

Oral Presentations | Track 5: Advanced Data Utilization & Domain-Specific Applications (Medical Information, Education, Geographical Information, etc.)

📅 Fri. Mar 1, 2024 1:30 PM - 3:40 PM JST | Fri. Mar 1, 2024 4:30 AM - 6:40 AM UTC | 📺 T5-B オンライン (Zoom Events)

環境科学

座長:加藤 誠(筑波大学)

コメンテータ:伊藤 貴之(お茶の水女子大学)

1:30 PM - 1:35 PM JST | 4:30 AM - 4:35 AM UTC

Introduction

1:35 PM - 1:50 PM JST | 4:35 AM - 4:50 AM UTC

[T5-B-8-01] 灯油消費に関する多変量時系列予測方式

*横須賀 祐太¹、神長 宏侑¹、齋藤 瑞紀¹、林 康弘²、清木 康² (1. 武蔵野大学アジアAI研究所 客員研究員、2. 武蔵野大学 データサイエンス学部)

1:50 PM - 2:15 PM JST | 4:50 AM - 5:15 AM UTC

[T5-B-8-02] メタ学習を用いた物理条件の異なるハミルトニアンの学習

*坂本 州¹、岩田 具治²、田中 佑典² (1. 奈良先端科学技術大学院大学、2. NTTコミュニケーション科学基礎研究所)

2:15 PM - 2:40 PM JST | 5:15 AM - 5:40 AM UTC

[T5-B-8-03] ブラックボックス関数が与えられた予算制約付組合せ最適設備投資問題に対するモンテカルロ木探索法の提案

*行木 渉真¹、中村 篤祥²、安ヶ平 裕介³、内垣内 洋³、平松 道晶³、竹本 享史³ (1. 北海道大学 情報エレクトロニクス学科 情報理工学コース アルゴリズム研究室、2. 北海道大学 情報科学研究院 情報理工学部門 知識ソフトウェア科学分野、3. (株) 日立製作所)

2:40 PM - 3:05 PM JST | 5:40 AM - 6:05 AM UTC

[T5-B-8-04] 微生物学的水質予測のための符号制約付き学習アルゴリズム

*高田 裕也¹、小野 晴生¹、門屋 俊祐²、佐野 大輔³、加藤 毅⁴ (1. 群馬大学大学院理工学府、2. 東京大学大学院工学系研究科、3. 東北大学大学院工学研究科、4. 群馬大学情報学部)

3:05 PM - 3:30 PM JST | 6:05 AM - 6:30 AM UTC

[T5-B-8-05] SABM：大規模言語モデルに基づくエージェントベース実世界シミュレーション

*呉 増青^{1,2}、彭 潤³、韓 昶⁴、鄭 舒元¹、肖 川^{1,5} (1. 大阪大学、2. 京都大学、3. ミシガン大学、4. フォードム大学、5. 名古屋大学)

灯油消費に関する多変量時系列予測方式

横須賀祐太† 神長宏侑† 齋藤瑞紀† 林康弘‡ 清木康‡

† 武蔵野大学アジア AI 研究所 〒135-8181 東京都江東区有明 3 丁目 3 番 3 号

‡ 武蔵野大学データサイエンス学部 〒135-8181 東京都江東区有明 3 丁目 3 番 3 号

E-mail: † yuta.yokosuka@ds.musashino-u.ac.jp, ‡ {yhayashi, y-kiyoki}@musashino-u.ac.jp

あらまし 本稿は、灯油の出荷予測における多変量時系列予測モデルの提案である。本予測モデルは、前処理として、灯油の出荷における大量購入や外れ値への対処を行い、灯油販売の実績データ(販売量)と天気データ(気温)との時系列相関量計算を行う。本モデルは予測したい日の曜日と予報された天気を条件として実績データにおける近似値を予測値として算出する。今回、私たちは提案するモデルの有効性を実データとの検証を通じて評価する。

キーワード 時系列データ処理, 相関量計算, 灯油消費量, 資源・エネルギー

1. はじめに

灯油の出荷・灯油販売において、販売店への卸売りである BtoB の関係と消費者へ直接販売する BtoC の関係が存在する。販売店に対する灯油販売では、1 日に運べる灯油の量が決まっている為、各店舗への配送は、店舗の在庫が無くなる前に、適切な量を配送する必要がある。参考文献[1]の調査結果から、灯油消費の用途として、暖房用を使用する割合が 89.7%以上となり、冬における販売が売上の大半を占める。また、店舗型経営において、売行きは休日・祝日が高くなる傾向がある。本研究の目的は、灯油を販売する立場から取得可能な情報である、天候や過去の出荷量を元に、灯油消費における予測システムを確立し、効率の良い配送を行えることである。

2. 本研究の方針

我々は、2022 年 12 月 1 日から 2023 年 11 月 30 日までに取得した店舗の出荷量を対象に、出荷量に関する要素を絞り込み、要素に応じた場合分けをした後にユークリッド距離による計算を行う。売上予測の方式として重回帰分析や SARIMA モデル等が存在するが、本研究は曜日や月毎により変動する特徴を考慮したフィルタリング、気象庁が提供する過去の天気データ[2]との距離計算により、近似する売上を取得し、予測することが主体である。従来方式との優位性として、重回帰分析では時間に依存する特有のパターンやトレンドがある為、各説明変数が変動する可能性があり、SARIMA モデルでは単一変数を仮定している為、多変量に直接の対応はしていない。

本研究では、季節に依存する特有のパターンやトレンドを踏まえ、気象データとの相関を計量するモデルをシステムに導入する。重回帰分析、SARIMA モデルで表現した予測結果と 2023 年 12 月の実際の出荷量を比較し、提案手法の長所と短所について検討を行う。

3. 関連研究

売上予測はさまざまな産業で実施されており、その手法も幅広い。Fukushima ら[3]は過去の販売履歴データを基にしたニューラルネットワークモデルの学習を行うことで予測モデルの構築を試み、Chang ら[4]は、非定常性の時系列データとしてアパレル業の売上データを使用し、SARIMA モデルの構築とその有用性を検証している。Nakamura ら[5]は、相関分析と分散分析を適用することで日々の売上高と気象要因との関係について解析し、回帰分析と比較したファジィ推論モデルを構築した。

灯油の消費量の要因分析については、Adachi ら[6]は、新潟市を対象に、夏季、冬季の住まい方の実態及びエネルギー消費量原単位を把握し、エネルギー消費量の要因分析を行い、住宅用エネルギー消費構造の解明を行っている。Adachi らの調査結果では灯油消費量が 4 月から 10 月においては激減し、エネルギー消費量に大きく影響する要因が「気候」という地域差によるところが大きいという結論を Adachi らは支持している。

4. 提案手法

4.1. データ構造

本研究では、消費者に対する直接の販売ではなく、販売店から販売店への灯油の販売を想定しているため、一般的に売上には、広告活動の有無や店頭販売価格との相関が認められるが、毎日の営業終了時の灯油用オイルタンクの残量、入荷量、出荷量のみを取得可能な情報として定義する。また、灯油の使用用途は、89.7%[1]が暖房用であるとされ、灯油販売における出荷量と該当店舗の平均気温を比較すると、負の相関関係が確認できる(図 1)が、単月の出荷量と平均気温からは、曜日によって売上に差が生じ(図 2)、降水量との比較においては負の相関が示されている(図 3)。

雨天の際に出荷量が少ない傾向として、一般的に灯

油缶は屋外に保管されており、店頭まで雨の中持ち運ぶ必要がある為、買い控えが起きていると推測される。また、業界内では、気温が 7 度以下の場合、灯油が売れる傾向があると言われている。図 2 から平均気温が 7 度以下を下回った場合に売上が上がる傾向があることから、気象庁より、時間単位の気温を取得し、1 日の中で 7 度を下回った回数を計測した。なお、Mae らの研究[7]より、就寝中とみられる深夜においては暖房の使用率が著しく下がることから、7 度を下回った回数をカウントする時間帯は 6 時から 24 時までに限定する。本研究では、1 日辺りの出荷量、平均気温、降水量、時間帯辺りの 7 度を下回った回数を対象に、計算を実施する。



