IBIS2006 オーガナイズドセッション「確率モデルと集団最適化」

確率モデルと集団最適化入門

赤穂昭太郎
産業技術総合研究所

セッション趣旨：最適化問題と学習

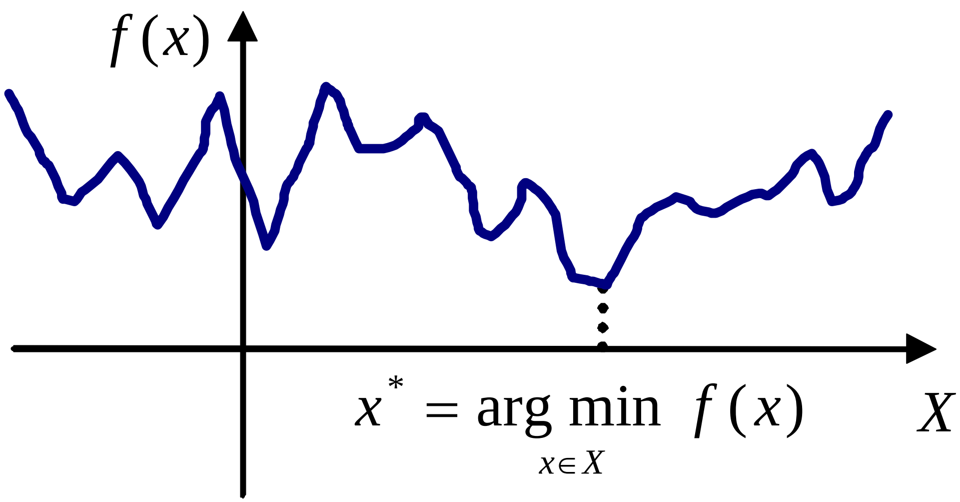
- 最適化問題は至るところにある
- 学習の問題もほとんどは最適化問題
- 逆に最適化問題に学習が役に立つらしい

EDA (Estimation of Distribution Algorithm)
最適化問題を「集団」で「ランダム」に解くときに「統計的学習」によって問題の構造を推定

セッションの構成

- 赤穂: 13:00-13:35
  EDA以前の確率的探索や集団探索の基本復習
- 伊庭: 13:45-14:40
  EDA, EDP のチュートリアル
- 鈴木: 14:50-15:45
  EDAに関する理論
- Mühlenbein (特別講演): 16:00-17:00
  EDA にまつわるいろいろな話

ランダム探索(1/2)



$$x^* = \arg\min_{x \in X} f(x)$$

最小値

- とても難しい問題
  - 広い探索空間
  - 複雑な探索空間
  - たくさんの局所解
  - 関数形未知
  - ノイズあり
- （とりあえず）問題に関する事前知識なし

ランダムに探すしかない！

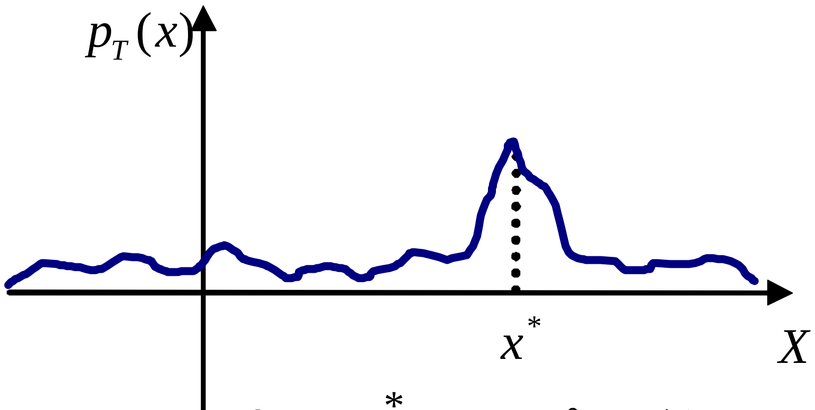
ランダム探索(2/2)

