

研究終了報告書

「適応的最適化による推測・変動データからの意思決定」

研究期間：2017年10月～2021年3月

研究者：福永 拓郎

1. 研究のねらい

情報技術を利用した意思決定システムは、「情報の収集・認識」と、それに基づいた「計画の策定・判断」という2つの要素から成り立っている。情報の収集・認識については、データをリアルタイムで手に入れるためのセンサーや、データから未知の情報を推定する機械学習技術により、これまで得られなかった多くの有用な情報を意思決定に利用できるようになりつつある。本研究のねらいは、これらの新しい技術により得られた情報を元に、計画の策定や判断を行うための基盤技術の開発である。特に、センサーデータや推定情報のような変動性や不確実性をもつデータからの計画の策定・判断を行う手法として、適応的最適化に着目する。適応的最適化では変動性や不確実性を含むような最適化問題を解く手法であり、選択肢を決定し実行に移す段階で徐々に詳細な情報が明らかになったり情報が変化したりする中で、適応的にその後の計画を変化させるのが特徴である。一方で、適応的最適化は従来の最適化と比べて、アルゴリズムの設計や解析が難しい。アップデートされた情報をアルゴリズムの戦略に全く反映させないと、従来の最適化手法である非適応的なアルゴリズムと同様の性能しか得られないのはもちろんだが、情報を頻繁に反映させすぎた適応的アルゴリズムは非適応的なアルゴリズムよりかえって性能が悪くなってしまうことがあることが知られている。高い性能を安定して発揮するような適応的最適化アルゴリズムを得るためには、設計のための礎となる知見が必要である。

この点を踏まえ、本研究では次の3つの課題に取り組んだ。

- A. 適応的最適化の技術の深化: 様々な最適化問題に対し、統一的な手法で理論的にも実用的にも優れた適応的アルゴリズムを構築することができるようになることを目的とし、適応的最適化アルゴリズムの汎用的な設計手法の開発について取り組んだ。
- B. 適応的最適化に適した情報取得・推定手法の探索: 意思決定システム全体の性能向上のために、情報の取得や推定手法自体の研究を行った。特に、不確実性を含む最適化問題に適用する適応的最適化アルゴリズムと組み合わせるのに適した機械学習手法の検討を行った。
- C. 具体的な課題に対する意思決定システムの構築: 応用分野から現れる具体的な課題に対して適応的最適化の有用性を示すため、適応的最適化手法の適応と検証を行った。

2. 研究成果

(1) 概要

研究テーマA「適応的最適化の技術の深化」では、適応的最適化の対象となる最適化問題を詰め込み型と被覆型の問題に分類し、それぞれについて汎用的なアルゴリズム設計手法の研究を行った。詰め込み型には連続緩和から適応的戦略を構築するアプローチが有効だと考え、実証のために劣モジュラ最大化の新たな亜種に対してこのアプローチを用いて理論保証付き適応的最適化アルゴリズムの設計を行った。この研究によって、詰め込み型の最適化問題に対して適応的戦

略を構築する有効な手法が得られたと考えている。被覆型問題に対しては、劣モジュラ最適化を利用した探索と活用によるアプローチの有効性を確かめた。このアプローチを用いて被覆型問題の一つである確率的連結支配集合問題に対する理論保証付き適応的最適化アルゴリズムを与えた。情報を収集するために探索を重点的に行う探索解と、得られた情報を活用して最適化を行う活用解の計算が、適切に定義された劣モジュラ関数を使用することによって劣モジュラ最適化問題として定式化できることを示した。

研究テーマ B「適応的最適化に適した情報取得・推定手法の探索」では、推定手法と適応的最適化手法を効果的に結びつける手法として、End-to-End 学習に着目した。特に、学習手法として一般的に広く普及している勾配ブースティング木の End-to-End 学習について研究を行った。勾配ブースティング木では、学習の際に損失関数の微分値だけではなくヘッセ行列の値も必要とする。そこで我々は、最適化問題のヘッセ行列を計算する方法を開発した。また、それだけではなく、どのようなときに End-to-End 学習が有効なのかという点について、検証を行った。