図 1：時間経過による出荷量と平均気温

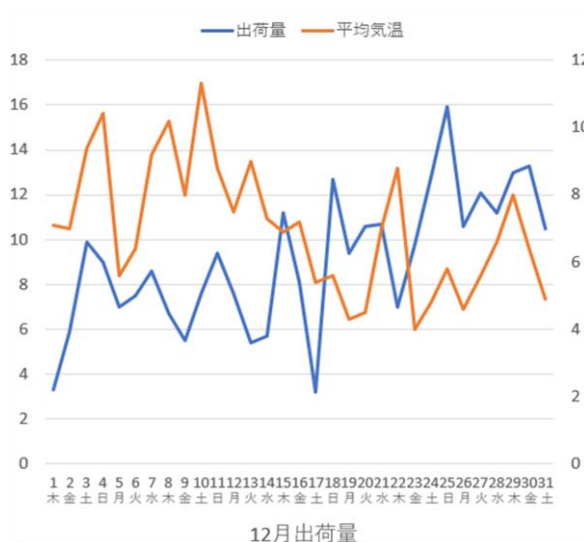


図 2：12 月 出荷量と平均気温

4.2. 重回帰分析モデル

重回帰分析は、複数の説明変数が目的変数にどのように影響しているか理解する為の統計的手法である。

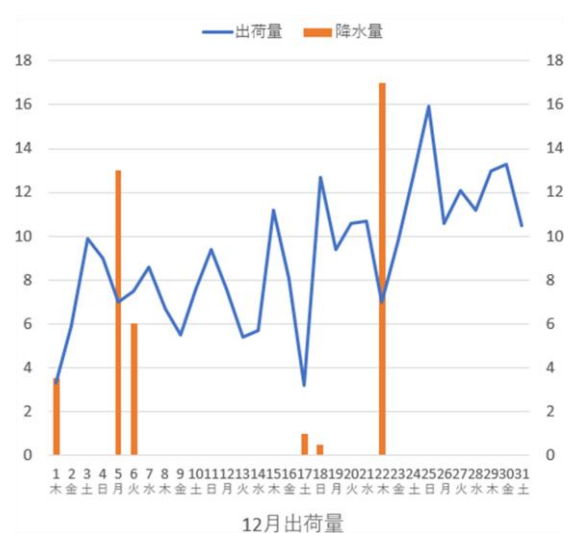


図 3：12 月 出荷量と降水量

目的変数は灯油の出荷量である。説明変数は、平均気温、時間帯辺りの 7 度以下回数、降水量、土日・祝日である。曜日については、過学習や共線形性の発生を防ぐ為、土曜日または日曜日、国民の祝日の場合のみ 1 とし、他は 0 とする。トレンド、季節性、周期性が影響していることを考慮し、12 月のみを対象とした場合と、出荷量が多い 11 月から 3 月に限定した場合で比較を行う。

4.3. SARIMA モデル

SARIMA モデルは、時系列データの予測に使用されるモデリング手法であり、自己回帰成分、積分成分、移動平均成分を持つ ARIMA モデルに季節要素を追加したモデルである。季節成分も考慮できるため、トレンドが非定常性を示すデータにも適している。本研究では、対象データをトレーニングする。ディッキーフラー検定を実施して、帰無仮説が棄却できるかどうかを判定し、定常性の有無を確認する。モデルの各パラメータ（自己回帰、階差、移動平均、季節性の自己回帰、季節性の階差、季節性の移動平均）は探索的に組み合わせを試し、RMSE を指標として最適なパラメータを決定する。周期は 12 とする。

4.4. 本方式の数学モデル

本方式の数学モデルとして 3 次元のユークリッド距離計算を採用する。本方式の特徴は、現在の状況と最も類似する過去の事象を、距離計算により発見し、その過去事象において発生した次時点の状況を予測として抽出する点にある。平均気温、時間帯辺りの 7 度以下回数、降水量を計算次元として設定し、それぞれの単位を指数に変換するため、蓄積された過去分と予測日、それぞれのデータに対して標準化を実施し、予測

したい日付の曜日と合致する曜日だけをフィルタリングした上で、予測日と過去の平均気温、時間帯辺りの7度以下回数、降水量を対象に距離計算を行う。距離計算の結果、予測をしたい日と最も近い過去の日付を求め、その出荷量を予測値として算出する。本方式における標準化と距離計算の式を以下に示す。

標準化：
$$Z = \frac{X - \mu}{\sigma}$$

(X：元のデータの値、μ：データの平均値、σ：データの標準偏差)

3次元の距離：
$$d_i = \sqrt{(X - X_i)^2 + (Y - Y_i)^2 + (Z - Z_i)^2}$$

$$\{i = 1, 2, \dots, N\}$$

(X：予測日の平均気温、Y：予測日の1時間単位での7度以下回数、Z：予測日の降水量、 X_i ：過去の平均気温、 Y_i ：過去の1時間単位での7度以下回数、 Z_i ：過去の降水量、N：データ数)

距離計算の結果は、距離が最も近かった1件の出荷量と、上位3件の出荷量の平均値を求め、比較を行う。本研究では、灯油が多く出荷される時期(11月から3月)とそれ以外(4月から10月)に分離し、参照する過去データにおいても11月から3月に限定した。店舗によっては、稀に業者による大量購入や、残量の計測を怠ったことによる出荷量の不明、休業日により出荷量が0の場合も存在する為、これらに該当する場合は、計算結果への影響を考慮し、参照するデータからは除外した。

5. 実験結果

各モデルにおける予測結果は表1の通りである。また、予測期間内の実測値との差の合計と、実測値を基準とした差の絶対合計は表2に示される。

予測に関して、11月から3月までの期間を対象とした、ユークリッド距離計算が高い精度で予測できていることが分かった。また、距離が最も近かった1件よりも、上位3件の平均値の方がより高い精度での判定ができています。他方、重回帰分析モデルでは、12月だけの過去データから求めた回帰式では、比較的高い精度で予測できているが、11月から3月の期間を含めた回帰式では、実測値から大幅に上回る予測値が生じた。SARIMAモデルでは、絶対合計においては高い精度で予測できているが、合計においてはマイナスの結果となった。また、ディッキー-フラー検定の結果(図4)は、p値が0.7123となり、有意水準である0.05を大きく上回り、帰無仮説を棄却できないことが分かり、出荷量の非定常性を示した。

表 1： 実測値と各モデル予想結果

日付	曜日	実測値	重回帰分析	重回帰分析	SARIMA	ユークリッド [*]	ユークリッド [*]
			2022年12月	11月～3月	2022年12月 ～ 2023年11月	11月～3月	(上位3平均) 11月～3月
2023/12/1	金	5.9	10	20.5	4.212884	4.2	7.8
2023/12/2	土	7.8	11.5	22.1	4.70753	7.6	7.4
2023/12/3	日	9.2	10.7	21.2	4.988309	6.6	7.4
2023/12/4	月	6.7	7.1	19	5.297221	7.9	7.8
2023/12/5	火	6.3	6.5	18.4	5.532859	3.1	4.5
2023/12/6	水	3.4	5.8	17.3	6.520527	8.2	6.5
2023/12/7	木	4.4	3.3	16.9	6.060472	2.3	2.3
2023/12/8	金	4.4	5.3	17.9	5.634725	6.6	4.9
2023/12/9	土	6.2	4.7	18.5	6.0763	7.6	4.5
2023/12/10	日	6.2	2.1	17.6	5.904972	2.5	6.3
2023/12/11	月	4.6	3.3	16.9	4.950101	2.3	4.2
2023/12/12	火	2.1	4	16.3	5.635608	6.3	5.3
2023/12/13	水	3.6	6.9	19	5.823884	8.6	8.3
2023/12/14	木	4.3	8	18.9	5.53247	6.7	4.8
2023/12/15	金	6.9	5.3	17.6	5.221046	6.6	4.6
2023/12/16	土	6.2	0.6	16.9	5.554693	7.6	6
2023/12/17	日	7	7.8	20.7	5.753498	10.2	8.5
2023/12/18	月	7.4	10.4	21.4	6.472958	9.4	9.8
2023/12/19	火	8.1	8.9	20.7	6.382235	7.3	8.4
2023/12/20	水	7.1	7.8	19.3	6.64237	3.6	7.6
2023/12/21	木	9.8	8.8	19.9	7.018344	7	8.3
2023/12/22	金	8.1	9.7	21.5	5.997406	9.8	8.6

表 2： 合計と絶対合計

	重回帰分析	重回帰分析	SARIMA	ユークリッド [*]	ユークリッド [*]
	2022年12月	11月～3月		11月～3月	(上位3位の平均) 11月～3月
合計	12.8	282.8	-9.779588	6.3	8.1
絶対合計	45.2	282.8	36.495162	52.7	32.5

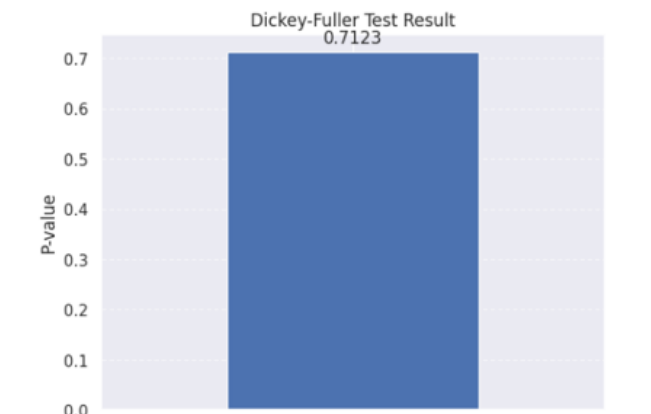


図 4： ディッキー-フラー検定結果

5. 1. 実験結果に関する考察

重回帰分析モデルにおいて、参照するデータの期間を変更することによって大きく差が生じた理由としては、データが(図4)からも、非定常性の時系列データになっていた為、トレンドや季節性を考慮できず、各説明変数が変動した(表3,4)ことが原因と推察される。

