5M-02

最適化問題における統計的揺らぎの分析

石岡龍佑 † 安田宗樹 ‡
山形大学大学院理工学研究科 † 山形大学大学院理工学研究科 ‡

1. はじめに

コロナ渦によるインターネットショッピング需要増加における配達ルート最適化，老後資金対策のためのポートフォリオ構築，働き方改革のための人材配置，勤務表作成といった現実社会における意思決定，問題解決を実現する有用な手段である最適化戦略の需要が高まっている．また，最適解探索に用いられる量子アニーリングやコヒーレントイジングマシンの躍進，コンピュータの性能向上などの影響を受け，エネルギーベースの組み合わせ最適化問題の実時間内解法が現実味を帯びてきており，盛んに最適化問題の研究がおこなわれている．一般的に，最適化問題とは与えられた制約条件下で目的関数の大域的最小解を推測することを目的とするが，本稿では，最適化問題の背景に存在する確率モデル (エネルギーベースモデル (Energy Based model (EBM)))[1][2] がもつある種の揺らぎ (分散) を評価し，最適解やその付近解の統計的性質を調べることが目的である．揺らぎを調べることで，最適解の頑健性や解の個々の構成要素の最適解に対する重要性などが明らかになり，最適化問題に対するより広い知見を得ることが想定される．

2. 逆温度を導入したエネルギーベースモデル

EBM では学習に使うデータ $\boldsymbol{x} := \{x_i \in \{0,1\} \mid i = 1,2,\ldots,n\}$ を入力とし，スカラー値を出力とするエネルギー関数 $E_\theta(\boldsymbol{x})$ に対して，以下の形で確率分布 $P_\theta(\boldsymbol{x})$ を定義する．

$$P_\theta(\boldsymbol{x}) := \frac{\exp(-E_\theta(\boldsymbol{x}))}{Z_\theta} \tag{1}$$

ここで，θ はパラメータ，Z_θ は分配関数である．分子に含まれるエネルギー関数 $E_\theta(\boldsymbol{x})$ を小さくする $\boldsymbol{x}$ が確率をより高くする．また，$E_\theta(\boldsymbol{x})$ はどのような関数でも置くことができる優れた柔軟性があるため目的関数が複雑な最適化問題にも対応することができる．最適解を焼きなまし的に推定する逆温度パラメータ β を EBM に導入すると

$$P_\theta(\boldsymbol{x} \mid \beta) := \frac{\exp(-\beta E_\theta(\boldsymbol{x}))}{Z_\theta(\beta)} \tag{2}$$

のように表せる．図 1，2 に示すように逆温度 β が小さい場合（高温の場合）は平坦な分布となり，逆に大きい場合（低温の場合）は高確率付近に鋭いピークをもつ分布となる．最適解が唯一であり，かつ，それに近い準最適的な解が存在しない場合は図 1 のように最適解に対応するピークのみが低温で出現する．一方で，最適解が複数ある場合や，良質な準最適解が存在するような場合は図 2 のように複数のピークが出現する．最適解が唯一の場合は低温で揺らぎが消失するが，複数存在するときは揺らぎが残る．これが本研究の基本的な考え方である．

3. 揺らぎの評価

図 1 に示すように，低温時ピークが単一の場合（最適解が唯一の場合）は期待値が最適解となり揺らぎは消失する．図 2 のように，ピークが複数の場合は，低温時でも揺らぎが残る．この考え方に則り，各要素 x_i ごとの揺らぎを調べる．揺らぎが極めて小さい要素は最適解において 0 か 1 の特定の値が強く支持される要素である．つまり，最適解において重要な要素だといえる．逆に揺らぎの大きな要素は，値を変更することが可能な要素（つまり，0 と 1 のどちらとも取れる要素）であり，その意味で重要度が低い．重要な要素は値の変更がエネルギーに大きく変化をもたらすと予想され，重要でない要素は値の変更の影響が小さいと予想される．この特徴を重要度 α_i とし以下のように定義する．

$$\alpha_i = \frac{V_{\max} - V[x_i]}{V_{\max}} \quad (0 \le \alpha_i \le 1) \tag{3}$$

ここで，$V_{\max}$ は要素がとりうる揺らぎ $V[x_i]$ の最大値を表す．つまり，今の場合 $V_{\max} = 1/4$ である．揺らぎを求める際，要素の期待値計算が必要であるが組み合わせ爆発の影響から計算量の問題が起こる．そのため，焼きなまし重点サンプリング (Annealed importance sampling (AIS))[3] を用いて期待値をサンプリング近似する．

Analyzing statistical fluctuations in optimization problems
† Ryusuke Ishioka; Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University
‡ Muneki Yasuda; Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University

