{\partial f_{mn=ji, a_m=a_j}(\lambda)}{\partial \lambda_{i \rightarrow j}(a_j)} = \frac{Z_{mn} - \lambda_{n \rightarrow m}(a_m) Z_{mn} H_{mn}(a_m) \prod_{i' \in c_m \setminus n} \lambda_{i' \rightarrow m}(a_m)}{(\lambda_{n \rightarrow m}(a_m) Z_{mn})^2}$
(2) $m = j, n = i, a_m \neq a_j$	$\frac{\partial f_{mn=ji, a_m}(\lambda)}{\partial \lambda_{i \rightarrow j}(a_j)} = - \frac{H_{mn}(a_m) \prod_{i' \in c_m \setminus n} \lambda_{i' \rightarrow m}(a_m)}{\lambda_{n \rightarrow m}(a_m) Z_{mn}}$
(3) $m = j, n \neq i$	$\frac{\partial f_{mn=jn, a_m}(\lambda)}{\partial \lambda_{i \rightarrow j}(a_j)} = \frac{H_{mn}(a_m)}{\lambda_{n \rightarrow m}(a_m)} \frac{Z_j H_{mn}(a_j) \prod_{i' \in c_j \setminus i, n} \lambda_{i' \rightarrow j}(a_j) - Z_{jn} \prod_{i' \in c_j \setminus i} \lambda_{i' \rightarrow j}(a_j)}{(Z_{mn})^2}$
(4) $m \neq j, n = j$	$\frac{\partial f_{mn=mj, a_m}(\lambda)}{\partial \lambda_{i \rightarrow j}(a_j)} = \frac{Z_m}{\lambda_{n \rightarrow m}(a_m)} \frac{\frac{\partial Z_{mj}}{\partial \lambda_{i \rightarrow j}(a_j)} H_{mj}(a_m) - Z_{mj} W_{mj}(a_m, a_j) \prod_{i' \in c_j \setminus i, m} \lambda_{i' \rightarrow j}(a_j)}{(Z_{mn})^2}$ ただし, $\frac{\partial Z_{mj}}{\partial \lambda_{i \rightarrow j}(a_j)} = H_{nm}(a_j) \prod_{i' \in c_j \setminus i, m} \lambda_{i' \rightarrow j}(a_j)$
(5) 上記以外	$\frac{\partial f_{mn, a_m}(\lambda)}{\partial \lambda_{i \rightarrow j}(a_j)} = 0$

相互作用を考慮した同時行動選択を扱うことができなかった。本研究では、同時選択確率の最大化問題を QUBO に変換し、量子計算によって最大確率を得ることができる計算手法を提案した。また、近似変換により、同時選択確率を個別選択確率へと分解する方法を示し、その求解アルゴリズムを示した。

量子計算においては、量子間の相互作用ネットワークの形状により、計算コストは大きく異なる。そのため、実際に計算し、提案アルゴリズムの計算効率性を評価する必要がある。

謝辞：本研究は JSPS 若手研究 20K14844 の助成を受けたものです。

付録 I 4.(2) の近似確率算出の偏微分式

標記の簡略化のため、(23) 式において、 $H_{ij}(a_i) = \sum_{z_j} W_{ij}(a_i, z_j) \prod_{j' \in c_j \setminus (i)} \lambda_{j' \rightarrow j}(z_j)$ とし、差分関数

$$f_{mn, a_m}(\lambda) = 1 - \frac{Z_{mi}}{\lambda_{n \rightarrow m}(a_m) Z_{mn}} H_{mn}(a_m) \quad \forall mn$$

について、 m, n, a_m の組ごとの偏微分は表-1 の通りとなる。

参考文献

- 1) 浦田淳司, 羽藤英二, 柳沼秀樹: 将来効用の動学的異質性を考慮した避難開始選択モデルの構築, 土木学会論文集 D3, Vol. 72, No. 4, pp.261-277, 2016.
- 2) 浦田淳司, 羽藤英二: 豪雨災害時の避難開始選択における他者避難と人的ネットワークの影響評価, 土木学会論文集 D3, Vol. 73, No. 1, pp. 24-39, 2017.
- 3) 羽藤英二, 北川直樹, 原祐輔: 移動空間における歩行者と自動車の動的相互作用とそのモデル化, 第 30 回交通工学研究発表会論文報告集, pp.341-344, 2010.
- 4) 伊藤篤志, 柳沼秀樹, 羽藤英二: 構造推定を援用した車線変更相互作用モデルの推定, 第 34 回交通工学研究発表会論文報告集, pp. 615-620, 2014.
- 5) Brock, W. A., Durlauf, S. N.: Interactions-based models, Handbook of econometrics, Vol. 5, pp. 3297-3380, 2001.

- 6) 力石真, 瀬谷創, 福田大輔: 社会的相互作用に着目したミクロ計量経済分析の展開と土木計画への応用可能性, 土木計画学研究・講演集, Vol. 53, CD-ROM, 2016.
- 7) Fukuda, D., Morichi, S.: Incorporating aggregate behavior in an individual's discrete choice: An application to analyzing illegal bicycle parking behavior, *Transportation Research Part A*, Vol. 41, No. 4, pp. 313-325, 2007.
- 8) 力石真, 西川文人, 瀬谷創, 藤原章正, 張峻屹: 近隣住民間の社会的相互作用を考慮した買物目的地選択行動のモデル分析, 土木学会論文集 D3 (土木計画学), Vol. 72(5), pp. I595-I605, 2016.
- 9) Bhat, C. R., Goulias, K. G., Pendyala, R. M., Paleti, R., Sidharthan, R., Schmitt, L., Hu, H. H.: A household-level activity pattern generation model with an application for Southern California, *Transportation*, Vol. 40(5), 1063-1086, 2013.
- 10) 浦田淳司, 河瀬理貴, 井料隆雅: 日間・他者間依存性を考慮した滞在時間分布モデルによる動的交通需要の生成, 第 55 回土木計画学研究発表会, No. 18-01, 2017.
- 11) 浦田淳司, 井料隆雅: 社会的相互作用を考慮した行動モデルの数値シミュレーション手法の開発, 第 57 回土木計画学研究発表会, No. 07-01, 2018.
- 12) 田中宗, 棚橋耕太郎, 本橋智光, 高柳慎一 (2018). 量子アニーリングの基礎と応用事例の現状. 低温工学, 53(5), 287-294.
- 13) Glover, F., Kochenberger, G., Du, Y.: Quantum Bridge Analytics I: a tutorial on formulating and using QUBO models. *4OR*, 17(4), 335-371, 2019.
- 14) Lucas, A.: Ising formulations of many NP problems. *Frontiers in Physics*, Vol.2, Article 5, pp. 1-15, 2014.
- 15) Kuramata, M., Katsuki, R., Nakata, K.: Larger Sparse Quadratic Assignment Problem Optimization Using Quantum Annealing and a Bit-Flip Heuristic Algorithm, arXiv: <https://arxiv.org/abs/2012.10135>, 2020.
- 16) 田中和之: 確率モデルによる画像処理技術入門, 森北出版, 2006.
- 17) 田中和之: ベイジアンネットワークの統計的推論の数理, コロナ社, 2009.
- 18) 久保幹雄, J. P. ベドロソ: メタヒューリスティクスの数理, 共立出版, 2009.

Loading algorithm for Social Interacted Behaviors by Quantum Computing

Junji Urata