SARIMAモデルの合計値がマイナスになった理由としては、図1のようにデータの周期性が安定していな

かった為、少ない出荷量で算出されることが多かったと考えられる。

表 3：重回帰分析 比較

	12月のみ	11月から3月
補正 R2	0.324381848	0.574615172
有意 F	0.006075214	0.006075214

表 4：重回帰分析 係数・t・p 値

		12月のみ	11月から3月
係数	切片	24.41657846	24.41657846
	休日・祝日	2.069690726	2.069690726
	平均気温	-1.690018818	-1.690018818
	7度以下回数	-0.51613877	-0.51613877
	降水量の合計(mm)	-0.041157842	-0.041157842
t	切片	5.619256495	5.619256495
	休日・祝日	2.008049418	2.008049418
	平均気温	-3.690546377	-3.690546377
	7度以下回数	-2.964101904	-2.964101904
	降水量の合計(mm)	-0.324571363	-0.324571363
P-値	切片	6.61044E-06	6.61044E-06
	休日・祝日	0.055133259	0.055133259
	平均気温	0.001042187	0.001042187
	7度以下回数	0.006420249	0.006420249
	降水量の合計(mm)	0.748102521	0.748102521

ユークリッド距離モデルの精度が高かった理由としては、曜日や平均気温、降水量、暖房が良く使われると思われる外気温の回数の特徴を捉えることが出来た為と思われる。

6. まとめ

本稿では、灯油を販売する立場から取得可能な情報として、天候や過去の出荷量を対象とし、灯油消費における予測システムを提案し、高い精度の予測結果を示した。さらに本研究を発展させるためには、出荷量予測と連携した、配送における効率的なシフト形成が必要になる。また、実際の天気と天気予報においては誤差が生じる為、誤差を考慮したパラメータの調整を行う必要がある[8][9]。今後の課題としては、より多くのデータセットを用いてモデルを訓練することによりさらなる精度向上を図ることが挙げられる。

参 考 文 献

- [1] 経済産業省資源エネルギー庁 (財)日本エネルギー経済研究所石油情報センター. 平成 18 年度灯油消費実態調査, 2005.
- [2] 国土交通省気象庁,

<https://www.data.jma.go.jp>

- [3] 福島航平 (兵庫県立大学), 大島裕明 (兵庫県立大学), チラシ媒体通販における商品の販売数予測, DEIM2022, 2022.
- [4] 張瀚天, 村井諒, 佐々木健佑, 片山茜, 善甫啓一, 中林紀彦. アパレル業の売上予測における時系列モデルの適応条件の検討. 人工知能学会全国大会, pp. 1-4, 2016.
- [5] 中村俊輔, 古殿幸雄, 気象要因との関連におけるファジィ推論需要予測モデルの一考察, バイオメディカル・ファジィ・システム学会誌, 10 巻, 1 号, p. 26-32, 2008.
- [6] 足立直之, 赤林伸一, 吉野博, 真保聡裕, 坊垣和明, 澤地孝男, 住宅におけるエネルギー消費量と住まい方に関する実態調査 : 新潟市におけるエネルギー需要構造に関する研究 その1, 日本建築学会計画系論文集, 59 巻, 465 号, p. 49-59, 1994.
- [7] 前真之, 鍋島美奈子, 二宮秀典, 永村一雄, 長井達夫, 鎌田元康. 集合住宅における暖房の使用状況に関する研究, 空気調和・衛生工学会論文集, No. 89, Apr. 2003.
- [8] Yasushi Kiyoki and Sacko Ishihara: "A Semantic Search Space Integration Method for Meta-level Knowledge Acquisition from Heterogeneous Databases," Information Modeling and Knowledge Bases (IOS Press), Vol. 14, pp.86-103, May 2002.
- [9] Kiyoki, Y., Chen, X., Veasommai, C., Wijitdechakul, J., Sasaki, S., Koopipat, C., & Chawakitchareon, P.: "A semantic-associative computing system with multi-dimensional world map for ocean-environment analysis", Information Modelling and Knowledge Bases XXX, pp. 147-168.

メタ学習を用いた物理条件の異なるハミルトニアン学習

坂本 州[†] 岩田 具治^{††} 田中 佑典^{††}

[†] 奈良先端科学技術大学院大学 〒630-0192 奈良県生駒市高山町 8916 番地 5 号

^{††} NTT コミュニケーション科学基礎研究所 〒619-0237 京都府相楽郡精華町光台 2 丁目 4 号

E-mail: [†]sakamoto.shu.sn2@is.naist.jp, ^{††}{tomoharu.iwata,ysk.tanaka}@ntt.com

あらまし 近年、物理現象を観測したデータから機械学習を用いて物理ダイナミクスを推定する手法が注目されている。その1つである Hamiltonian Neural Network (HNN) は、ハミルトン力学に基づいて設計され、エネルギー保存則を満たす出力が得られるように力学系を学習できる。しかし、HNN は1つの系のみを学習することを前提としており、物理パラメータの異なる系を推定するためには再学習を行う必要がある。本研究では、物理パラメータを特徴量に加えることでその違いを考慮できるように HNN を拡張し、異なる系のハミルトニアンを予測できる手法を提案する。さらに、このモデルに既存のメタ学習手法を適用し、複数の系のデータを学習することで、学習に使用していない系に対して少量のデータでも高い性能で適合する手法を提案する。物理パラメータを特徴量に加えることの有効性を示す実験と、少量の学習に使用しない系のデータに対する適合性能を示す実験を行い、既存の手法に比べ、それぞれの提案手法が高い性能を示した。

キーワード 物理モデル, ハミルトン力学, 物理シミュレーション, メタ学習, Physical Models, Hamiltonian Mechanics, Physical Simulation, Meta-Learning

1 はじめに

物理現象の多くは、これまでの物理学の発展によって明らかになった微分方程式によって記述される。これらの方程式を解くことで、様々な条件での物理現象のシミュレーションが可能となる。物理シミュレーションは多くの自然科学分野や工学分野などにおいて活用されてきた。しかし、複雑な物理現象のモデル化には限界があることや、モデル化に高度な専門知識が必要な場合があることなどの課題があった。一方で、Neural Ordinary Differential Equation (Neural ODE) [1] のような、観測データから機械学習を用いて物理ダイナミクスを推定する手法が近年研究されている。機械学習によって、複雑な物理モデルを高度な専門知識を必要とせずに物理シミュレーションを可能とすることが期待されている。しかし、データのみから学習を行うブラックボックスな手法では、物理法則を満たさないモデルが学習されてしまう可能性がある。そこで、物理法則を満たす出力が得られるようにモデルに制約を与える手法が研究されている。その1つが Hamiltonian Neural Network (HNN) [2] である。HNN は、ハミルトン力学に基づいて設計されたニューラルネットワークであり、エネルギー保存則を満たす出力が得られるように力学系を学習できる。しかし、HNN は1つの系のみを学習することを前提としているため、物理パラメータの異なる系を推定するためには再学習を行う必要がある。

本論文ではこの問題を解決するため、系の物理パラメータを入力できるよう HNN を拡張し、系ごとの違いを学習できるようにするアプローチを提案する。例として振り子のデータを学習する場合について考える。HNN はひもの角度と角運動量のみを学習に用いるが、本論文の提案手法では、ひもの長さや物

体の質量という物理パラメータを特徴量として追加することで系ごとの違いを学習し、異なる系の間で共通する性質を学習する。これにより、学習していない系に対しても、別の系のデータを学習することで高い性能でモデル化できるようになることが期待できる。HNN への入力にこれらの物理パラメータを特徴量として加えたデータを用いつつ、HNN と同様に、エネルギー保存則を満たすように力学モデルを学習するのが本論文の提案手法である。このアプローチは、観測が難しい条件下の系やデータを手に入れるのに費用や手間がかかる系について、データが用意できなかった際に、関連する他の系のデータを学習に使用することで高い性能でシミュレーションを行うことを可能にする。

また、少量のデータだけが得られる場合、メタ学習を用いたアプローチが考えられる。メタ学習とは、関連する別のタスクのデータから学習の仕方を学習し、目的のタスクにおいて少量のデータからでも性能を高めることを目的とした手法である。複数の異なる系のデータによりメタ学習を行い、系を推定する方法を学習することで、学習していない未知の系を推定する性能が高まることが期待できる。

1つ目の実験では、複数の系についてのデータを学習に用いて、学習に使用していない系についてのデータを用いて性能を評価することで、物理パラメータを特徴量に追加することの有効性を確認する。2つ目の実験では、提案手法をメタ学習に拡張した際の性能の評価をする。学習に使用していないデータを用いて系に適合した際の性能を比較し、それぞれのメタ学習の手法に性能の差がどのように現れるかを確認する。

2 関連研究

力学系の時間発展は一般的に微分方程式により表現されるが、Neural Ordinary Differential Equations (Neural ODE) [1] やその発展 [3, 4] では Neural Network (NN) によって観測データから系のダイナミクスをモデル化する。Hamiltonian Neural Network (HNN) [2] やその変形 [5, 6] は NN によって系のエネルギーを表す関数をモデル化し、ハミルトンの運動方程式に従ってダイナミクスを導出することにより、エネルギー保存則に従う予測値を得ることができる。近年では、HNN を拡張しエネルギー散逸を考慮する研究 [7, 8] や、制御可能な入力を考慮する研究 [9] が進められている。また、HNN は状態変数の時間微分を教師データとして利用するが、ODE ソルバを用いて状態変数の軌道を学習に利用する研究 [10, 11] が行われている。本論文に近い位置づけの研究としては、系の物理パラメータを入力するよう Neural ODE を拡張した研究 [12] や、メタ学習の手法を HNN に適用することで異なる系の間で共通する性質を学習し、データが少量な系でも高い性能で適合するモデルの研究 [13] が行われている。本論文では、系の物理パラメータを特徴量として加えた HNN の拡張モデルを提案する。また、そのモデルにメタ学習を適用し、データが少量な系でも高い性能で適合する手法を提案する。