研究テーマ C「具体的な課題に対する意思決定システムの構築」では、現実に現れる最適化問題として配送計画問題を取り上げ、適応的最適化手法の適用を行った。利用しやすい現実的な適応的最適化アルゴリズムを作成するため、配送計画問題のソルバーの多くで利用されている局所探索法に適応的最適化の機能を取り入れることを試みた。移動時間や各要求の処理時間が変動するという設定において、配送を担当する車両を適応的に変動させることを考えた。このような適応的な戦略を保持するための解形式を考案し、戦略の評価と局所探索のための近傍の定義を考案した。

(2) 詳細

研究テーマ A「適応的最適化の技術の深化」

適応的最適化の対象となる最適化問題を、大きく詰め込み型と被覆型の問題に分類する。

- 詰め込み型: 選択を行うための回数や資源が制約によって制限されている状況で、目的関数の最大化を図る最大化問題。例: ナップサック問題, 劣モジュラ最大化問題
- 被覆型: 選択は何回でも行うことができるが、選択する度にコスト(目的関数の増加)が発生する。制約を満たすための選択をなるべく低コストで行うことを目指す最小化問題。
例: 最短路問題, 配送計画問題

それぞれのタイプの問題に対して適応的アルゴリズムを設計する手法として、本研究では次の2つのアプローチに着目した。

- 連続緩和から適応的戦略を構築するアプローチ
- 劣モジュラ最適化を利用した探索と活用によるアプローチ

詳細は後述するが、これらの手法を用いて、重要ないくつかの最適化問題に対する理論保証付き適応的アルゴリズムを与えた。この研究を通して、前者は詰め込み型の最適化問題、後者は被覆型の最適化問題に対して有効であることを示した。さきがけ開始以前に取り組んだ研究で用いた貪欲法によるアプローチと合わせ、幅広いタイプの問題を扱うことができるようになり、本テーマの「様々な最適化問題に対し、統一的な手法で理論的にも実用的にも優れた適応的アルゴリズムを構築することができるようになる」という目的について、一定程度達成できたと考えている。

連続緩和から適応的戦略を構築するアプローチ: 離散最適化問題を連続最適化問題に緩和して解き、得られた連続解から近似解を構成する手法は、様々な離散最適化問題に対して効率的な

アルゴリズムを設計するために利用されている。本研究ではこのアプローチを、適応的最適化アルゴリズム設計のために利用することを検討した。これにより、通常の離散最適化問題で蓄積されている知見を適応的最適化にも流用できるようになり、多様な種類の適応的最適化問題にこの枠組みでアルゴリズム設計ができるようにすることが目的である。

実際の研究成果としては、これまで解法が知られていなかったパフォーマンス依存コストをもつアイテム集合上での劣モジュラ最大化にこの手法を適用し、理論保証付き適応的アルゴリズムを得ることができた。劣モジュラ最大化問題は、オペレーションズ・リサーチ、機械学習、画像処理などの分野で広く応用されている基本問題である。本研究の提案手法では、連続最適化問題の解から適応的戦略を構築する際に、連続緩和から近似解を構築する際の一般的な枠組みである Contention Resolution Scheme を用いた。通常最適化問題に対するアルゴリズム設計の枠組みが適応的最適化へも有効であることを示した点で、この結果は意義深いと考えている。Contention Resolution Scheme は多くの詰め込み型最適化問題に有効な枠組みであり、この研究によって、詰め込み型最適化問題に対して適応的戦略を構築する有効な手法が得られたと考えている。この結果をまとめた論文は AAAI-19 に採択された (Fukunaga et al., AAAI-19)。

劣モジュラ最適化を利用した探索と活用によるアプローチ: 不確実性を含む最適化問題については、探索と活用のバランスを取るような解の選択が重要となる。特に、選択回数が制約によって限られていない被覆型の問題については、最初は情報を収集するために探索を重点的に行い、次に得られた情報を活用して最適化を行うというアプローチが良いことが多い。これを踏まえ本研究では、多くの被覆型の問題に適用できるアイデアとして、劣モジュラ最適化を利用した探索解と活用解の計算に着目した。このアイデアは、確率的最短路問題などにも先行研究で用いられている方法である。本研究では他の被覆型問題への有効性を確かめるため、確率的連結支配集合問題に適用することで効率的なアルゴリズムが得られることを示した。