- $f(x)$ が小さくなる x は大きな確率でサンプルしたい（ボルツマン分布）

$$p_T(x) = \frac{1}{Z_T} \exp(-f(x)/T)$$

正規化定数

$$Z_T = \sum_{x \in X} \exp(-f(x)/T)$$



$T \to 0$ で x^* にサンプルが集中

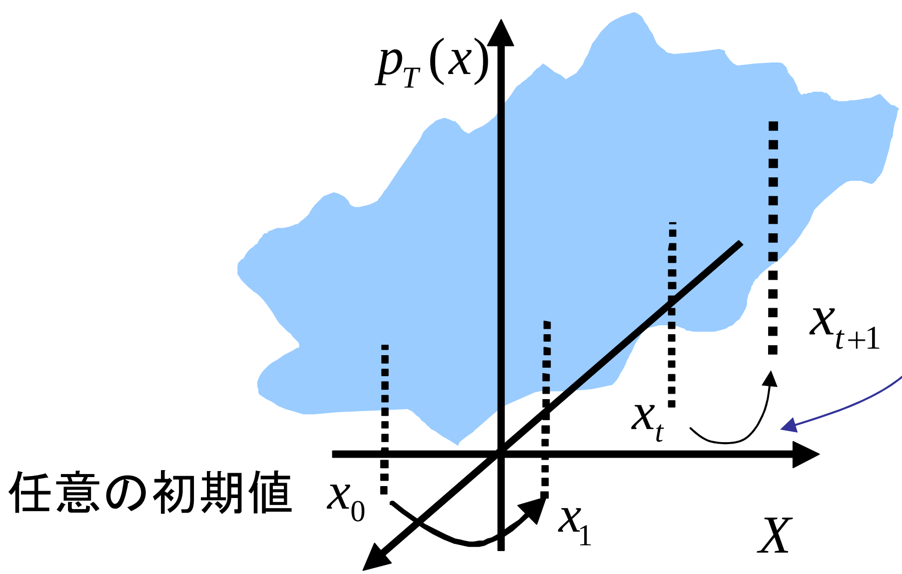
- Z_T はすべての $f(x)$ に関する和なので一般には計算は無理

サンプリングは無理？ → MCMCで解決！

マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)

- 一発の乱数生成は無理なので，極限分布が $p_T(x)$ になるような マルコフ連鎖の系列 $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_t$ を作る

- メトロポリスヘイスティングス法（MCMCの最も一般的な形） t =0,1,2,3,…. について Step1, Step2 を反復する



Step1.候補を確率的に生成

$q(x_{t+1} \mid x_t)$ 任意の提案分布

Step2.候補の採否を確率で決める

$$\alpha(x_t, x_{t+1}) = \frac{p_T(x_{t+1})q(x_t \mid x_{t+1})}{p_T(x_t)q(x_{t+1} \mid x_t)}$$

MCMCの性質

- 収束性:
  任意の初期値，任意の提案分布 $q(x_{t+1} | x_t)$ を使ったときの $p_T(x)$ への収束保証

- 計算の局所性:
  - $\alpha(x_t, x_{t+1})$ は $p_T(x)$ の比だけに依存するので計算が大変な Z_T を知る必要がない
  - x_t と x_{t+1} だけから局所的に計算できる

$$\alpha(x_t, x_{t+1}) = \frac{p_T(x_{t+1}) q(x_t | x_{t+1})}{p_T(x_t) q(x_{t+1} | x_t)} = \frac{q(x_t | x_{t+1})}{q(x_{t+1} | x_t)} \exp\left[-\left\{f(x_{t+1}) - f(x_t)\right\}/T\right]$$

確率的最適化の効率化

- MCMC は遅いのでいろいろ工夫が必要

- 提案分布$q(x'|x)$をうまく設計
  ⇒ Exploration-Exploitation, 事前知識
- 温度T をうまく設定
  ⇒ シミュレーテッドアニーリング
- 集団でがんばる
  ⇒集団モンテカルロ，遺伝的アルゴリズム

確率的最適化の効率化(1/3)
提案分布の設計

- 二つの相反する要請
  - できるだけ探索空間をくまなく飛び回りたい (exploration)
  - できるだけ棄却を少なくしたい (exploitation)