本論文で使用するメタ学習手法は Model-Agnostic Meta-Learning (MAML) [14] と Conditional Neural Processes (CNP) [15] である。近年、勾配法を用いて汎化性能の良いモデルの初期パラメータを学習するメタ学習手法の研究 [14, 16, 17] が行われており、MAML は代表的な手法の 1 つである。他方では、ブラックボックスな NN によってタスクへの適合をモデル化するメタ学習手法の研究 [15, 18-20] が進んでいる。その手法の 1 つが CNP であり、タスク別の特徴ベクトルを得ることでタスクへの適合をモデル化する。また、本論文で提案する手法のように、タスクの情報をメタ学習時に特徴量に追加する研究 [21] が行われている。

3 ハミルトニアンニューラルネットワーク

ハミルトン力学では、自由度 N の系を考えると、一般化座標 $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_N)$ と一般化運動量 $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ を用いて系が記述される。ハミルトン力学における運動方程式は、これらの状態変数 $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^\top$ とその時間微分 $\dot{\mathbf{x}}$ を用いて以下のように表される。

$$\dot{\mathbf{x}} = \Omega \nabla_{\mathbf{x}} H(\mathbf{x}) \quad (1)$$

ここで、 $\Omega = \begin{bmatrix} 0 & I_N \\ -I_N & 0 \end{bmatrix}$ (I_N は N 次元の単位行列) は $2N \times 2N$ の交代行列であり、 $H(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}$ はハミルトニアンと呼ばれるスカラー関数である。図 1 に概要を示す。ハミルトニアン H は系の全エネルギー量を示す関数であり、物理現象ごとに異なる式によって表現される。また、式 (1) よりハミルトニアン H は時間 t に依存しない保存量であることを導くこと

ができる。すなわち、式 (1) によって記述できる系はエネルギー保存則を満たす。互いに独立な変数 $q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N$ からなる $2N$ 次元空間を考えると、系の状態は空間の 1 点で表され、系の時間発展は空間上の軌道として捉えることができる。このような空間は相空間と呼ばれる。相空間の概要を図 2 に示す。式 (1) より得られる状態変数の時間微分 $\dot{\mathbf{x}}$ は相空間上のベクトル場と見なすことができ、軌道の初期値 $\mathbf{x}_0$ が与えられると、

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \int_{t_0}^{t_1} \dot{\mathbf{x}} dt \quad (2)$$

のように、時間 t について積分を行うことで系の時間発展を表す軌道を計算することができる。エネルギー保存則を満たす系では、図 2 の相空間上に示す青い軌道のように、状態変数は同じ軌道を周回し続ける。

Hamiltonian Neural Network (HNN) は、式 (1) に基づきニューラルネットワークを用いてハミルトニアンを学習する手法であり、損失関数は次のように表される。

$$\mathcal{L} = \|\dot{\mathbf{x}} - \Omega \nabla_{\mathbf{x}} H_{\theta}(\mathbf{x})\|_2^2 \quad (3)$$

ここで、 $H_{\theta} : \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}$ はパラメータ θ をもつニューラルネットワークである。図 3 に示すように、図 1 においてハミルトニアンを計算していた部分をニューラルネットワークに置き換えたのが HNN である。式 (1) を利用した損失関数を使用しており、エネルギー保存則を満たす力学系を学習することができる。ある物理パラメータを持つ 1 種類の系についての観測データの集合 $\{(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})\}$ を用いて学習を行う。計算過程に含まれる勾配の計算は、自動微分ライブラリを使用して簡単に行うことができる。

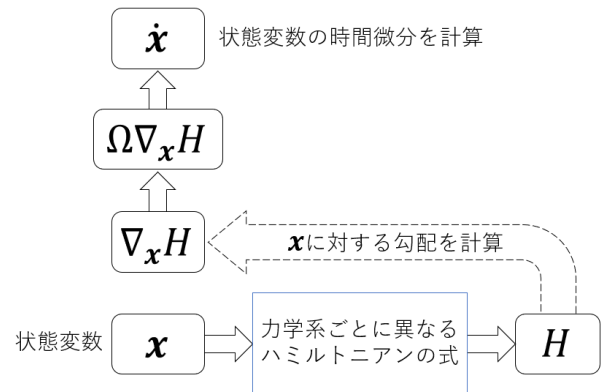


図 1 式 (1) の概要

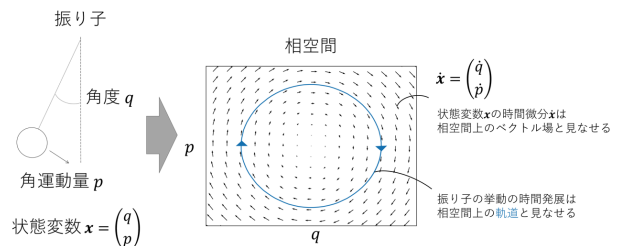


図 2 相空間

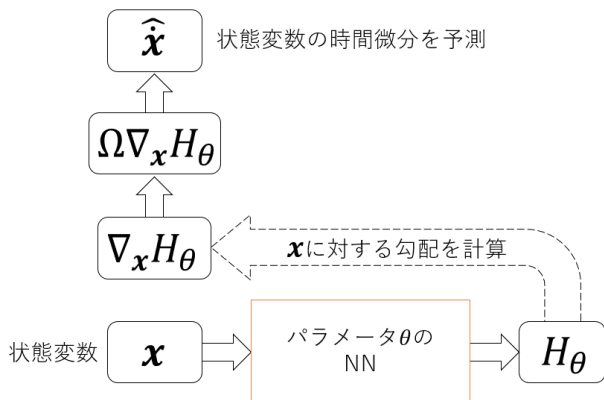


図3 HNN

4 物理パラメータに依存するハミルトニアンニューラルネットワーク

4.1 問題設定

まず初めに、タスクを定義する。タスクはある物理パラメータを持つ力学系の観測データを用いてその系をモデル化するという1つの問題を表す。本章で提案する手法の目的は、複数のタスクのデータを利用して、データの無い未知のタスクの系をモデル化することである。このアプローチは、観測データを用意するのが難しい系に対して、関連する他の系のデータを学習に使用することで高い性能でシミュレーションを行うことを可能にすると期待できる。

上記の問題設定を数学的に表記すると以下ようになる。 D をタスクの集合、 $d \in D$ をタスクとして、データ集合 $\{\mathcal{D}_d\}_{d \in D}$ と物理パラメータ $\{c_d\}_{d \in D}$ が与えられる。 $\mathcal{D}_d = \left\{ \{(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit})\}_{t=1}^T \right\}_{i=1}^I$ はタスク d に対応する系における T 時刻間の軌道 I 個のデータ集合であり、 $\mathbf{x}_{dit}$ は i 番目の軌道の t 時刻の状態変数、 $\dot{\mathbf{x}}_{dit}$ は i 番目の軌道の t 時刻の状態変数の時間微分を表す。 $\mathbf{c}_d = (c_{d1}, c_{d2}, \dots, c_{dB})$ はタスク d に対応する系の物理パラメータを表す。 $\{\mathcal{D}_d\}_{d \in D}$ と $\{c_d\}_{d \in D}$ を用いてモデルの学習を行い、未知のタスク $d^* \notin D$ に対応する系の状態変数 $\mathbf{x}_{d^*}$ と物理パラメータ $\mathbf{c}_{d^*}$ によって状態変数の時間微分 $\dot{\mathbf{x}}_{d^*}$ を推定することを目的とする。問題設定を図4に示す。

4.2 モデル

提案手法では、物理パラメータに依存するハミルトニアンをパラメータ θ をもつニューラルネットワーク $H_\theta^P: \mathbb{R}^{2N} \times \mathbb{R}^B \rightarrow \mathbb{R}$ によってモデル化する。状態変数 $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^\top$ と物理パラメータ $\mathbf{c}$ を入力し、状態変数の時間微分 $\dot{\mathbf{x}}$ を出力するモデルである。以下に式を示す。

$$\dot{\mathbf{x}} = \Omega \nabla_{\mathbf{x}} H_\theta^P(\mathbf{x}, \mathbf{c}) \quad (10)$$

このモデルの概要図を図5に示す。

4.3 学習方法

提案手法において最適なパラメータ θ を推定するために解

くべき最適化問題はデータ集合 $\{\mathcal{D}_d\}_{d \in D}$ と物理パラメータ $\{c_d\}_{d \in D}$ を用いて

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta} \sum_{d \sim D} \mathcal{L}(\mathcal{D}_d; \theta) \quad (11)$$

と計算する。目的関数 $\mathcal{L}(\mathcal{D}_d; \theta)$ は式(10)より

$$\mathcal{L}(\mathcal{D}_d; \theta) = \frac{1}{IT} \sum_{(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit}) \in \mathcal{D}_d} \left\| \dot{\mathbf{x}}_{dit} - \Omega \nabla_{\mathbf{x}} H_\theta^P(\mathbf{x}_{dit}, \mathbf{c}_d) \right\|_2^2 \quad (12)$$