連結支配集合問題は、無向グラフにおいて連結部分グラフを誘導するような支配集合の中で、重みが最小のものを求める問題である。本研究では、グラフ内の頂点が確率的に取り除かれる状況を考え、残ったグラフ上の連結支配集合を適応的に求める問題を考案した。この問題の探索解を、選択し周辺を観測したらシナリオが半分以上棄却できる連結頂点集合として定義する。また、活用解としては、選択・観測をするとその解が連結支配集合であることが確かめられる連結頂点集合として定義する。重み最小の探索解と活用解の計算が、適切に劣モジュラ関数を定義すると、劣モジュラ関数が一定以上の値を取るような集合の中で重み最小のものを計算する、ポリマトロイドシュタイナー木問題に適用できることを証明した。提案アルゴリズムは、ポリマトロイドシュタイナー木問題について知られている既存アルゴリズムを適用することで、探索解と活用解を繰り返し計算し、重みが小さい方の頂点の選択をするというものになっている。この成果は、IEEE/ACM Trans. Netw. に採択された (Fukunaga, IEEE/ACM Trans. Netw. 2020)。

研究テーマ B 「適応的最適化に適した推定手法の探索」

推定手法と適応的最適化手法を効果的に結びつける手法として、End-to-End 学習に着目した。機械学習のほとんどの手法は、学習の際に損失関数を最小化するようにモデルのパラメータを決定する。このとき、損失関数のパラメータに関する微分値などの情報をもとにパラメータの更新を行う勾配法を最小化に利用することが多い。End-to-End 学習では学習の際に、データとのフィットの度合いを表す損失関数ではなく、その先の最適化問題を最適化するようモデルのパラメータを

調整する。この際、パラメータが変動したときに、最適化問題の最適解、もしくはアルゴリズムの出力解がどのように変動するかを表す微分値を計算するなどの必要が生じる。

本研究では、学習手法として一般的に広く普及している勾配ブースティング木の End-to-End 学習を利用することを考えた。勾配ブースティング木では、学習の際に損失関数の微分値だけではなくヘッセ行列の値も必要とする。そこで我々は、最適化問題のヘッセ行列を計算する方法を開発した。これにより、勾配ブースティング木と最適化を組み合わせた End-to-End 学習を実現した。表 1 は最短路問題に対して提案手法を他の手法と比較した結果である。「二段階法」が、学習と最適化を別々に行う手法、「ランダム」がパラメータを推定せず最短路問題のランダム解を計算した結果、「最適解」は推定パラメータの真の値が分かっていると仮定した上で最適解を計算した結果である。提案手法には、ヘッセ行列の近似の仕方により 3 バージョンある。目的関数値の列は得られた解の目的関数値を表しており、値が小さいほどよい。AUC はパラメータの推定精度を表しており、値が大きいほど良い。この結果から、提案手法の一つが、二段階法より良い結果を与えたことが分かる。

表 1: 最短路問題における End-to-End 学習の評価結果

	目的関数値	AUC
二段階法	2.3580	0.6162
提案手法 tikhonov	2.2820	0.5828
提案手法 abs	2.5700	0.5000
提案手法 sfn	2.3000	0.5624
ランダム	2.8180	-
最適解	1.6840	-

また、アルゴリズムの提案だけでなく、どのようなときに End-to-End 学習が有効なのかという点について、検証を行った。機械学習で通常用いられる損失関数は、すべての訓練データについてモデルがどの程度フィットしているかを表現する。しかし、訓練データに傾向が違うデータが混入していると、この損失関数を最小化することが効果的な最適化につながるとは必ずしも限らない。最適化に不都合な影響を与えるようなデータを取り除いた上でモデルを調整するようなことをしたほうが最終的には良い結果が得られる。このような状況に End-to-End 学習が必要になると考え、実際にいくつかのシミュレーションで確かめることができた。この成果をまとめた論文は ECML-PKDD20 に採択された(Konishi, Fukunaga, ECML-PKDD20)。

研究テーマ C 「具体的な課題に対する意思決定システムの構築」

現実に現れる最適化問題として、配送経路を選択する配送計画問題を取り上げ、適応的最適化手法の適用を行った。配送計画問題では、配送車の情報(荷物の搭載容量、台数)と配送の要求(地図上の座標、運ぶ荷物の大きさや集配・配送などの要求、訪問希望日時の時間枠)が与えられた中で、どの要求をどの順番で、どのような経路をたどって処理するかを決定する。現実の場面ではこのようなパラメータに様々な不確実性が含まれる。例えば、道路の渋滞による移動時間の変動、客の不在による再配達が発生、要求の処理にかかる時間の変動である。本研究では実際に、移動時間がどのように変動するかを Google Map API の移動時間クエリを用いて計測し、データとして整備する作業も行った。図 1 は、Google Map API が返した都内 2 地点間の自動車での移動時間

