

年度 論文

日本語タイトル

English Title

03-200040

望月 陽介

Yosuke Mochizuki

東京大学工学系研究科

社会基盤学専攻

主査:

年月

概要

目次

概要	i
第 1 章 序論	1
1.1 研究の背景	1
1.2 研究の目的	2
1.3 構成	3
第 2 章 既往研究の整理	4
2.1 Activity-based Model	4
2.1.1 モデル分類と計算手法	4
2.1.2 交通需要制御とモデル検証	7
2.1.3 要素間相互関係	8
2.2 Bayesian Networks	9
2.2.1 Bayesian Networks の構造	10
2.2.2 Bayesian Networks の利用	10
2.2.3 Bayesian Networks の拡張	11
2.2.4 Bayesian Networks の構造推定	11
2.3 本研究の目的	11
第 3 章 対象問題と提案アルゴリズム	12
3.1 解空間を削減したグラフ推定手法	12
3.2 部分構造のスコアを考慮したモデル平均化	12
第 4 章 有効性検証	14
第 5 章 復旧期アクティビティシミュレータのパラメータ推定	15
第 6 章 結論	16
参考文献	17
謝辞	18

図目次

表目次

2.1	各計算要素の計算方法に基づく ABM の分類	5
-----	----------------------------------	---

第1章

序論

1.1 研究の背景

交通需要の予測のために、近年では Activity-based Model (ABM) の研究と開発が行われている。既存の四段階推定法が交通需要を集計的に、かつ複数の計算プロセスをそれぞれ予測する複数の独立したモデルの集合であるのに対して、ABM は交通需要を活動の派生需要として捉え、個人単位の活動スケジュールを一括で予測するモデルである [1]。これにより ABM は、計算プロセス間の整合性を図りつつ [1]、より詳細かつ複数の集計単位での分析を可能にしている。

一方で、多数の変数を扱う ABM は、その計算を行うために複雑なモデル構造を要する。ABM ではモデル内で行われる変数の計算プロセス（モデル構造と呼ぶ）により各個人の行動選択構造を記述し、活動スケジュールの生成を行なっている。ABM のモデル構造は、離散選択モデルや、ヒューリスティクスにより行動選択を模倣した計算プロセスといった既存の知識を部分構造とした集積であり [1]、選択する部分構造やその組み合わせにより、モデルの活動生成精度や計算性能は大きな影響を受ける。複数のモデル構造が提案される主な目的は、ヒューリスティクスや統計の知識を用いることで部分構造やモデルの全体構造を変更し、現実に近い個人の行動選択を記述することで、活動生成の精度を向上させることである [1]。加えて、モデルの用途に応じてより詳細な変数を扱う [1]、新たな種類のデータをデータ同化に用いる [1]、といった目的に応じて、モデル構造が提案・採用されてきた。既存・新規のモデルの中から適したモデル構造を選択することは、重要な課題である一方、試行錯誤を要する。試行錯誤によりモデル構造を選択・構築することは、低精度のモデルを採用する可能性やモデルの利用までに時間がかかる、データ同化手法が確立されないといった問題が挙げられている [1]。

モデル構造をデータに応じて選択する目的で、Bayesian Networks (BN) を用いる提案が ABM の分野で行われている。BN は、変数間の依存関係を有効非循環グラフ、Directed Acyclic Graph (DAG) の形で表現する確率モデル（グラフィカルモデル）の一種である。グラフ構造の推定を行うことで、データに応じて変数間の依存関係を表現することができ、系内の変数間関係が明らかでない～といった分野で用いられている [1]。ABM においても、Ma(2015)[1] により交通手段選択に影響を持つ変数の選択に用いられたことをはじめとして、近年では、多変数を生成する必要があるスケジュールの生成問題 [1] に対しても適用されている。BN を ABM として利用する利点は、データに応じたモデル構造の選択が可能であるという既存の ABM に対する利点に加えて、変数間の依存関係を明示的にモデル化することで、施策検証の際の説明性や利便性、モデル弾性が、近年発達する深層生成モデルに比べて高いことが挙げられる [1]。BN を ABM として採用することによって、一方で、多数の変数から成るスケジュールを精度良く生成する ABM として運用する上では、問題点も指摘されている。