とする。各タスクのデータに対する目的関数を計算し、合計とそれに対する勾配を計算してパラメータ θ を更新する。

4.4 実験設定

4.4.1 データセット

実験には調和振動子、単振り子の2種類の物理現象についてのデータセットを使用した。データに含まれる各軌道は以下に示すハミルトニアンを用いて、式(1)より得られる微分方程式と式(2)による積分によって生成した。訓練データは物理パラメータがそれぞれ異なる5000個の系からなり、テストデータとバリデーションデータは100個の系からなる。各系のデータは1s間の20個の軌道の集合と系の物理パラメータにより構成される。各軌道のサンプリング周波数は10Hzである。また、各サンプルは各時刻における状態変数とその時間微分により構成される。それぞれの力学系を表現するハミルトニアンの式と、系を決定する際に使用した物理パラメータの分布を以下に説明する。

a) 調和振動子

調和振動子のハミルトニアンは以下の式で表される。摩擦がなく、保存力のみが働く系を考える。

$$H = \frac{kq^2}{2} + \frac{p^2}{2m} \quad (9)$$

ここで、 $\mathbf{q}$ は座標、 $\mathbf{p}$ は運動量であり、 k はばね定数、 m は質量を表す。それぞれの物理パラメータは $(m, k) \in ([0.5, 2], [0.5, 2])$ の範囲における一様乱数より決定した。また、状態変数の軌道の初期値は $(q, p) \in ([-10, 10]^2)$ の範囲における一様乱数より決定した。

b) 単振り子

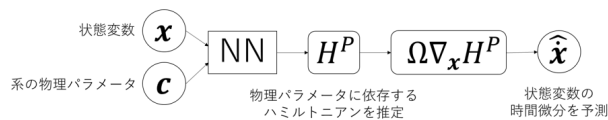
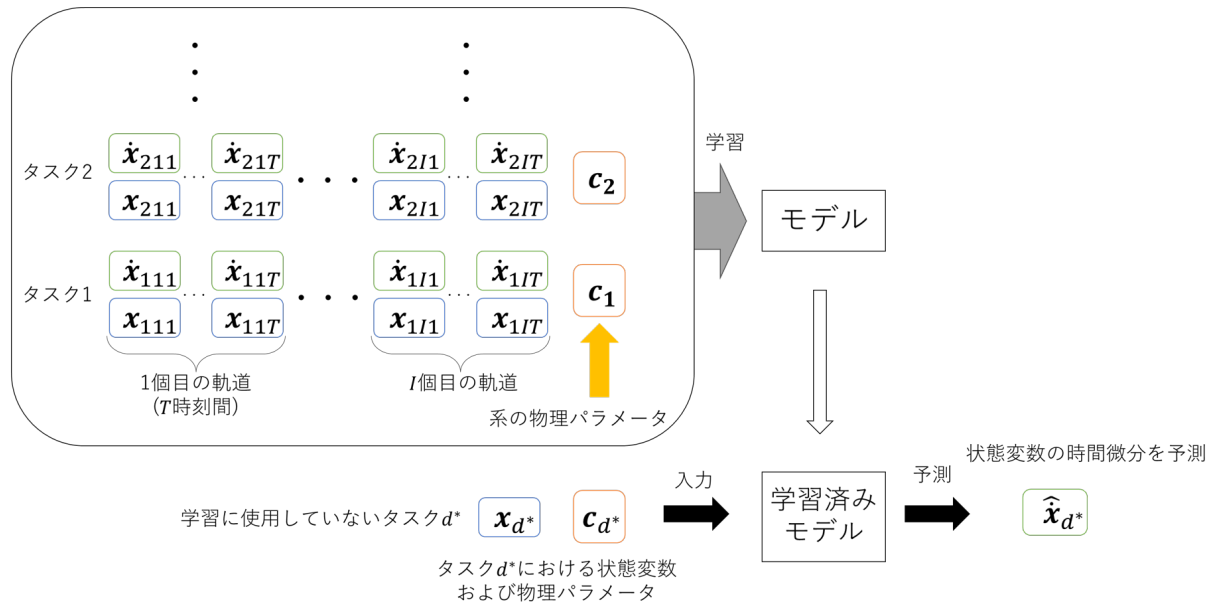
単振り子のハミルトニアンは以下の式で表される。摩擦がなく、保存力のみが働く系を考える。

$$H = mgl(1 - \cos q) + \frac{p^2}{2ml^2} \quad (10)$$

ここで、 $\mathbf{q}$ は鉛直を基準とした振り子の角度、 $\mathbf{p}$ は運動量であり、 l は振り子の長さ、 m は質量を表す。 g は重力加速度を表し、本研究では $g = 1$ とする。それぞれの物理パラメータは $(m, l) \in ([0.5, 2], [0.5, 1])$ の範囲における一様乱数より決定した。また、各状態変数の初期値について、座標は $q = 0$ 、運動量は $p \in [-\pi, \pi]$ の範囲における一様乱数より決定した。

4.4.2 比較するモデル

比較するモデルは以下の4つである。



- (a) 状態変数 x のみを特徴量とする MLP
- (b) 状態変数 x と系の物理パラメータを特徴量とする MLP
- (c) HNN
- (d) 提案モデル

いずれのモデルも 64 ノードからなる 3 層の隠れ層からなり、各層の活性化関数には Softplus を用いた。勾配法は Adam を使用して最適化を行う。バッチサイズは 10 系分のデータ (10 系 $\times$ 20 軌道 $\times$ 50 時刻) として学習率 0.002 で学習を行った。バリデーションデータは学習の早期終了に利用し、学習するエポック数の最大値は 1000 とした。簡単のため、以下では (a), (b) を MLP-X, MLP-XC と表記することにする。

4.4.3 評価方法

テストデータにおける状態変数の時間微分 $\dot{x}$ の予測値と真値の MSE を評価に使用する。また、テストデータを構成する 100 個の系において、式 (2) より各学習済みモデルを用いて 100 時刻分の軌道とエネルギーを積分計算し、真の軌道とのエネルギーに対する MSE を評価に用いる。

4.5 実験結果

テスト誤差と生成した状態変数の軌道のエネルギーの MSE を表 1 に示す。また、生成した状態変数の軌道の 1 つとそれに対応するエネルギー、および各時刻のそれぞれの値の MSE を図 6, 7 に示す。黒い破線は真値の軌道を示しており、時刻が進むと状態変数はこの軌道上を周回する。図 8 は訓練データとテストデータに対する学習中の各エポックの損失のグラフであ

表 1 テストデータに対する誤差と予測した軌道に対応するエネルギーの MSE (MSE と標準偏差を示す。最も精度の良い値を太字で示す。)

力学系	学習モデル	テスト誤差	エネルギーの MSE
調和振動子	MLP-X	11.652 $\pm$ 13.705	110.198 $\pm$ 124.561
	MLP-XC	0.037 $\pm$ 0.047	70.161 $\pm$ 90.865
	HNN	9.560 $\pm$ 12.588	1.233 $\pm$ 2.521
	提案モデル	0.021 $\pm$ 0.034	0.021 $\pm$ 0.038
単振り子	MLP-X	3.432 $\pm$ 5.200	18.742 $\pm$ 28.917
	MLP-XC	0.056 $\pm$ 0.109	3.757 $\pm$ 5.933
	HNN	2.931 $\pm$ 6.235	0.089 $\pm$ 0.141
	提案モデル	0.035 $\pm$ 0.048	0.011 $\pm$ 0.030

る。提案モデルはテスト誤差とエネルギーの MSE のいずれも他のモデルより高い精度を示した。MLP-XC はエネルギー保存則を事前知識として考慮していないため、提案モデルと比べ系を学習する性能が低く、図 6, 7 の軌道を見ると、シミュレーションが進むごとに正しい軌道から離れており、エネルギーの誤差も徐々に増加しているのがわかる。HNN は 1 つの系のみを学習することを前提としているため、他の系との違いや共通する性質を学習することはできず、未知の系を推定する性能は低い。提案モデルは物理パラメータを特徴量として入力しているため、物理パラメータに依存して変化するハミルトニアンを学習しており、各系において高い精度でシミュレーションを行うことができる。

5 提案手法へのメタ学習の適用

5.1 問題設定

本章では、複数のタスクのデータを利用して、学習に使用していない未知のタスクのデータからその系を推定することを目的とする。学習フェーズにて、前章と同様にタスク集合 D に

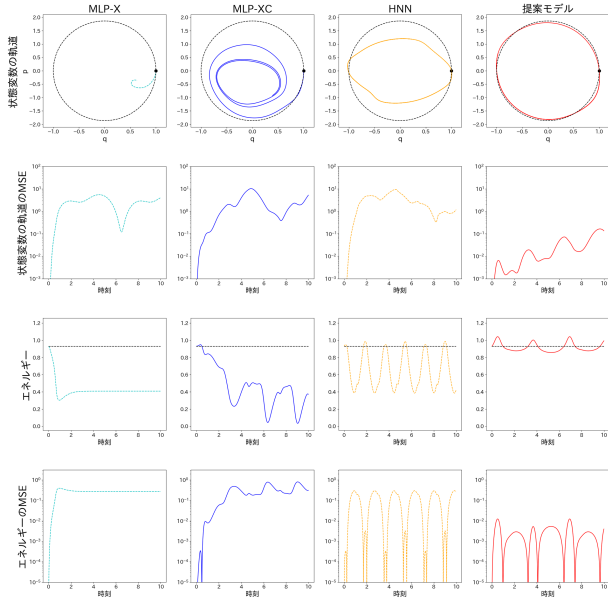


図 6 調和振動子における各モデルの初期値 $(q, p) = (1, 0)$ に対する状態変数の軌道の予測とそれに対応するエネルギー、および各時刻でのそれぞれの値の MSE を示す。黒い破線は軌道の真値、黒い点は軌道の初期値である。軌道の MSE とエネルギーの MSE は対数スケールで示している。