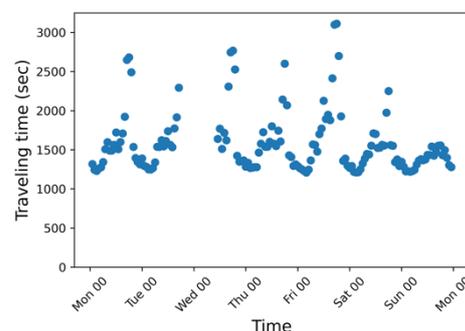


図 1: 都内 2 地点間の移動時間の遷移

がどのように変動するかを Google Map API の移動時間クエリを用いて計測し、データとして整備する作業も行った。図 1 は、Google Map API が返した都内 2 地点間の自動車での移動時間

の 1 週間の推移である。時間帯により 1200 秒から 3000 秒超まで大きく変動していることが見て取れた。

配送計画問題で広く利用されているソルバーで採用されている手法の一つに局所探索法がある。この手法は、性能の理論保証がないヒューリスティック解法であるが、設計が簡単で多くの複雑な問題に適用できるという利点がある。本研究では、利用しやすい現実的な適応的最適化アルゴリズムを作成するため、局所探索法の中で適応的最適化の機能を取り入れることを試みた。どのような適応性を取り入れるかによってアルゴリズムの設計や問題の複雑度が変化すが、本研究では、移動時間や各要求の処理時間が変動するという設定において、配送を担当する車両を適応的に変動させることを考えた。このような適応的な戦略を保持するための解形式を考案し、戦略の評価と局所探索のための近傍の定義を考案した。

また、提案アルゴリズムを実装し、計算実験により性能を確かめた。初期解として、配送計画問題に長年取り組んでいる橋本英樹准教授(東京海洋大学)が開発したソルバーを利用させて頂いた。このソルバーで不確実性の無い配送計画問題を解き、得られた解を初期解として、提案手法による局所探索を繰り返すことで適応的戦略を構築し、初期解からどの程度目的関数値が改善したかを観察した。人工的に作成した顧客 50 点からなる問題例では、初期解から 10%ほど目的関数値が改善する例が見られた。これは、適応性を取り入れることが有効であることを示す結果と考えられる。一方で、Google Map API を用いて作成した東京都内 50 カ所の移動時間データを用いた実験では 1%程度の改善にとどまった。提案手法の局所探索法は初等的な局所探索しか実装しておらず、性能の向上は今後の課題である。

3. 今後の展開

本研究によって、適応的最適化の理論の整備と、効率的なアルゴリズムを設計するための基盤についてはある程度整備ができたと考えている。この成果を元に、今後の研究の展開としては以下の方向を考えている。

適応的最適化の実応用への適用: 本研究では現実の課題への適用についてテーマ C で取り組んできたが、実際のシステムに取り入れるという目標には至っていない。この技術を活用するには、どのような適応性に対応するかを決定し、その上でどのようなデータ構造で戦略を保存し、評価するかが重要となってくる。本研究テーマ C で扱った配送計画問題では、需要の配送車への需要の割当を適応的に更新することを扱った。例えばこれに加えて、配送順序を適応的に変化させるなど、より柔軟な適応性を実現させるなどの課題に取り組みたい。

最適化以外の情報技術との連携: テーマ B で扱った End-to-End 学習のように、データから問題パラメータを推定するプロセスと最適化のプロセスの融合は、効率的な意思決定のために重要であると考えている。本研究では、訓練データにおいてはパラメータの値がラベルとして与えられている教師あり学習の設定を考えたが、現実にはラベルの値がわかっていない状況なども多く発生すると考えている。また、提案した手法は計算時間がかかるなどの欠点も抱えている。これらの課題の解決に取り組み、データ駆動型の意思決定を支える技術の開発に今後は取り組むと考えている。

4. 自己評価

テーマ A, B の研究目的についてはある程度満足得られる結果を得られたと考えている。テーマ A

では、既存のアルゴリズムが知られていない問題について新たなアルゴリズムを与えることに成功し、また技術的にも様々な問題に適用できる可能性がある汎用性が高い手法を構築できたと考えている。テーマ B については、End-to-End 学習の利点を整理し、今後大きく発展することが見込まれる新たな研究分野の基礎となるような成果を得られたと自負している。