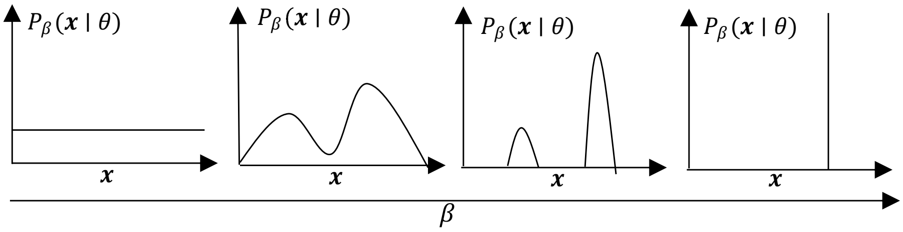

図 1: 唯一解を持つ確率分布と逆温度の関係図

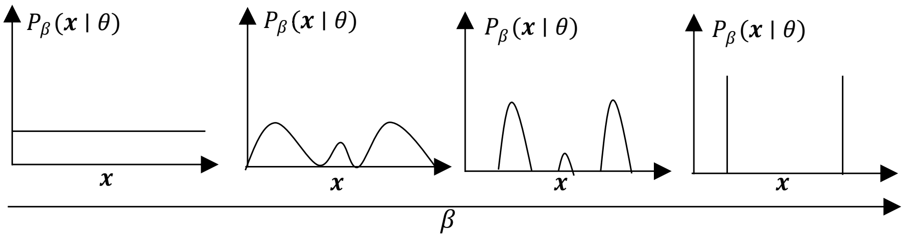

図 2: 複数解を持つ確率分布と逆温度の関係図

4. 数値実験

本節では，EBM の揺らぎから前節で定義した重要度を調べる．最適解と最適解に対して一つの要素の入力のみ変化させたときのエネルギーの差をエネルギー誤差とし重要度との相関性を分析する．本実験のエネルギー関数は多くの組み合わせ最適化問題に用いられるイジング模型のエネルギー関数を用いる．

$$E_{\mathrm{IM}}(\boldsymbol{x} \mid \theta) = -\sum_{i \in V} b_i x_i - \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} x_i x_j \tag{4}$$

ここで, $\theta = \{\boldsymbol{b}, \boldsymbol{w}\}$ はモデルパラメータであり，$\boldsymbol{b}$ は要素に対するバイアス項，$\boldsymbol{w}$ は要素間の相互作用項である．本実験は図 3 で表す正方格子状で要素数 $n = 16$ の無向グラフを扱う. モデルパラメータは平均 0, 標準偏差 1 のガウス分布からそれぞれ独立に生成する. 期待値計算のための AIS に用いるサンプルデータ数を 5000 セット, 逆温度 $\beta = 2$ とする. 実験は 500 回行い結果は 500 回の平均とする. 図 4 より重要度とエネルギー誤差の正相関が見て取れる. このことから，提案する重要度の指標は実験的に示され，最適解に対して重要な要素，及び良質な準最適解の発見につながる要素を推定することが可能になる．

5. まとめ

本稿では，低温時ピークを複数もつ場合の揺らぎを調べ，統計的に要素ごとの重要度を推定することを提案した．その結果，最適解に対して重要な要素，良質な準最適解の発見につながる要素の推定を可能とし最適化問題への新たな知見を得た．実世界の問題への適用を今後の課題とする．

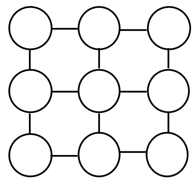

図 3: 構成要素 V, 要素間の相互作用用 E からなる無向グラフ $G(V, E)$

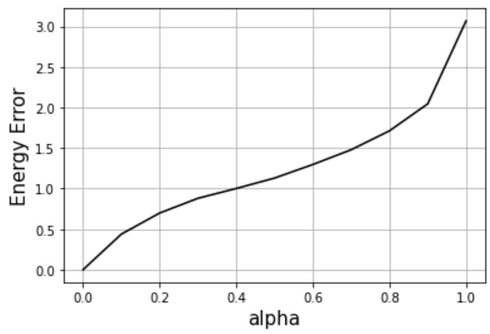

図 4: 重要度とエネルギー誤差の関係図

謝辞

本研究は科研費（21K11778）の助成を受けたものである．

文献

[1] Yann LeCun, Sumit Chopra, Raia Hadsell, M Ranzato, and F Huang. A tutorial on energy-based learning. 2006.

[2] Hanjun Dai, Rishabh Singh, Bo Dai, Charles Sutton, and Dale Schuurmans. Learning Discrete Energy-based Models via Auxiliary-variable Local Exploration. 2020.

[3] R. M. Neal. Annealed importance sampling:Statistics and Computing, Vol. 11,pp.125–139, 2001.