

博士学位論文要約（令和4年3月）

少数データに対するブラックボックス最適化の研究

越川 亜美

指導教員：田中 和之， 学位論文指導教員：大関 真之， 奥山 真佳

Study on Black-box Optimization for Small Data

Ami KOSHIKAWA

Supervisor: Kazuyuki TANAKA,

Research Advisor: Masayuki OHZEKI, Manaka OKUYAMA

Black-box Optimization is a method that maximizes or minimizes a function without derivatives or explicit forms. In this study, we use a surrogate model-based black-box optimization with binary input variables, which can be applied when there is only a small amount of data. Bayesian Optimization of Combinatorial Structures (BOCS), in particular, uses a quadratic form of the surrogate model. When the acquisition function represents the candidate parameter, its optimization process can be performed using D-Wave quantum annealer and other Ising machines. This means that BOCS enables Ising machines to be used in even wider range of applications. We investigated the properties of BOCS for various black-box functions. While BOCS outperformed random search in a quadratic form of the black-box function, the two methods had no significant difference in performance when the form of the black-box function remained unknown.

1. 序論

現在、日々データが肥大化する現代社会においても、限られた数のデータしか取得できない状況は依然として存在する。本論文では、少数データを取り扱う手法としてブラックボックス最適化に着目する。ブラックボックス最適化とは、導関数や明示的な形式を持たない関数を最大化ないし最小化する手法である。このような問題は材料科学などの様々な分野に現れる。

本論文では、入力変数が離散値におけるブラックボックス最適化について取り扱う。ブラックボックス最適化のアルゴリズム中では、獲得関数と呼ばれる関数を最適化する過程がある。この獲得関数を最適化する問題は、しばしば NP-困難という多項式時間で最適化するのが難しい問題に属するという問題点がある。本研究で用いる Bayesian optimization of combinatorial structures (BOCS)¹⁾ という手法では、未知の関数の出力値を二次制約なし二値最適化 (quadratic unconstrained binary optimization: QUBO) 形式で回帰をする。取得したデータ数が QUBO 形式の回帰係数より少なくても、また問題次元数が大きくなった場合でも効果的に最適化を行うことができるのが特徴である。

また近年、組合せ最適化問題の近似解を求めるソルバーとして、D-Wave Systems 社によって量子アニーリングマシンが開発された²⁾。このマシンでは最短数 μ s という短い時間で近似解を出すことができる。

また現行のマシンでは、2 体相互作用までのモデルを取り扱うことができるが、より高次の項を直接取り扱うことはできない。獲得関数を最適化する問題も組合せ最適化問題に含まれる。先に述べた BOCS では獲得関数を二次形式で表すため、BOCS を最適化するための候補として量子アニーリングマシンを挙げることができる。ブラックボックス最適化で最適化の対象となる関数は QUBO 形式のみに制限しないため、BOCS を通じ、量子アニーリングマシンで QUBO 形式よりも複雑でより高次の項を含むような関数を最適化できるようになる。量子アニーリングマシンは産業界で注目を集めているため、量子アニーリングマシンの適用範囲を広げることは重要なことである。

本論文では、少数データ系を題材として主に次の 2 つの事柄に取り組む。

まず、BOCS の性質を調べるために、スパース Sherrington-Kirkpatrick モデル³⁾ をブラックボックス関数とみなして最適化を実行する。ここでは、最適化するグラフのスパース度合いと最適化性能の関係を精査し、離散値におけるブラックボックス最適化の理解を深める。さらに、最適化アルゴリズム内に量子アニーリングマシンを取り入れて実験を行い、既存手法との比較を行う。仮にブラックボックス関数の関数形が既知であった場合、回帰を行って回帰係数を取得し、その回帰した関数を最適化することで最小値ないしは最大値を得ることができる。ブラックボックス関数がスパース SK モデルである場合に、係数を再構

成できるようなデータ数とスパース度合いの関係が先行研究で示されているため、この結果との比較を実施し、ブラックボックス最適化の性質を明らかにする。

次に、車のデザインに関するデータセットに対してブラックボックス最適化を応用する。数車種間で使用する共通の部品数をなるべく大きくしつつ、車のデザインの実現可能解の個数を大きくする問題について最適化を試みる。この問題では部品数が増えると指数関数的に場合の数が増加するため、少数データで最適化できる手法としてブラックボックス最適化を用いる。ブラックボックス関数が簡単な数式で書けない場合におけるブラックボックス最適化の振る舞いを明らかにする。