一つの大きな課題は、グラフ構造の推定問題である。BN モデルを利用するためには、グラフ構造の推定問題と、エッジで結ばれた変数と変数の関係を記述するパラメータの推定問題の二つを解く必要がある。グラフ構造の推定問題は、変数をノードとする全ての DAG の集合の中から、データに対して最も適合するグラフ構造を選択する問題である。データに対する適合は、スコア関数を用いて評価することができ、BIC がスコアとして採用される [1]。これにより、グラフ構造の推定問題は、スコア関数を最大化する構造を見つける離散最適化問題として捉えられる。本問題は、探索するグラフ構造の数が非循環の制約を考慮しない場合には変数の個数 N を用いて指数計算量 2^{N^2} と表せる、NP 困難な問題であり、変数の数が増えると厳密解を得るアルゴリズムには多大な時間を要する [1]。このため、貪欲法を用いて局所解を探索するアルゴリズムの研究が進んでおり [1]、ABM として利用される際も、貪欲法により探索されたグラフ構造を採用している。しかしながら、貪欲法により得られる局所解は初期値に大きく依存しており、学習毎に異なるグラフ構造が出力されることが知られている [1]。最適でないグラフ構造を採用した場合、本来依存関係のある変数との関係を除外した、又は依存関係が逆に推定された BN モデルが採用される可能性がある。ABM の分野では、こうした BN モデルを採用した場合、スケジュール生成の精度だけでなく、施策検証時のモデル弾性が現実 (= データ) に即した値にならないという問題が生じる。そのため、初期値に依存せず、最適解に近いグラフ構造を高速に探索するアルゴリズムが必要である。

もう一つの課題は、ABM に採用されている既存の BN では、変数間の関係にはシンプルな線形関係しか表現できない点である [1]。ABM では、個人がスケジュールを構築する際のヒューリスティクスに準ずる、ルールベースの計算により、より現実 に即したスケジュールの生成を行なっている。時空間制約や、それに基づく活動のリサンプリングは、スケジュール生成の精度を向上させる主要な手法であり、多くの ABM で採用されている [1]。こうした既存知識に基づく計算手続きが導入されていない BN では、生成されたスケジュールに実行不可能、又は最後の活動目的地が自宅以外になるといった非現実的な活動が含まれる可能性がある。BN を ABM として利用する際には、既存知識の活用を組み込めるような構造を導入することにより、その生成するスケジュールを妥当なものにすることが、活動分析や施策評価の上で重要であることが考えられる。

1.2 研究の目的

本研究の目的は、BN を ABM として利用する際の課題を解決することである。

はじめに、BN のグラフ構造推定を高速に、かつ安定して行う手法を提案する。提案手法では、Object の上位概念に変数を格納することで、解空間を削減し、計算時間を短縮する。また、局所解の初期値依存問題を解決するため、モデル平均化の手法を提案する。パラメータ等の連続値に対して大きく発展しているモデル平均化であるが [1]、離散問題であるグラフ構造推定では、性能の良いモデル平均化の手法が確立されていない [1]。提案するモデル平均化手法では、グラフの部分構造とそのスコアを考慮して、高スコアな部分構造を採用することで、グラフの全体構造を選択する。

次に、ヒューリスティクスを導入できる ABM として BN を構築し、実データを用いた実証を行う。線形の確率関係に加えて、ヒューリスティクスに基づく操作を導入することで、生成される個々のスケジュールをより現実 に即したものとする。実データを用いた既存 BN、既存 ABM との比較を通して、提案する BN の ABM としての有効性を検証する。

1.3 構成

本論文の構成を、以下に示す。図にフレームワークを示した。

本章では、本研究の背景を述べ、それを踏まえた上で目的を示した。

第2章では、既往研究の整理と本研究の位置付けを行う。はじめに、既存の ABM について整理し、BN を ABM として用いる際の利点と課題を示す。既存の ABM については、主に採用されているモデル構造と事前知識の活用について整理する。その上で、BN を ABM として利用している研究を挙げ、その利点と課題を整理する。次に、BN のグラフ構造推定問題と推定手法について整理する。特に貪欲法による推定手法について、本研究で使用する、変数順序配列に基づき構造を探索する手法について整理し、それら手法の初期値依存性を触れる。また、グラフ構造推定問題における、モデル平均化の手法とその問題点について整理する。

第3章では、本研究で提案するグラフ構造推定手法について述べる。本研究では、Object の概念を導入した BN の拡張である、Object-oriented Bayesian Networks (OOBN) [1] を用いる。Object に変数を格納した BN において、変数順序配列に基づくグラフ構造推定手法 [1] を採用し、解空間を大幅に削減する手法を提案する。本提案手法は、初期値に依存する貪欲法解法である。そのため、複数の推定結果を統合するモデル平均化手法を次に提案する。提案手法では、グラフの部分構造を隣接行列の形式で入力し、その部分構造のスコアで条件付けたグラフ構造を出力する深層生成モデル [1] を用いて、高スコアな構造を生成する。その後、提案手法の有効性を、既存の BN のグラフ構造推定手法との比較を通して検証する。検証では、グラフ推定の正確性と計算時間といった BN 分野の指標に加えて、変数感度をはじめとする ABM 分野の指標を用いて、提案手法により得られたグラフ構造の有効性を検証する。

第4章では、ヒューリスティクスを導入した BN を構築し、ABM としての検証を、実データを用いて行う。Object 内に格納した変数を用いて、ルールベースの計算を BN による活動生成に導入する ABM を提案する。その後、既存の ABM との性能比較を通して、提案する ABM の有効性を検証する。性能比較では、東京 PT の実データを用い、これまで他の BN では行われていない詳細なスケジュール予測設定の元、スケジュール生成の精度を比較する。