連続な関数なら，近いところは採択されやすいが，
近くばかり探していると全体が探せない

事前知識を使って両立 → なければ学習で獲得

（「連続」というのも事前知識の一種）

本セッションのメインテーマ！

確率的最適化の効率化(2/3)
温度をうまく設定

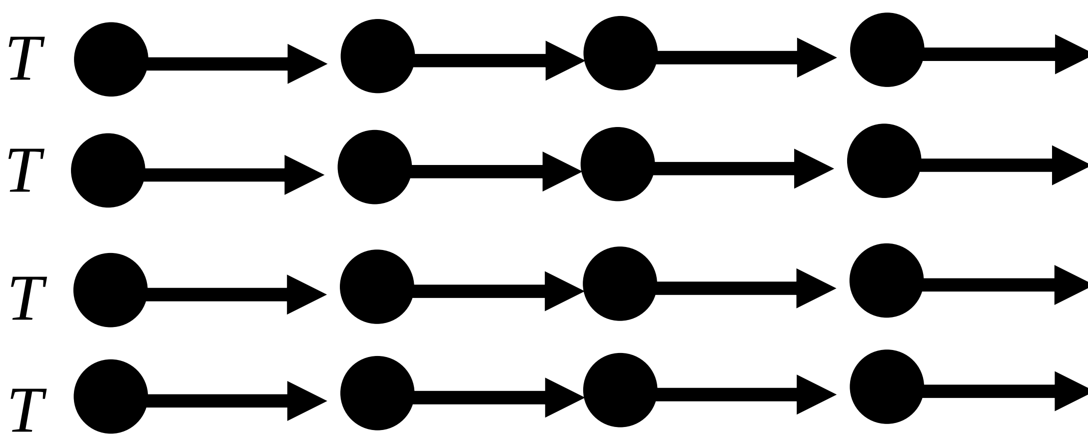
- 温度と探索の難しさの関係
  - 最適化の観点からはTは0にしたい（最適解にピーク）
  - 探索はTが0に近づくほど難しい（凹凸が多くなる）
- シミュレーテッドアニーリング：
  - 徐々に温度を下げる（できるだけ速く下げたいが．．．）
- スケジューリング
  - 最適解に収束するための必要十分条件

$$\sum_{t=1}^{\infty} \exp(-D/T_t) = \infty \qquad \text{例：} \quad T_t = D \big/ \log t$$

  - 実際に使う人はもっとずっと速く温度を下げる

確率的最適化の効率化(3/3)
集団でがんばる

- どちらがいいか？
  - マルチプレーヤー K 人で $N-\alpha$ 時間やるか
  - シングルプレーヤーで NK時間やるか
- 最もナイーブなMCMCの集団拡張:
  - K 個の探索点を独立に走らせる



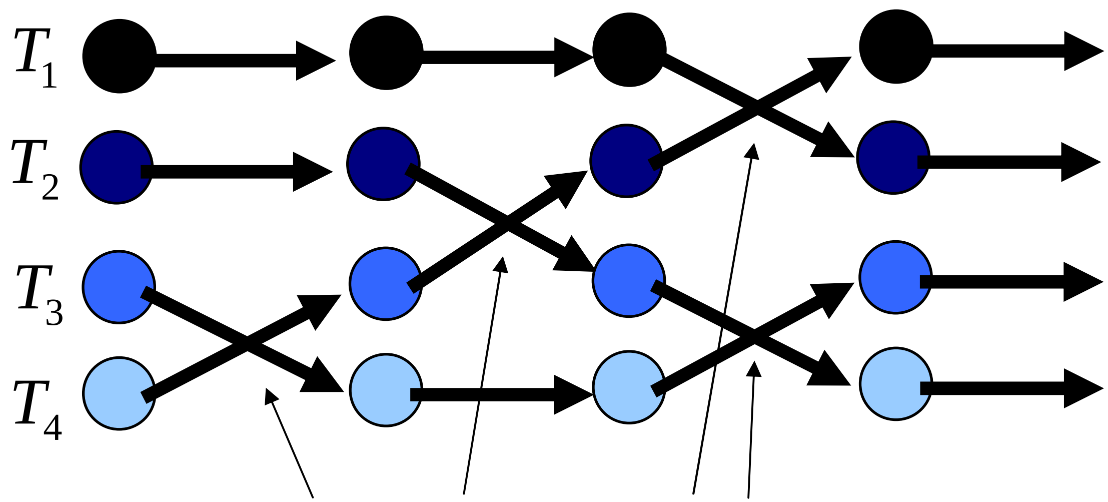
$$p(x^{(1)},\cdots,x^{(K)}) = \prod_{k=1}^{K} p_T(x^{(k)})$$

$$q(x_{t+1}^{(k)} \mid x_t^{(k)})$$

集団MCMCの一般化

例：マルチテンパリング法

いろいろな温度で走らせる
（並列シミュレーテッド
アニーリング）



二つの個体の交換（提案分布の一般化）

$$p(x^{(1)},\cdots,x^{(K)})=\prod_{k=1}^{K}p_T(x^{(k)}) \Rightarrow p(x^{(1)},\cdots,x^{(K)})=p_{T_1}(x^{(1)})p_{T_2}(x^{(2)})p_{T_K}(x^{(K)})$$

$$q(x_{t+1}^{(k)}\mid x_t^{(k)}) \Rightarrow q(x_{t+1}^{(k)},x_{t+1}^{(k+1)}\mid x_t^{(k)},x_t^{(k+1)})$$

最小値探索と期待値計算

- もともとMCMCは期待値計算のための手法
- 最小値探索と期待値計算では問題の種類が微妙に異なるが共通部分も多い
- 最小値探索と期待値の関係：
  - 正則条件の下で

$$\lim_{T \to +0} \frac{\int x \exp(-f(x)/T)\,dx}{\int \exp(-f(x)/T)\,dx} = \arg\min_x f(x)$$