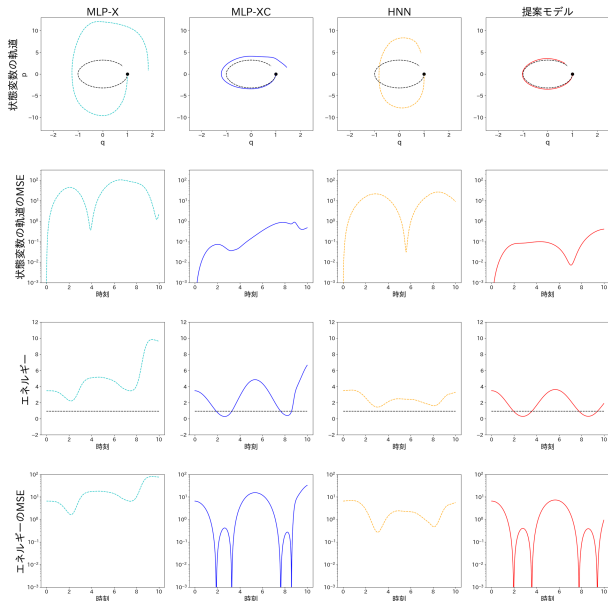


図 7 単振り子における各モデルの初期値 $(q, p) = (1, 0)$ に対する状態変数の軌道の予測とそれに対応するエネルギー、および各時刻でのそれぞれの値の MSE を示す。黒い破線は軌道の真値、黒い点は軌道の初期値である。軌道の MSE とエネルギーの MSE は対数スケールで示している。

ついでにデータ $\{D_d\}_{d \in D}$ と物理パラメータ $\{c_d\}_{d \in D}$ を用いてモデルの学習を行う。その後予測フェーズにて、学習に使用していない未知のタスク $d^* \notin D$ の系の軌道 I_{d^*} 個の集合であるデータ $D_{d^*} = \left\{ \{(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit})\}_{t=1}^{I_{d^*}} \right\}$ と物理パラメータ c_{d^*} を用いて d^* の系を推定し、 d^* の系において観測された状態変数 $\mathbf{x}_{d^*}$ と c_{d^*} を用いて状態変数の時間微分 $\dot{\mathbf{x}}_{d^*}$ を予測する。

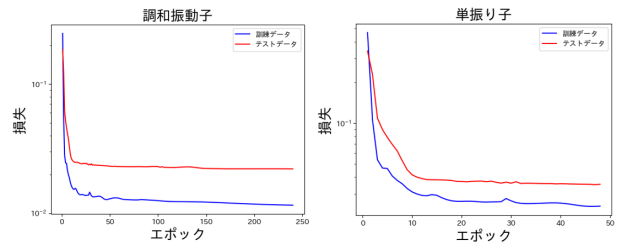


図 8 学習中の訓練データとテストデータに対する損失の変化を示す。左は調和振動子、右は単振り子の学習中についてのグラフである。損失は対数スケールで示している。

5.2 Model-Agnostic Meta-Learning の適用

Algorithm 1 提案モデルに MAML を適用した手法の学習アルゴリズム

Require: データ集合 $\{D_d\}_{d \in D}$

Ensure: 学習後のパラメータ θ

- 1: タスク共通パラメータ θ を初期化
- 2: D からタスク d をサンプリング
- 3: **for** $d \in D$ **do**
- 4: D_d よりサポート集合 S とクエリ集合 Q をサンプリング
- 5: タスク専用パラメータ θ_d にタスク共通パラメータ θ を代入
- 6: **for** L 回 **do**
- 7: 目的関数 (13), (14) とその勾配を計算
- 8: パラメータ θ_d を目的関数と勾配から更新
- 9: **end for**
- 10: 目的関数 (15), (16) とその勾配を計算
- 11: パラメータ θ を目的関数と勾配から更新
- 12: **end for**

上記の問題に対し、提案手法に Model-Agnostic Meta-Learning (MAML) [14] を適用したモデルを使用する。MAML とは、複数のタスクを用いた学習により、新しいタスクに適合した際に高い性能を示すようなタスク共通の初期パラメータを探索するためのアルゴリズムである。状態変数の時間微分 $\dot{\mathbf{x}}$ の推定には式 (10) を用いる。MAML では Algorithm 1 のように学習を進める。サポート集合 S とクエリ集合 Q は、データ D_d に含まれる I 個の軌道よりそれぞれ I_S 個、 I_Q 個の軌道をサンプリングして決定する。2 重ループで行われる学習のうち、内側のループではタスク d に適応したタスク専用パラメータを推定するため目的関数を

$$\hat{\theta}_d = \arg \min_{\theta} \mathcal{L}(S; \theta) \quad (13)$$

$$\mathcal{L}(S; \theta) = \frac{1}{I_S T} \sum_{(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit}) \in S} \|\dot{\mathbf{x}}_{dit} - \Omega \nabla_{\mathbf{x}} H_{\theta}(\mathbf{x}_{dit}, c_d)\|_2^2 \quad (14)$$

として勾配降下法を用いてパラメータの更新を行う。本研究では、内側のループ回数を $L = 5$ とした。また、外側のループで用いる目的関数は

$$\hat{\theta} = \arg \min_{\theta} \sum_{d \in D} \mathcal{L}(\mathcal{Q}; \theta_d) \quad (15)$$

$$\mathcal{L}_d(\mathcal{Q}; \theta_d) = \frac{1}{I_Q T} \sum_{(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit}) \in \mathcal{Q}} \|\dot{\mathbf{x}}_{dit} - \Omega \nabla_{\mathbf{x}} H_{\theta_d}(\mathbf{x}_{dit}, \mathbf{c}_d)\|_2^2 \quad (16)$$

として確率的勾配降下法を用いてパラメータ更新を行う。

予測フェーズでは、未知のタスク $d^* \notin D$ についてのデータ $\mathcal{D}_{d^*}$ をサポート集合 $\mathcal{S}$ と見なし、式 (14) を用いてタスク d^* に適合したパラメータ θ_{d^*} を得る。

5.3 Conditional Neural Processes の適用

5.3.1 モデル

提案手法に Conditional Neural Processes (CNP) [15] を適用したモデルについて説明する。CNP とは各タスクのデータからエンコーダによってタスク別の特徴ベクトルを得ることでタスクへの適合をモデル化するメタ学習の手法である。あるタスク d に関する T 時刻間の I_S 個の軌道についてのサポート集合 $\mathcal{S} = \left\{ \{(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit})\}_{t=1}^T \right\}_{i=1}^{I_S}$ と状態変数 $\mathbf{x}_d$ 、および物理パラメータ $\mathbf{c}_d$ が与えられた場合を考える。まず、 $(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit}) \in \mathcal{S}$ を用いて、ニューラルネットワーク $f: \mathbb{R}^{2N} \times \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}^K$ により特徴ベクトル $\mathbf{r}_{dit} \in \mathbb{R}^K$ を得る。式は以下の通りである。

$$\mathbf{r}_{dit} = f(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit}) \quad (17)$$

その後、以下の式のように $\{\{\mathbf{r}_{dit}\}_{t=1}^T\}_{i=1}^{I_S}$ を平均することで、特徴ベクトル $\mathbf{r}_d$ を得る。

$$\mathbf{r}_d = \frac{1}{I_S} \sum_{i=1}^{I_S} \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \mathbf{r}_{dit} \quad (18)$$

そして特徴ベクトル $\mathbf{r}_d$ と物理パラメータ $\mathbf{c}_d$ より、ニューラルネットワーク $a: \mathbb{R}^K \times \mathbb{R}^B \rightarrow \mathbb{R}^K$ を用いて以下の式のようにタスク表現 $\mathbf{r}'_d$ を計算する。

$$\mathbf{r}'_d = a(\mathbf{r}_d, \mathbf{c}_d) \quad (19)$$

その後、タスク表現 $\mathbf{r}'_d$ と状態変数 $\mathbf{x}_d$ より状態変数の時間微分 $\dot{\mathbf{x}}_d$ を推定する。

$$\dot{\mathbf{x}}_d = \Omega \nabla_{\mathbf{x}} H^{CNP}(\mathbf{x}_d, \mathbf{r}'_d) \quad (20)$$

ここで、 $H^{CNP}: \mathbb{R}^{2N} \times \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$ はタスク表現 $\mathbf{r}'_d$ に依存するハミルトニアンをモデル化したニューラルネットワークである。このモデルの概要を図9に示す。学習アルゴリズムの説明は次節で行う。