最後に第5章では、BN の ABM としての表現力や計算性能についてまとめ、今後の課題を示す。

第 2 章

既往研究の整理

本章では、各個人の活動需要を予測生成する Activity-based Model(ABM) 及び提案手法に使われる機械学習理論について、手法と利用動向を整理し、本研究の位置付けを行う。

本研究では、複数の計算要素の相互関係を、ABM の体系の中でデータ駆動に反映し、施策検討の際にも考慮が可能な ABM の開発を目標とする。そのためには、既存の ABM が採用している活動需要の生成方法とデータ同化の手法のプログラムの中に、計算要素の相互関係を反映するための機能を内装する必要がある。そのため、初めに 2.1 節で ABM について整理した後、2.2 節以降で計算要素の相互関係を記述、推定する手法についてレビューを行う。

2.2 節で取り上げるグラフィカルモデルは、変数間の関係をグラフの形で記述する機械学習モデルであり、グラフ構造を推定することで解釈性や確率計算の速度の面で優れたモデルを構築できる。本モデルは ABM でも近年多く採用されており、変数間の関係を明示的に学習することに成功していることから、本研究の目的に合致しつつ利用可能性の高いモデルとしてレビューを行う。

2.1 Activity-based Model

Activity-based Model(ABM) は、活動の派生需要として移動を捉え、予測・生成するモデルである。交通の需要、配分分析として使われていた四段階推定の限界を克服するものとして研究が始まり、MATSim(Balmer et al., 2004) をはじめとして活動需要の生成から経路への配分まで全てを含むモデルも多く開発されている (Rasouli & Timmermans, 2014)。一方、研究の中ではモデル改善のため、活動需要を生成するためのモデルを独立して捉えることが多く、近年でも既存 ABM の枠組みに新しく開発した活動需要モデルを組み込む研究も多く見られる。本節では活動需要を生成する ABM について、その計算方法と利用法のレビューを行う。

2.1.1 モデル分類と計算手法

活動需要を生成する ABM は、その計算方法に基づいて主に 3 つの分類に区分される。近年ではこれらに加え、機械学習分野のモデルを生成モデルとして用いることで個人の活動需要を生成する研究が現れている。各分類の主な論文とモデルを表 2-1 に示す。

1. 計算プロセス型モデル
2. 離散選択型モデル
3. 制約ベースモデル

4. 機械学習分野モデル

一方, Tajaddini et al.(2020) が言及するように, 往年の3つの ABM は計算プロセス型のヒューリスティクスと離散選択型の確率モデルを組み合わせる形で構成されていることが多いことに注意したい. 表 2.1 に, ABM の主な計算要素の計算方法として, 本表の枠に当てはまる ABM が, どの種類を採用しているかを示す. ALBATROSS(Arentze & Timmermans, 2004) が計算プロセス型, Bowman & Ben-Akiva(1997) や PCATS(Kitamura & Fujii, 1998) が離散選択型の典型的な例として挙げられる一方で, TASHA(Miller & Roorda, 2003) や ADAPTS(Auld & Mohammadian, 2009) はヒューリスティクスに基づく活動生成を行いながらも, 部分的に確率モデルの採用を行なっている. 確率モデルの採用は, 計算プロセス型の課題となっている高計算コストやデータ同化の低再現性を緩和しうる拡張である. また, こうした計算方法の自由度は機械学習分野モデルの利用によっても向上している.

これを踏まえ, 各分類の計算方法について整理する.

計算プロセス型

計算プロセス型は, ある規則に基づいて生成する活動の特徴を決定する計算プロセスを組み合わせたモデルである. 活動生成の際の規則はヒューリスティクスに基づいて提案されており, 個人の意思決定を模倣する計算プロセスが構成されている.

包括的な計算プロセス型モデルとして, ALBATROSS(Arentze & Timmermans, 2004) が初めに挙げられる. ALBATROSS の活動生成手順を図 2-1 に示した. ALBATROSS では, スケジュールの枠に対して, 優先度順に活動を追加していくことで1日のスケジュールを生成する. その際, 図 2-1 のように活動の各要素(継続時間, 開始時刻, 移動手段, 活動場所)を順に, 制約に基づいて実行可能な選択集合からサンプリングすることで決定していく. 計算プロセスは重要な活動・要素から決定していくという意味決定を模倣するヒューリスティクスに基づいており, 計算プロセス型モデルを特徴付ける点である. その一方で, 実行可能な集合の作成と, 集合からのサンプリングには決定木が用いられている. 決定木は個人特性やスケジュール, 時空間制約を入力として, 活動の各要素についての選択結果を出力とする. このように, 計算プロセス型のモデルでも, 確率的な選択をモデル化するため, またはデータ同化のために確率モデルを部分的に採用している.