- 期待値計算のための手法（最適化にも使える）
  - 重点サンプリング
  - リサンプリング

重点サンプリングとリサンプリング

- 重点サンプリング：
  - 目的の $p(x)$ とは異なる分布 $r(x)$ からのサンプル⇒ 重み $w(x)=p(x)/r(x)$ で重みつき平均すると $p(x)$ での期待値になる

$$\frac{1}{\sum w_i}\sum_i w_i x_i \cong \int xp(x)dx \qquad w_i = p(x_i)/r(x_i)$$

- リサンプリング
  - 重み $w(x)$ に比例する確率で$r(x)$からのサンプルを復元抽出すると$p(x)$からのサンプルになる (生成・消滅過程)
- パーティクルフィルタ（逐次モンテカルロ）で使われる

遺伝的アルゴリズム（GA）

- 選択：$p(x)$に従ってリサンプリング

  $r(x)$で割っていないのでどんどん温度が下がる（遺伝的浮動，シミュレーテッドアニーリング）
- 突然変異：分布 $q(x'|x)$で各個体を動かす

  提案分布に対応．
  採否はないが，選択によって分布に収束
- 交差：分布$r(x',y'|x,y)$で二つの個体から新たな個体を作る

  ２変数の提案分布．パラレルテンパリングよりも高級だが，設計と問題によっては採択率が低い

構造獲得と最適化

- 事前知識がない場合，学習によって構造獲得
  - 探索点･探索集団が学習サンプル

- どんな構造を獲得するか？
  - $p_T(x)$ 全体のモデル化（平均場近似）　$p_T(x) \cong p(x;\theta)$
  - $p_T(x)$ の値が大きいところのモデル化（EDA）

- ポイント：
  - 分布の近さよりも，最適解の可能性のあるところをもらさずサンプルしてくれるモデルがうれしい

$$p_T(x)\ \text{大} \Rightarrow p(x;\theta)\ \text{大}$$

ナイーブEDA
Step1: 集団から$f(x)$の小さいものを選ぶ
Step2: 選ばれた集団からモデル$p(x;\theta)$を学習
Step3:$p(x;\theta)$から集団を生成

逆は必ずしも成り立たなくてもいい
（あまりゴミがふえても困るが）

関連する学習研究

- 能動学習
  - 共通点:サンプルをコントロールできるところ
  - 違い:確率モデルの精度が主たる目的
  - ポイント:モデルに関する事前知識があるか
- Bandit problem, 強化学習
  - 共通点:最適化と確率同定の両方が目的
  - 違い:特殊な最適化(マルコフ決定過程)
  - ポイント1:Exploration-exploitation
  - ポイント2:必ずしも確率モデルのパラメータ同定は必要ないかもしれない (GAとEDAの関係?)
- 平均場近似・確率伝播法
  - ある条件を満たすグラフィカルモデルでは効率的に最大値が見つかる

その他の職人技的な話題

- 変数変換と潜在変数
  - 変数間の交互作用があると最適化が難しい(XORとか)⇒PCA や ICA で独立な表現を見つける
  - マルチカノニカル法:関数値の空間でモンテカルロを実行
  - 潜在変数の導入で問題が易しくなる場合⇒EMアルゴリズム
- 複雑な空間
  - 時系列・文字列・木のように確率変数の次元が一定でない場合も, 確率変数の生成・消滅過程を導入すればよい⇒ジャンプ拡散MCMC

最終兵器としての最適化法

- ユーザとしては最後の手段的な存在
  - より簡単な問題で近似できないかを考えるべき
  - ドメイン固有の知見を生かした最適化法の改良
- 理論解析の対象として
  - 確率過程の面白い例題
  - 最終兵器に理論的な性能保証を与える

確率最適化・集団最適化に関する IBIS2006発表タイトル

- 1-13:柳井孝介(東大)・伊庭斉志(東大)
  「確率分布を用いたプログラム進化」
- 1-14: 長谷川禎彦・伊庭斉志(東大)
  「ノード間依存推定による確率的プログラム生成手法」
- 1-15: 永田賢二・渡辺澄夫(東工大)
  「交換モンテカルロ法における交換率の解析」
- 1-17: 比護貴之(東工大)・高玉 圭樹(電通大)
  「多点探索型の最適化計算における収束問題のための階層型インポータンスサンプリング」
- 2-10: 鈴木譲(阪大)
  「GAの基本的定理を統計力学の方法を用いて証明する」

  ほか