5.3.2 学習方法

ニューラルネットワーク f , a , H^{CNP} のパラメータを Φ とする。学習アルゴリズムを Algorithm 2 に示す。最適なパラメータ Φ を推定するための目的関数は

$$\hat{\Phi} = \arg \min_{\Phi} \mathbb{E}_{d \sim D} [\mathbb{E}_{(\mathcal{S}, \mathcal{Q}) \sim \mathcal{D}_d} [\mathcal{L}(\mathcal{Q}|\mathcal{S})]] \quad (21)$$

$$\mathcal{L}(\mathcal{Q}|\mathcal{S}) = \frac{1}{I_Q T} \sum_{(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit}) \in \mathcal{Q}} \left\| \dot{\mathbf{x}}_{dit} - \Omega \nabla_{\mathbf{x}} H_{\theta}^{CNP}(\mathbf{x}_{dit}, \mathbf{r}'_d) \right\|_2^2 \quad (22)$$

Algorithm 2 提案モデルに CNP を適用した手法の学習アルゴリズム

Require: データ集合 $\{\mathcal{D}_d\}_{d \in D}$

Ensure: 学習後のパラメータ Φ

- 1: D からタスク d をサンプリング
- 2: **for** $d \in D$ **do**
- 3: $\mathcal{D}_d$ よりサポート集合 $\mathcal{S}$ とクエリ集合 $\mathcal{Q}$ をサンプリング
- 4: 目的関数 (21), (22) とその勾配を計算
- 5: パラメータ Φ を目的関数と勾配から更新
- 6: **end for**

となり、これらの式を用いてパラメータの更新を行う。 $\mathbb{E}[\cdot]$ は期待値を表す。

5.4 実験設定

調和振動子、単振り子の2種類の力学モデルについて実験を行う。学習には前章での実験と同じデータ $\{\mathcal{D}_d\}_{d \in D}$ と物理パラメータ $\{\mathbf{c}_d\}_{d \in D}$ を用いる。 $\mathcal{D}_d = \left\{ \{(\mathbf{x}_{dit}, \dot{\mathbf{x}}_{dit})\}_{t=1}^T \right\}_{i=1}^{I_d}$ は20個の軌道より構成されており、学習フェーズにてサンプリングするサンプル集合 $\mathcal{S}$ とクエリ集合 $\mathcal{Q}$ の軌道の数 I_S と I_Q はいずれも10とする。未知のタスク $d^* \notin D$ についてのデータ $\mathcal{D}_{d^*}$ は $\mathcal{D}_d$ とは異なる物理パラメータの制約範囲より生成されており、10個の軌道より構成される。本実験では、タスク d^* に対する適合性能を評価するため10個の軌道の集合であるテストデータ $\mathcal{D}_{d^*}^{test}$ を用意した。 $\mathcal{D}_{d^*}, \mathcal{D}_{d^*}^{test}$ はそれぞれ100セット用いて評価をする。タスク $d^* \notin D$ の系を決定する物理パラメータの分布を以下に説明する。

5.4.1 調和振動子

物理パラメータは $(m, k) \in ([2.5, 4], [2.5, 4])$ の範囲における一様乱数より決定した。また、状態変数の軌道の初期値は $(q, p) \in ([-5, 5]^2)$ の範囲における一様乱数より決定した。

5.4.2 単振り子

物理パラメータは $(m, k) \in ([2.5, 4], [1.5, 2])$ の範囲における一様乱数より決定した。また、座標の初期値は $q = 0$ 、運動量の初期値は $p \in [-\pi, \pi]$ の範囲における一様乱数より決定した。

5.5 比較するモデル

比較するモデルは以下の4つである。

(a) MLP-XC

状態変数 $\mathbf{x}$ と系の物理パラメータを特徴量とする MLP で、64 ノードからなる3層の隠れ層によって構成される。学習率 0.002 のもと 1000 エポックの学習を行った。

(b) HNN

64 ノードからなる3層の隠れ層によって構成される。学習率 0.002 のもと 1000 エポックの学習を行った。

(c) 提案モデル

前章で説明している提案手法である。64 ノードからなる3層の隠れ層によって構成される。学習率 0.002 のもと 1000 エポッ

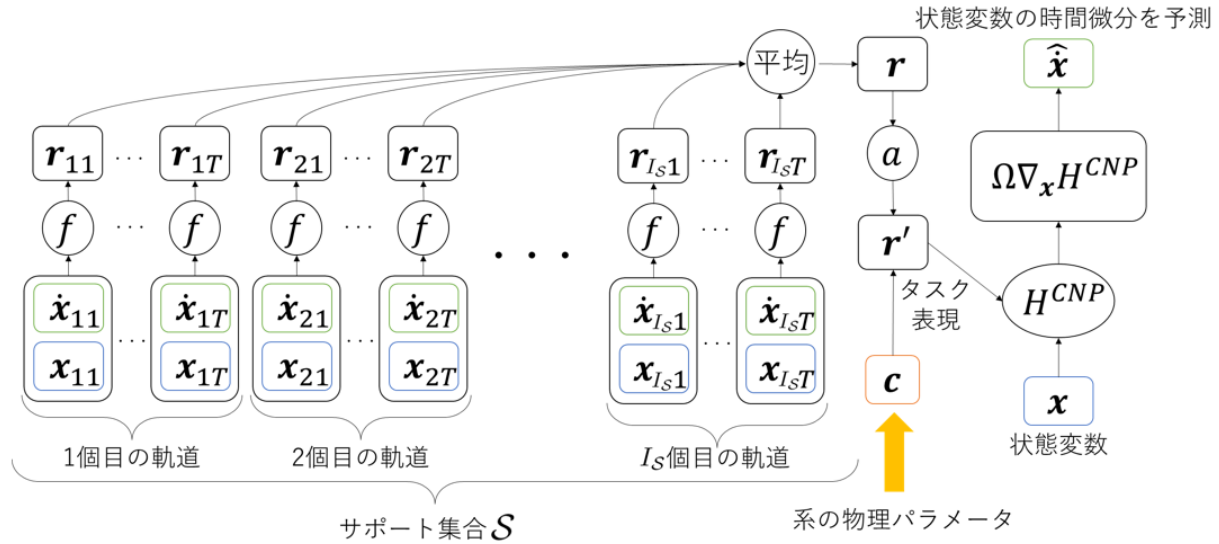


図9 提案モデルに CNP を適用した手法. (タスクを表す添え字 d は簡単のため省略した.)

クの学習を行った.

(d) 提案モデル + MAML

(b) と同様, 64 ノードからなる 3 層の隠れ層によって構成される. 内側のループでは学習率 0.001 のもと 5 エポックのパラメータ更新を行い, 外側のループでは学習率 0.002 のもと 200 エポックのパラメータ更新を行った.

(e) 提案モデル + CNP

f_θ , H_θ^{CNP} はそれぞれ 64 ノードからなる 3 層の隠れ層によって, g_θ は 128 ノードからなる 1 層の隠れ層によって構成される. 特徴ベクトル r_{dit} および r'_d は 128 次元とした. 学習率 0.002 のもと 1000 エポックの学習を行った.

全モデルについて, 各層の活性化関数には Softplus を用いた. (d) 以外のモデルの最適化には Adam を使用し, バッチサイズは 10 系分のデータ (10 系 $\times$ 20 軌道 $\times$ 50 時刻) とした.

5.6 評価方法

MLP-XC, HNN, 提案モデル, 提案モデル+MAML では未知のタスク $\mathcal{D}_{d^*}$ により 5 エポックの学習を行うことでタスク d^* に適合させ, テストデータ $\mathcal{D}_{d^*}^{test}$ と物理パラメータ c_{d^*} によってテスト誤差を計算する. 提案モデル + CNP では, $\mathcal{D}_{d^*}$ によってタスク表現 r'_{d^*} を計算し, r'_{d^*} と $\mathcal{D}_{d^*}^{test}$, 物理パラメータ c_{d^*} を用いてテスト誤差を計算する. また, タスク適合後のモデルを用いて式 (2) より 100 時刻分の軌道とエネルギーを積分計算し, 真値となる軌道とのエネルギー MSE を評価に用いる.

6 実験結果

テスト誤差と生成した状態変数の軌道のエネルギーの MSE を表 2 に示す. また, 生成した状態変数の軌道の 1 つとそれに

対応するエネルギー, および各時刻のそれぞれの値の MSE を図 10, 11 に示す. 調和振動子については提案モデル+CNP がテスト誤差とエネルギーの MSE とともに高い性能を示した. 単振り子については提案モデル+MAML が高い性能を示した. 前章の実験にも使用したモデルの精度が前章に比べて悪いのは, 各モデルの性能の差を顕著に示すため, 適合したい未知のタスク d^* の系を決定する物理パラメータの生成範囲を訓練データのタスク $d \in \mathcal{D}$ の生成範囲と異なるものにして系の推定を難しくしたためである. MLP-XC はエネルギー保存則を事前知識として考慮していないため, 提案モデルを用いた手法と比較すると未知の系に適合する性能は低い. HNN は 1 つの系のみを学習することを前提としているため, 他の系との違いや共通する性質を学習することはできず, 未知のタスク d^* の系に適合するには d^* についてのデータ数が少なかったため, 性能が低いと考えられる. MAML や CNP を適用したモデルは提案モデル以上にタスクに適合する性能が高いことがわかる.