計算プロセス型モデルの中で, より確率モデルを取り入れたモデルとして, TASHA(Miller & Roorda,

表 2.1: 各計算要素の計算方法に基づく ABM の分類

計算要素	確率モデル	ヒューリスティクス
活動パターン生成	CEMDAP, ADAPTS, Bowman & Ben-Akiva, PCATS	ALBATROSS, TASHA
継続時間, 開始時間決定	CEMDAP, Bowman & Ben-Akiva, PCATS	ALBATROSS, TASHA, ADAPTS
目的地選択	CEMDAP, Bowman & Ben-Akiva, PCATS, TASHA, ADAPTS	ALBATROSS
交通手段選択	CEMDAP, Bowman & Ben-Akiva, PCATS, TASHA, ADAPTS	ALBATROSS

2003) が挙げられる。TASHA の計算プロセスを簡易的に示した図 2-2 の中で、活動場所と移動手段の選択において、離散選択型モデルで採用されるモデルが用いられている。活動の頻度や開始時刻、継続時間といった特徴も初めの計算プロセスで分布からサンプリングすることで生成しており、よりデータ同化を行いやすい。これら確率モデルでサンプリングされた活動をスケジュールの時間制約内に当てはめることで 1 日のスケジュールを生成しており、本モデル内においてヒューリスティクスは「個人のスケジュールが実現可能なものである」ことを保証するために用いられている。

離散選択型モデル

離散選択型のモデルは、個人が効用の最大化を達成する選択を行うという仮定の元、活動パターンを選択肢集合の中から生成するモデルである。

離散選択型モデルの構造は、Multinomial Logit Model(MNL モデル) をはじめとする離散選択モデルを拡張することで得られており、各個人の効用を、特徴量と推定パラメータから構成される確定項と特定の分布に従うランダム項に分解して表現する。MNL モデルはランダム項が相関のないロジット分布に従うと仮定するモデルであり、線形モデルにより選択肢 $i \in I$ の効用の確定項 V_i は式 (2.1)、選択確率 P_i は式 (2.2) として表される。Bowman & Ben-Akiva (2001) は誤差相関を加味した Nested Logit Model(NL モデル) を用いて、離散選択モデルに基づく ABS を開発した。式 (2.3) を例とする入子状の効用関数により、活動を評価する関数を

1. 活動パターン
2. 主活動の開始時刻
3. 主活動の活動場所と移動手段
4. 従属活動の開始時刻
5. 従属活動の活動場所と移動手段

の 5 段階の入れ子で表現した。 Λ_i は $j \in J$ に関する下位選択モデルのログサム変数であり、 $i \in I$ に関する上位選択モデルに、そのスケールパラメータ λ の大きさに応じた影響を与える。活動パターンはスケジュールを用いる計算プロセス型モデルのスケジュールに相当し、主活動の目的と従属活動の回数・目的、活動を行う場所 (home, work, other) の順列から成る。

$$V_i = \beta \cdot \mathbf{x}_i \quad (2.1)$$

$$P_i = \frac{\exp(V_i)}{\sum_{i' \in I} \exp(V_{i'})} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} V_i &= \beta \cdot \mathbf{x}_i + \lambda \Lambda_i \\ \Lambda_i &= \ln \sum_{j'} \exp(V_{i,j'}) \end{aligned} \quad (2.3)$$

離散選択型のモデルでは、活動の各要素について効用を表現する関数を定義することが多いが、Kitamura & Fujii (1998) の PCATS では、スケジュール中の n 個目の活動の活動目的 X_n ・継続時間 D_n ・活動場所 L_n ・移動手段 M_n についての同時確率として定式化し、活動を生成することを目的としている。 k 個の活動から成る 1 日のスケジュールを生成するための確率を、式 (2.4) のように分解することで、確率の推定や活動のサンプリングを行なっている。逐次的に活動をサンプルする方法により、時空間

制約の中で妥当な活動列を生成することに成功している．一方で同研究により開発された実際のモデルでは，式 (2.5) を例として同時確率を分解して考えており，最終的には NL モデルと同様に条件付き確率の計算により，同時確率の計算を置き換えている．

$$\Pr[\mathbf{X}, \mathbf{D}, \mathbf{L}, \mathbf{M}] = \prod_{i=0}^{k-1} \Pr[X_{i+1}, D_{i+1}, L_{i+1}, M_{i+1} | \tilde{X}_i, \tilde{D}_i, \tilde{L}_i, \tilde{M}_i] \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} & \Pr[X_{i+1}, D_{i+1}, L_{i+1}, M_{i+1} | \tilde{X}_i, \tilde{D}_i, \tilde{L}_i, \tilde{M}_i] \\ &= \Pr[X_{i+1} | \tilde{X}_i, \tilde{D}_i, \tilde{L}_i, \tilde{M}_i] \times \Pr[D_{i+1} | X_{i+1}; \tilde{X}_i, \tilde{D}_i, \tilde{L}_i, \tilde{M}_i] \\ & \times \Pr[L_{i+1} | X_{i+1}, D_{i+1}; \tilde{X}_i, \tilde{D}_i, \tilde{L}_i, \tilde{M}_i] \times \Pr[M_{i+1} | X_{i+1}, D_{i+1}, L_{i+1}; \tilde{X}_i, \tilde{D}_i, \tilde{L}_i, \tilde{M}_i] \end{aligned} \quad (2.5)$$