テーマ C については、当初の目的よりも初期的な成果に留まり、この点については課題が残ったと考えている。領域の目標である社会デザインへの貢献という意味では、十分ではなかったと考えている。今後の研究でこの方面について、成果を上げていきたいと考えていく。

研究実施体制については、当初計画では学生などの研究補助者の雇用を考えていたが、適切な人材を見つけることができずに結局採用を行わなかった。研究費も当初計画より使用せずに返金した。研究全体を加速させるために、もう少し効果的な使用ができなかったらと反省している。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数: 16件

1. Takuro Fukunaga, Takuya Konishi, Sumio Fujita, Ken-ichi Kawarabayashi. Stochastic Submodular Maximization with Performance-Dependent Item Costs. Proceedings of the 33rd AAAI Conference on Artificial Intelligence, 1485-1494, 2019.

概要: ナップサック制約付き劣モジュラ最大化問題において、各アイテムが確率的な状態を持ち、アイテムのコストや目的関数(劣モジュラ関数)への貢献がその状態に依存して決まる状況を考えて、この問題に対して、適応的最適化アルゴリズムを与えた。このアルゴリズムの理論保証として、最適な適応的戦略と比較して定数倍の目的関数地を達成することを証明した。また、能動学習や推薦において現れる問題に実際に適用し、その実性能について評価を行った。

2. Takuro Fukunaga. Adaptive Algorithm for Finding Connected Dominating Sets in Uncertain Graphs, IEEE/ACM Transactions on Networking 28, 1, 387-398, 2020.

概要: 連結支配集合は、グラフ内のすべての頂点と隣接しており、かつ連結な部分グラフを誘導する頂点集合のことである。重み最小の連結支配集合を計算する問題は、無線アドホックネットワークなどに応用を持つために活発に研究されている離散最適化問題である。本論文では、グラフが不確かな状況で連結支配集合を計算する適応的アルゴリズムを提案した。アルゴリズムの出力する戦略は、最適な戦略と比較して高々 $O(a \log k)$ 倍の重みを達成することが保証される。ここで a は頂点重みポリマトロイドシュタイナー木問題の近似比、 k はグラフが取りうるシナリオの数である。

3. Takuya Konishi, Takuro Fukunaga. End-to-End Learning for Prediction and Optimization with Gradient Boosting, European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases, Lecture Notes in Computer Science Vol. 12459, 191-207, 2020.

概要: 機械学習で最適化問題のパラメータをデータから推定し, そのパラメータを元に最適化を行う状況において, 推定と最適化を分けて実行するのではなく, 全体をまとめて実行する End-to-End 学習アルゴリズムについて議論した. 機械学習アルゴリズムとしては広く使われている勾配ブースティングを利用し, モデルの学習のために最適問題の最適値のパラメータに対するヘッセ行列の計算方法を考案した. また, End-to-End 学習が有効なケースはどのような場合かについて議論し, シミュレーションによって検証を行った.

(2)特許出願

研究期間累積件数:0 件(特許公開前のものも含む)

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. Takuro Fukunaga, Adaptive optimization for decision making from dynamic and uncertain data, Challenge for Society 5.0 -Approaches to Social Innovation-, AP 東京八重洲通り, 東京, 2018 年1月 24-25 日, 招待講演
2. 福永拓郎, 理化学研究所 桜舞賞(研究奨励賞), 不確実な状況下で劣モジュール関数最大化を行う適応的アルゴリズムの開発, 2019 年 3 月
3. 福永拓郎, 確率的組合せ最適化問題に対する適応的アルゴリズム, 日本オペレーションズ・リサーチ学会研究部会「最適化とその応用」, 中央大学後楽園キャンパス, 東京, 2019 年 3 月 16 日, 招待講演
4. 福永拓郎, Adaptive Algorithm for Finding Connected Dominating Sets in Uncertain Graphs, 電子情報通信学会コンピューテーション研究会, 2020 年 9 月 1 日, 招待講演
5. 福永拓郎, 不確実性下での適応的最適化, 日本オペレーションズ・リサーチ学会関西支部シンポジウム「最適化の理論と応用」, 2020 年 11 月 14 日, 招待講演