2. 入力離散値のブラックボックス最適化

入力変数が離散値のブラックボックス最適化の中でも、最適化したい関数を計算する際にコストがかかる場合には、代理モデルを利用した方法が有用である。この方法は、直接最適化計算ができないブラックボックス関数の代わりに、最適化計算が比較的容易にできる関数を用意し、この代理モデルでブラックボックス関数を近似する。ブラックボックス関数から取得したデータを元に、代理モデルを学習し、学習した代理モデルから獲得関数を設計する。獲得関数とは、次に解空間からどのデータ点を取得するかを示す働きをする関数である。この獲得関数を最適化し、最適解に対応するブラックボックス関数の値を求める。新しく得た評価点をデータに追加し、再び代理モデルを学習する。この一連の流れを繰り返すことで、逐次的に評価値を小さくないしは大きくしていく。

入力変数が離散値のブラックボックス最適化には、代理モデルにランダムフォレストを利用する方法や、ガウス過程回帰を用いる方法が挙げられる。近年、獲得関数が QUBO 形式となるように設計した BOCS が開発され、既存手法より良い性能を示した。この方法ではスパースベイズ回帰を用いることで、取得したデータ数が回帰係数の数より少なくても分散の小さい係数を得ることができるため、取得できるデータが少ない場合に有効な手法である。

D-Wave 量子アニーリングマシンを用いたブラックボックス最適化には、FMQA⁴⁾と呼ばれる方法が挙げられる。この方法では代理モデルに Factorization Machines を利用する。この代理モデルは QUBO 形式で表現することができるため、D-Wave 量子アニーリングマシンを利用することができる。

3. スパース Sherrington-Kirkpatrick モデルに対するブラックボックス最適化

本研究では、BOCS を用いたブラックボックス最適化に量子アニーリングマシンを利用して性能評価を

行った。ブラックボックス関数には、(1) に示すスパース Sherrington-Kirkpatrick (SK) モデル

$$F(\vec{\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad \sigma_i \in \{-1, 1\}$$

$$J_{ij} \sim \rho \mathcal{N}(0, 1) + (1 - \rho) \mathcal{N}(0, +0) \quad (1)$$

を用いた。ここで、N は入力変数の次元数、ρ は 0 より大きく 1 以下の実数である。ρ の値を変えることで問題グラフの疎密度を変えることができる。ρ が小さいと問題グラフは疎結合となり、ρ が大きいと問題グラフは密になる。この SK モデルのハミルトニアンを最小化するような二値変数の組を探索した。本研究では獲得関数の最小化に用いる最適化ソルバーに、シミュレーテッド・アニーリング (SA)、半正定値計画 (SDP)、D-Wave 量子アニーリングマシンの 3 種類のソルバーを用意し、ソルバーによって BOCS の性質がどう変化するかに着目した。取得データの最小値