制約ベースモデル

制約ベースモデルは ABM の中でも初期に開発されたモデルである．本モデルは上記の 2 つのモデルとは異なり，個人のスケジュールを出力ではなく入力としている．入力として受け取った個人のスケジュールが，与えられた交通ネットワークと時空間制約の元で，実行可能であるかを判断するモデルである．近年の研究としても，活動を生成するモデルの開発ではなく，個人間相互作用の記述 (Farber et al. 2013) や選択肢集合の定義への活用 (Arentze & Timmermans, 2000) といった時空間制約の拡張が行われている．

機械学習分野モデル

近年では，機械学習分野のモデルを ABM として活用した活動生成が研究されている．計算プロセス型や離散選択型に分類されるモデルでも，AMOS (Kitamura et al., 1993) や ALBATROS (Arentze & Timmermans, 2004) など機械学習モデルを一部組み込んだ ABM は多く提案されてきた．一方，近年では機械学習モデル単体で活動生成を行うモデルの開発がされている．

2010 年代初期から今日まで，ABM での活用が続くモデルが，Bayesian Network (BN) である．BN は変数間の因果関係を非循環有効グラフ (DAG) の構造で表現する，グラフを用いた確率モデルの一種である．Ma (2015) や Ma et al. (2017) は BN のグラフ構造を推定することで，交通モード選択の際の意思決定構造を明らかにした．その後，Joubert & Waal (2020) や Waal & Joubert (2022) は BN を用いた ABM を開発し，説明可能性の高いモデルの構築を試みている．一方で，多変数・多ラベルから成る BN の構造をデータから学習することは大きな計算コストを要し，ABM 分野の研究でも限られた変数に対してのグラフ構造の学習が行われており，選択肢集合の多い目的地選択などは行われていない．

機械学習分野のモデルとして，近年利用が多い深層学習モデルの利用も行われている．Chiesa & Taraglio (2022) は Variational Auto Encoder (VAE) を用いて活動需要の生成を行なっている．こうした深層生成モデルの利用は，ABM の入力となる人口を生成するための Population Synthesis 分野でも行われており (Stanislav et al., 2019)，活動に関する観測データの増加に伴い大きな発展が期待される．

2.1.2 交通需要制御とモデル検証

ABM の主な開発目標の一つに，モデルを用いた交通需要制御 (TDM) が挙げられる．近年では MATSim をはじめとする開発済み ABM を用い，様々な交通施策について検証が行われている (Tajaddini et al., 2020)．多くの研究で検証されているシェアモビリティや駐車場導入・混雑課金をはじめとし，近

年では COVID-19 の影響 (Alam et al., 2022) の検証にも ABM が用いられている。利用されているモデルとしては、交通量配分モデルと接続している MATSim が利用されることが多い一方、特定の検証目的に即した他の計算プロセス型や離散選択型モデルも適用されている。

こうした ABM を用いた TDM の検証では、交通施策を導入した後の各指標の変化を計算することにより、TDM の評価を行う。同じシェアモビリティの検討でも、Cuaru et al.(2013) では導入後のシェアモビリティ利用数を検証しているのに対して、Becker et al.(2020) は異なる車両サイズによってもたらされる福祉の影響 (移動時間や一般化コスト・消費エネルギー) を評価している。また、Balac et al.(2017) はフリーフロート型のシェアモビリティの導入を MATSim により行い、利用率についての検証を行なっている。これら多様な指標の計算が可能な点は、個人の活動需要を考慮する ABM の、特に交通量配分モデルと接続することの用意な MATSim の利点である。駐車場導入でも同様に、Benenson et al.(2008) が駐車場密度による駐車場探索時間への影響を計算プロセス型のモデルで評価した一方、Waraich & Axhausen(2012) は離散選択型モデルを用いて駐車場密度や容量・料金が及ぼす自動車利用と道路混雑への影響と、多様な検証が行われている。

その一方で、検証に用いられている ABM 自体も、その精度やパラメータの感度といった項目で検証の対象となっている。Khan et al.(2022) は土地利用を組み込んだ ABM に対して、通勤開始時間・通勤距離・通勤手段・活動種類割合といった多数の予測項目について検証を行ない、モデルが TDM の検証を行うに足る精度を持つことを示した。感度については、Zhuge et al.(2019) が繰返し計算回数や計算時間幅といった MATSim のハイパーパラメータに対して検証を行っており、これらの設定によって大きく計算結果が変化することを示している。また、yang et al.(2013) は感度分析を通して、パラメータの変化 (不確実性) が ABM の出力に大きな影響を与えることを示唆した。

2.1.3 要素間相互関係

2.1.2 では、近年行われている ABM による TDM の検証について、その研究の潮流と利点を述べた。一方で、MATSim を用いて交通手段の転換を検証する研究でも、Adnan et al.(2020) をはじめとして、TDM の検証を行う際の指標は一つの計算要素内で留まるものが多い。複数の計算要素 (又は意思決定) が互いに与える影響を ABM で考慮する際には、明示的に相互関係をモデル内に導入する方法と、繰返し計算により相互関係がシミュレーション出力に反映する方法とが用いられる。以下では、計算要素間の相互関係を考慮する手法と、それらが用いられる状況について整理する。

明示的な相互関係導入

離散選択型のモデルでは、MNL モデルの拡張により複数の計算要素間に相互関係を明示的に導入することが行われている。

Bowman & Ben-Akiva(1997) をはじめとした離散選択型モデルは、Nested Logit モデル (NL モデル) と同様の離散選択モデルを導入することで、計算要素の相互作用を考慮している。下位の意思決定に用いられる離散選択モデルの logsum 値を、上位の離散選択モデルに変数として追加することで、上位の意思決定を行う際に下位の意思決定結果を反映させる方法である。具体的なモデルの選択確率を式 (2.6)、(2.7) と (2.8) に記す。式 (2.6) で示す \tilde{V}_m は下位の離散選択モデルによる効用の確定項から成るログサムである。 M についてのログサム値を (2.7) のように D に関しての上位の離散選択モデルの変数の一つとして用いることで、上位の意思決定時に下位の意思決定によって得られる効用を考慮することができる。式 (2.8) は選択肢 (d, m) を同時に選択する確率であり、 M が与えられた時の D の条件付き確率を考慮す

ることで意思決定の相互関係をモデル化する。

$$\tilde{V}_m = \frac{1}{\mu_m} \ln \left(\sum_{m' \in M} \exp(\mu_m V_{m'}) \right) \quad (2.6)$$

$$V'_d = V_d + \sum \tilde{V}_m \quad (2.7)$$

$$P(d, m) = P(d|m)P(m) = \frac{\exp(\mu_m V'_d)}{\sum_{d' \in D} \exp(\mu_m V'_{d'})} \times \frac{\exp(\mu_m \tilde{V}_m)}{\sum_{m' \in M} \exp(\mu_m \tilde{V}_{m'})} \quad (2.8)$$

他モデルのログサム値を他モデルの変数として用いる手法は、NL モデルからの拡張として広く適用されている。Ho & Mulley(2013) では活動ツアーパターン選択に交通手段選択のログサム変数を導入することで、交通手段選択が家庭環境に大きく依存する休日の活動において、活動ツアーパターンが交通手段により強い制約を受けていることを明らかにした。また、Khan et al.(2022) は要素を説明するためのモデルを複数構築した後、ログサム値を用いるフィードバックを ABM に導入することで、交通手段の選択による実施可能な活動種類への影響をモデルに導入した。いずれも、分析対象の計算要素に離散選択モデルを構築し、一方のログサム値を他方の変数として用いることで計算要素間の関係を記述している。

繰返し計算

MATSim(Balmer et al., 2004) は、活動需要予測を行う ABM とネットワーク上の配分計算を行うモデルの両方を包含しており、繰返し計算を行いネットワーク条件を更新することで計算要素の相互関係を記述することが可能である。MATSim で用いられる繰返し計算の流れを、図??に示す。MATSim では、ABM で生成された活動需要から、mobsim というネットワーク配分モデルを用いてネットワークの状態を計算する。ネットワーク状態に基づき、ABM で生成された活動 (1 日のスケジュール) をスコア化し、スコアが収束するまで ABM での活動需要生成を繰返す (Nagel et al., 2016)。

MATSim をはじめとして、繰返し計算は活動需要と交通量配分の両方を行うモデルで用いられる。Loudon et al.(1997) は、活動需要をネットワーク交通量へ配分することにより、他エージェントの選択をネットワーク状態を通じてフィードバックできるため、交通量配分を含めた繰返し計算が、四段階推定法の中で活動需要分布の全ての次元を適切に考慮することに寄与することを論じた。活動需要分布からのサンプリングと交通量配分を繰返し行うことによる、四段階推定法の精度向上が、Boyce et al.(1997) により示されている。

繰返し計算は、ネットワーク状態を考慮した現実的なスケジュールを生成する目的で導入される一方で、計算要素間が持つ相互関係のモデル化にも貢献している。Dobler(2009) は繰返し計算によって個人が行うスケジュールの見直しを表現し、意思決定時に他の計算要素を考慮するアルゴリズムを提案した。また、Maheshwari et al.(2023) が交通基盤と都市の発展が相互に及ぼす影響を分析したように、決まった複数の現象間の相互関係を繰返し計算でシミュレーションに反映する研究も見られる。

2.2 Bayesian Networks

本節では、Bayesian Networks (BN) の構造を簡潔に述べた後、BN の利用例と拡張モデルを示す。その後、グラフ構造の推定手法について、特に貪欲法による手法とモデル平均化に着目して整理する。

2.2.1 Bayesian Networks の構造

Bayesian Networks (BN) は, Cooper(1992)[2] により提案された, グラフィカルモデルの一種である. グラフィカルモデルは, 変数とその関係をグラフの形で表現する確率モデルであり, 一般的に変数をノード, 変数間の関係をエッジとして表現する. モデルの定義は, エッジで結ばれない変数間が, 共通してエッジで結ばれている変数を条件として独立であるという条件付き独立性 N を満たす確率モデルである [3]. BN は特に変数間の説明関係を有効に限定したグラフィカルモデルであり, そのグラフは, 周辺確率の計算のために非循環という制約を加え, 有効非循環グラフ, Directed Acyclic Graph(DAG) の形を取る.