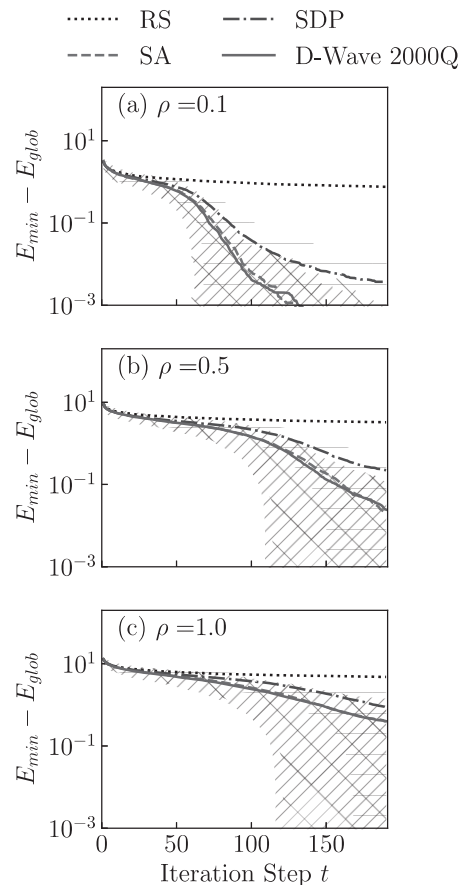


図1 反復回数と、取得データの最小値から真の最小値を引いた値の関係。

から真の最小値を引いた値と、反復回数との関係を図 1 に示す。50 個の問題インスタンスをそれぞれ 10 回ずつ、ブラックボックス最適化を実行した結果である。それぞれの曲線は計 500 回の施行の平均値を、帯は±1 標準偏差を示す。今回用いた SK モデルでは、問題グラフの疎密度にかかわらず、SA と D-Wave 量子アニーリングマシンを用いた場合では性能に有意な差は見られなかったが、SDP を用いた場合の性能はこの二つに比べて悪かった。SDP を用いた場合の性能が悪かった理由は、獲得関数を最適化する際に獲得関数の極小の谷に落ちてしまい、エネルギーの低い解が得られなかったためだと考えられる。

また、ブラックボックス関数の形状が既知であるが、相互作用係数は未知である状況を考える。この際ブラックボックス関数の最小値を得るために、係数をデータから推定し、推定した係数を用いて最適化を実行する方法を取ることできる。先行研究では、入力値であるスピン配位とそれに対応するエネルギー値の組から、圧縮センシングを用いることで相互作用係数を推定する方法が提案された⁵⁾。この研究でもブラックボックス関数としてスパース SK モデルを用いた。レプリカ法を用いた解析と数値実験により、相互作用係数の非ゼロ要素の数と、全ての相互作用係数を再構成するデータ数の関係が明らかになった。BOCS が最小解を見つけるまでのデータ数とスパース SK モデルの疎密度の関係は、この先行研究の結果と対応づけることができる。獲得関数を最適化するソルバーに SA を用いたときの結果を図 2 に示す。実線は先行研究⁵⁾のレプリカ法を用いた解析の結果を示す。ヒートマップは、1 つの ρ の値に対して 50 個の問題インスタンスを 10 回ずつ解いた結果を示す。点線は今回の数値実験で最小解を見つける確率が 50%であることを示す。数値実験の結果、ブラックボックス関数のグラフ構造が密

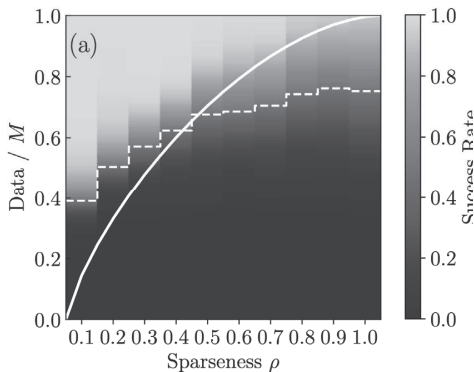


図 2 BOCS が最小解を見つけるまでのデータ数と問題グラフの疎密度の関係。

である場合、圧縮センシングを用いた係数推定に必

要なデータ数より少ないデータ数で最小解を見つける可能性があることが明らかになった。

さらに、FMQA と BOCS との性能比較を行った。本研究では FMQA の最適化過程に D-Wave 量子アニーリングマシンではなく SA を用いたため、FM (SA) を表記する。最適化ソルバーの比較の場合と同様に、取得データの最小値から真の最小値を引いた値と、反復回数との関係を調べた。図 3 は 10 個の問題インスタンスを 10 回ずつ解いた結果である。曲線は 100 回の試行の平均値、帯は±1 標準偏差を示す。ブラックボックス関数が SK モデルで入力次元数が 30 の場合、またブラックボックス関数のグラフ構造が疎である場合は、FM (SA) より BOCS の方が良い性能を示したが、グラフ構造が密になると FM (SA) と BOCS は同じ性能を示した。入力次元数が増えると、FM (SA) の方がよりブラックボックス関数の値が小さくなるような解を見つけられることが判明した。