定義・計算についての文章

2.2.2 Bayesian Networks の利用

BN は, 変数間の関係がデータから学習可能という特徴から, 様々な分野, 特に変数間関係が明らかでない系のモデル化, で利用されている. はじめに有効グラフによるグラフィカルモデルの活用を示したのは医療分野であり, Jensen et al.(1990)[4] は BN の前身である Causal Probabilistic Networks(CPN) を用いて, 医療診断のためのモデルを構築した. また, 変数が多く, その関係が複雑な系である生態学においても BN の利用は盛んであり, Borsuk et al.(2004)[5] は, 複雑な系を一つの BN モデルにより表現した. データから学習された変数間の関係がグラフ構造として可視化されているため, モデル構造の説明可能性が高く, 目的変数の最適化に向けた施策の検討が容易である点も, BN が利用される理由の一つである. Borsuk et al.(2004)[5] は, 河川の富栄養化構造を BN で記述し, グラフから判明した富栄養化の要因となる栄養素の制御を試みた. また, Bromley et al.(2005)[6] は, 水資源の管理において BN を用いたモデルを構築し, 各ステークホルダーの意思決定への説明性を高めた.

明らかでない系のモデル化, 説明可能性の高いモデル化, 目的変数の最適化への利用といった利点から, 交通分野においても BN の利用が試みられている. Sun & Earth(2015)[7] によって初めて, 個人属性の同時確立を BN によって表現する人口生成モデルが提案された後, 特に population synthesis に適用する研究が進められており, 潜在変数を導入した Sun et al.(2018)[8] をはじめとして, 利用される BN モデルも拡張されている. 同時に, 2.1.1 で述べた通り, 個人属性に加えて活動に関する変数を含めた ABM の開発も進められている.

一方で, BN の適用において, 課題も指摘されている. Kyrimi et al.(2021)[9] では, BN を適用している医療分野の研究において, その適切な手法によりデータ同化されたモデルや実問題に適用可能な構造をしたモデルが少ないことを指摘している. ABM 分野で BN を用いた Sallard & Balac(2023)[10] では, モデル構造の推定手法が, モデルの説明可能性や予測精度に与える影響を考慮するべきである点が指摘されている. また, ABM として利用する上で, より情報の多いスケジュール生成の必要性が指摘されている [11][12] が, 変数を増加させる際には, 計算時間の増加やスケジュール生成の複雑さといった課題が存在する.

2.2.3 Bayesian Networks の拡張

2.2.4 Bayesian Networks の構造推定

2.3 本研究の目的

第3章

対象問題と提案アルゴリズム

本章では，グラフ構造推定に導入する提案手法の記述を行う．はじめに 3.1 節で Object の導入による解空間削減手法を述べた後，3.2 節では深層生成モデルによるモデル平均化手法について述べる．

3.1 解空間を削減したグラフ推定手法

本節で導入する解空間削減手法では，Object-Oriented Bayesian Networks(OOBN)[4] で BN に導入された Object の概念を用いる．グラフ推定の手法としては，Ordered-based Search を用い，変数順序配列 $order[]$ に対して制約を設けることで解空間が削減される．

グラフの推定は，Ordered-based Search[5] を採用する．この際，複数の変数 X_i を 1 つの Object O_l に格納する．ABM の文脈では，Object は個人属性や活動パターン，目的地選択といった計算要素を表現し，変数は事前知識に基づいて近い属性の Object に格納される．この時，同一の object に属する変数を変数順序配列の中で連続させることによって，変数の順序配列 $order[] = (X_1, \dots, X_i, X_{(i+1)} \dots, X_I)$ を決定する問題は，Object 順序配列 $order_L[] = (O_1, \dots, O_l, O_{(l+1)} \dots, O_L)$ と，各 Object O_l 内での変数順序配列 $order^l[] = (X_1, \dots, X_i, X_{(i+1)} \dots, X_{(I^l)})$ を決定する問題へと変換することができる．Object 内での変数順序配列が変わることによる，Object 順序配列 $order_L[]$ の決定問題への影響を無視すると，グラフの推定問題は， $order[]$ の探索操作から， $order_L[]$ の探索と $order^l[]$ for $l = 1, \dots, L$ の探索を順番に行う操作に変換できる．この際の探索が必要な変数順序配列の総数は，均等に L 個の Object に変数を格納した場合， $I!$ から $L!(I/L!)^L$ へと削減される．変数の数と取りうるグラフ構造の数 (循環含む) を示した図 1 から，変数の数が増加すると Object を導入することによる解空間の削減が，既存のエッジを固定する方法に比べて大きいことが分かる．

3.2 部分構造のスコアを考慮したモデル平均化

本節で提案するグラフ構造のモデル平均化手法では，深層生成モデルを用いることで，変数ごとに高スコア値を返す部分構造を採用するようにグラフ構造を生成する．グラフ構造を生成する深層生成モデルの研究は，D-VAE(Zhang et al., 2019)[12] をはじめに多数提案されている．D-VAE は Variational Auto Encoder に DAG グラフ構造を学習させることで低次元の潜在変数へと埋め込み，DAG のサンプリングを可能とした．この DAG 生成器を用いて，BN の構造学習を行なっている．

モデル平均化の問題では，入力は多数の学習で得られたグラフ構造の集合であり，求められる出力は入力集合内のグラフ構造を平均化して得られる高スコアなグラフ構造である．そのため提案手法では，変数

ごとの高スコアな親変数集合 Π_i をグラフの部分構造として持つグラフを生成することで高スコアなグラフを生成する、深層生成モデルを用いてモデル平均化を行う。

用いるモデルは、Conditional VAE[6] である。本研究でのモデル構造を図2に示す。学習時には、学習結果のグラフ構造集合から、グラフ隣接行列 M^k と正規化された各変数の BIC スコア配列 ($BIC^k(X_1), \dots, BIC^k(X_I)$) を入力とし、encoder により潜在変数へと埋め込まれる。その後、潜在変数は BIC スコアと共に decoder によってグラフ隣接行列へと復元される。生成時には、BIC スコア配列と分布からサンプルした潜在変数を与えることで、BIC スコア配列により条件付けされた分布からグラフ隣接行列 $M^{average}$ が得られる。生成時の BIC スコア配列として、全変数に対して高い値を入力することで、各変数に対して高スコアな親変数集合を採用したグラフ構造を生成することが可能である。4章の実験では、全値が 2.0(上位 98%) の BIC 配列で条件付けて構造を生成した。生成されるグラフ構造が DAG であることは保証されていないため、グラフの非循環性を判定し、平均化グラフとする。

第 4 章

有効性検証

第 5 章

復旧期アクティビティシミュレータのパ ラメータ推定

第 6 章

結論

参考文献

- [1] Yuanfei Xiang, Y Xiang, and S K M Wong. Critical remarks on single link search in learning belief networks, 1997.
- [2] Gregory E Cooper. A bayesian method for the induction of probabilistic networks from data, 1992.
- [3] Handbook of graphical models.
- [4] Finn Verner Jensen, Kristian G. Olesen, and Stig Kjaer Andersen. An algebra of bayesian belief universes for knowledge - based systems. *Networks*, Vol. 20, pp. 637–659, 1990.
- [5] Mark E. Borsuk, Craig A. Stow, and Kenneth H. Reckhow. A bayesian network of eutrophication models for synthesis, prediction, and uncertainty analysis. *Ecological Modelling*, Vol. 173, pp. 219–239, 4 2004.
- [6] J. Bromley, N. A. Jackson, O. J. Clymer, A. M. Giacomello, and F. V. Jensen. The use of hugin® to develop bayesian networks as an aid to integrated water resource planning. *Environmental Modelling and Software*, Vol. 20, pp. 231–242, 2005.
- [7] Lijun Sun and Alexander Erath. A bayesian network approach for population synthesis. *Transportation Research Part C: Emerging Technologies*, Vol. 61, pp. 49–62, 12 2015.
- [8] Lijun Sun, Alexander Erath, and Ming Cai. A hierarchical mixture modeling framework for population synthesis. *Transportation Research Part B: Methodological*, Vol. 114, pp. 199–212, 8 2018.
- [9] Evangelia Kyrimi, Scott McLachlan, Kudakwashe Dube, Mariana R. Neves, Ali Fahmi, and Norman Fenton. A comprehensive scoping review of bayesian networks in healthcare: Past, present and future. *Artificial Intelligence in Medicine*, Vol. 117, , 7 2021.
- [10] Aurore Sallard and Miloš Balac. Travel demand generation using bayesian networks: An application to switzerland. Vol. 220, pp. 267–274. Elsevier B.V., 2023.
- [11] Tai Yu Ma. Bayesian networks for multimodal mode choice behavior modelling: A case study for the cross border workers of luxembourg. Vol. 10, pp. 870–880. Elsevier B.V., 2015.
- [12] Tai Yu Ma, Joseph Y.J. Chow, and Jia Xu. Causal structure learning for travel mode choice using structural restrictions and model averaging algorithm. *Transportmetrica A: Transport Science*, Vol. 13, pp. 299–325, 4 2017.

謝辞

2022 年 2 月 研究室にて