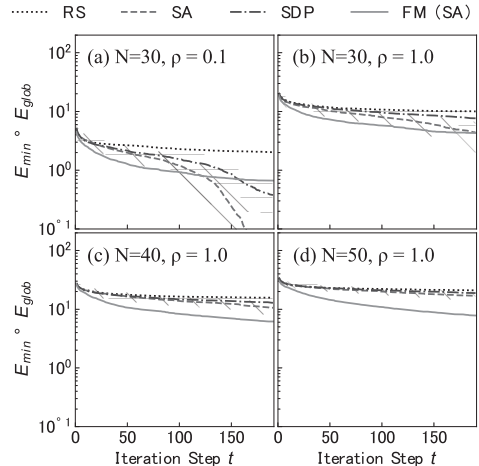


図 3 反復回数と、取得データの最小値から真の最小値を引いた値の関係。

4. ブラックボックス関数と代理モデルの関数形が一致しない場合の最適化

前章では、ブラックボックス関数と代理モデルの関数形が同一である問題について性能評価を行った。本章では、まずこれらの関数形が同一でない場合に関する性能を調べた。具体的には、ブラックボックス関数に 3 体相互作用が含まれている場合の性能について調べた。取得データの最小値から真の最小値を引いた値と、反復回数との関係を数値計算したところ、3 体相互作用のモデルが強磁性相である場合は、ランダムサーチを用いるより BOCS を用いた方がブラックボックス関数の値を小さくするような解を得ることができた。しかしながら、3 体相互作用の

モデルがスピングラス相の場合は、3体相互作用の項数を変化させてもBOCSの性能はランダムサーチの性能より悪い結果となった。

ブラックボックス関数が明示的な形で書けない問題に、車産業における実践的な問題が挙げられる。本研究ではこの問題にBOCSを用いて性能評価を行う。車のデザインの初期段階では様々な要素による制約がある。そのため、デザインの実現可能解はなるべく大きく取られなければならない。今回はデザインの実現可能解の大きさを示す *solution space size*⁶⁾ の最大値を探索する実験を行った。*solution space size* の入力値は *commonality description matrix* (CDM) という行列である。CDMの総数は着目している部品数に対して指数関数的に増加する。*solution space size* を1つの条件で計算するには数秒から数時間かかるため、部品数が多い場合は、全てのCDMの配位に対して *solution space size* を計算することやランダムサーチを実行することは現実的ではない。*solution space size* の引数は二値変数ではなくCDMであるため、引数が二値変数であるブラックボックス最適化を用いるために、二値変数とCDMの変換規則を作った。ランダムサーチと他の手法では性能に大きな違いは見られなかったが、D-Wave量子アニーリングマシンを用いたBOCS以外の代理モデルを利用したブラックボックス最適化は、ランダムサーチより良い性能を示した。また今回は ΔE という指標を用いて統計的にエネルギー地形を議論した。 ΔE の分布から、今回扱った問題のエネルギー地形はSKモデルのエネルギー地形と比較して平坦であることが判明した。エネルギー地形の情報が少ないことから、ブラックボックス最適化で回帰をしながら *solution space size* を最大化するには難しかったのだと予想される。代理モデルにQUBO形式を用いているBOCSを、QUBO形式で書けない車のデザインの問題に適用したことが本研究で重要なことである。これにより、QUBO形式の問題に対し数 μs で近似解を出すことができるD-Wave量子アニーリングマシンの使い方を格段に広げることができる。

5. 結論

本論文では、少数データ系を取り扱う方法としてブラックボックス最適化に着目した。特に入力変数が離散値であるときについて、ブラックボックス関数が2体相互作用のみを持つ場合、3体相互作用までを持つ場合、明示的な形で書けない場合のブラックボックス最適化の性能を確認した。ランダムサーチとの性能比較では、ブラックボックス関数が2体相互作用

のみを持つ場合にはBOCSの優位性を示したが、それ以外の場合では、BOCSの性能はランダムサーチと同等または悪かった。

BOCSの性能がランダムサーチより悪かった3体相互作用の問題については、BOCSが取得したデータの数が反復回数の半分程度であった。探索中に局所解に捕らえられてしまったものと考えられる。そのため、各反復で提案された解が既に取得したものであった場合は何らかの方策で別の解を提案するなどの改良を行えばBOCSの性能が向上すると期待される。

文献

- 1) R. Baptista and M. Poloczek, Proc. Mach. Learn. Res., **80** (2018) 462.
- 2) M. W. Johnson, et al., Nature, **473** (2011) 194.
- 3) D. Sherrington and S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett., **35** (1975) 1792.
- 4) K. Kitai, J. Guo, S. Ju, S. Tanaka, K. Tsuda, J. Shiomi, and R. Tamura, Phys. Rev. Res., **2** (2020) 013319.
- 5) C. Takahashi, M. Ohzeki, S. Okada, M. Terabe, S. Taguchi, and K. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn., **87** (2018) 074001.
- 6) L. Song, TUM University Press, 2019.