7 結論

本研究では, 力学系の物理パラメータを特徴量に加えるよう HNN を拡張し, 物理パラメータに依存するハミルトニアンを学習するモデルを提案した. 実験を通して, 異なる物理パラメータを持つ系を学習し, 学習していない系を推定する性能が既存の手法より高いことを確認した. また, 既存のメタ学習手法を提案モデルに適用した手法を提案し, メタ学習を用いない手法に比べ, 学習していない系のデータを与えられた際に高い性能で適合することを示した.

今後の課題としては, 本研究に使用した調和振動子や単振り子に限らず, 様々な力学系についてのデータを使用することで, 提案手法に対する理解を深めることが挙げられる. また, エネルギー保存則を満たす条件下での力学系に限らず, エネルギー散逸や外部入力のある, 複雑な系に対しても同様のアプローチが有効であることを示す実験などが考えられる.

表 2 5 エポックのタスク適合後のテスト誤差と予測した軌道に対応するエネルギー MSE (MSE と標準偏差を示す。最も精度の良い値を太字で示す。)

力学系	学習モデル	テスト誤差	エネルギーの MSE
調和振動子	MLP-XC	1.798 ± 2.521	67.410 ± 155.907
	HNN	57.673 ± 78.275	1.548 ± 2.904
	提案モデル	0.541 ± 1.516	0.192 ± 0.410
	提案モデル + MAML	0.473 ± 1.135	0.081 ± 0.192
	提案モデル + CNP	0.462 ± 0.859	0.040 ± 0.054
単振り子	MLP-XC	2.349 ± 5.069	989.447 ± 1943.090
	HNN	28.798 ± 70.523	1.584 ± 2.970
	提案モデル	1.436 ± 3.065	0.077 ± 0.172
	提案モデル + MAML	0.895 ± 1.559	0.066 ± 0.230
	提案モデル + CNP	1.026 ± 2.426	0.072 ± 0.167

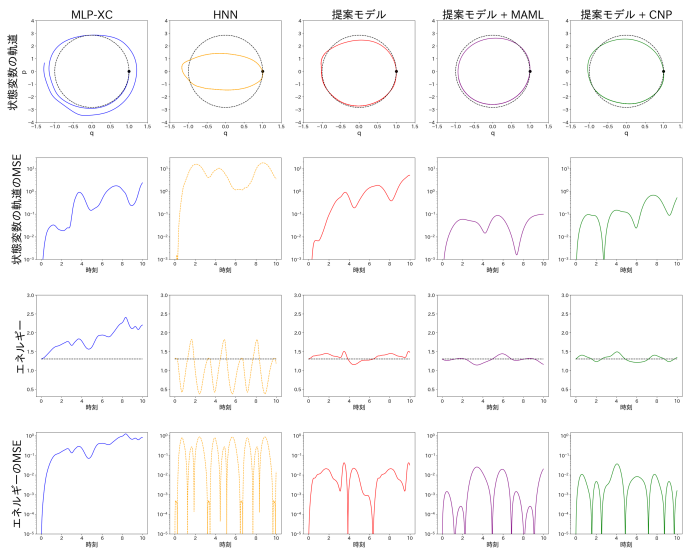


図 10 調和振動子における各モデルの初期値 $(q, p) = (1, 0)$ に対する状態変数の軌道の予測とそれに対応するエネルギー、および各時刻でのそれぞれの値の MSE を示す。黒い破線は正解の軌道、黒い点は軌道の初期値である。軌道の MSE とエネルギーの MSE は対数スケールで示している。

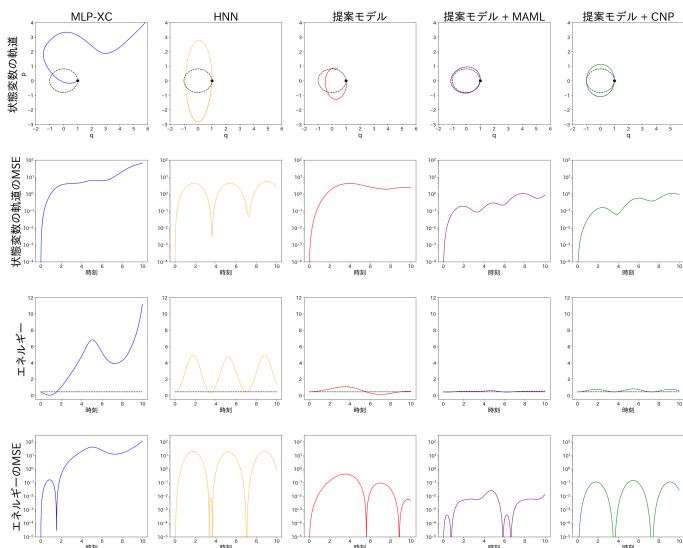


図 11 単振り子における各モデルの初期値 $(q, p) = (1, 0)$ に対する状態変数の軌道の予測とそれに対応するエネルギー、および各時刻でのそれぞれの値の MSE を示す。黒い破線は正解の軌道、黒い点は軌道の初期値である。軌道の MSE とエネルギーの MSE は対数スケールで示している。

文 献

- [1] Ricky TQ Chen, Yulia Rubanova, Jesse Bettencourt, and David K Duvenaud. Neural ordinary differential equations. *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 31, , 2018.
- [2] Samuel Greydanus, Misko Dzamba, and Jason Yosinski. Hamiltonian neural networks. *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 32, , 2019.
- [3] Ricky T. Q. Chen, Brandon Amos, and Maximilian Nickel. Learning neural event functions for ordinary differential equations. *International Conference on Learning Representations*, 2021.
- [4] Patrick Kidger, James Morrill, James Foster, and Terry Lyons. Neural controlled differential equations for irregular time series. In H. Larochelle, M. Ranzato, R. Hadsell, M.F. Balcan, and H. Lin, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 33, pp. 6696–6707. Curran Associates, Inc., 2020.
- [5] Zhengdao Chen, Jianyu Zhang, Martin Arjovsky, and Léon Bottou. Symplectic recurrent neural networks. In *8th International Conference on Learning Representations, ICLR 2020, Addis Ababa, Ethiopia, April 26-30, 2020*. OpenReview.net, 2020.
- [6] Marc Finzi, Ke Alexander Wang, and Andrew Gordon Wilson. Simplifying hamiltonian and lagrangian neural networks via explicit constraints. In Hugo Larochelle, Marc'Aurelio Ranzato, Raia Hadsell, Maria-Florina Balcan, and Hsuan-Tien Lin, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 33: Annual Conference on Neural Information Processing Systems 2020, NeurIPS 2020, December 6-12, 2020, virtual*, 2020.
- [7] Andrew Sosanya and Sam Greydanus. Dissipative hamiltonian neural networks: Learning dissipative and conservative dynamics separately. *CoRR*, Vol. abs/2201.10085, , 2022.
- [8] Yaofeng Desmond Zhong, Biswadip Dey, and Amit Chakraborty. Dissipative symoden: Encoding hamiltonian dynamics with dissipation and control into deep learning. *CoRR*, Vol. abs/2002.08860, , 2020.
- [9] Shaan A Desai, Marios Mattheakis, David Sondak, Pavlos Protopapas, and Stephen J Roberts. Port-hamiltonian neural networks for learning explicit time-dependent dynamical systems. *Physical Review E*, Vol. 104, No. 3, p. 034312, 2021.
- [10] Yaofeng Desmond Zhong, Biswadip Dey, and Amit Chakraborty. Symplectic ode-net: Learning hamiltonian dynamics with control. In *8th International Conference on Learning Representations, ICLR 2020, Addis Ababa*,

- Ethiopia, April 26-30, 2020*. OpenReview.net, 2020.
- [11] Zhengdao Chen, Jianyu Zhang, Martín Arjovsky, and Léon Bottou. Symplectic recurrent neural networks. In *8th International Conference on Learning Representations, ICLR 2020, Addis Ababa, Ethiopia, April 26-30, 2020*. OpenReview.net, 2020.
 - [12] Kookjin Lee and Eric J. Parish. Parameterized neural ordinary differential equations: Applications to computational physics problems. In *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 477, 2021.
 - [13] Haesang Yang Seungjun Lee and Woojae Song. Identifying physical law of hamiltonian systems via meta-learning. *International Conference on Learning Representations*, 2021.
 - [14] Chelsea Finn, Pieter Abbeel, and Sergey Levine. Model-agnostic meta-learning for fast adaptation of deep networks. In *International Conference on Machine Learning*, pp. 1126–1135. PMLR, 2017.
 - [15] Marta Garnelo, Dan Rosenbaum, Christopher Maddison, Tiago Ramalho, David Saxton, Murray Shanahan, Yee Whye Teh, Danilo Rezende, and SM Ali Eslami. Conditional neural processes. In *International Conference on Machine Learning*, pp. 1704–1713. PMLR, 2018.
 - [16] Zhenguo Li, Fengwei Zhou, Fei Chen, and Hang Li. Meta-sgd: Learning to learn quickly for few shot learning. *CoRR*, Vol. abs/1707.09835, , 2017.
 - [17] Alex Nichol, Joshua Achiam, and John Schulman. On first-order meta-learning algorithms. *arXiv preprint arXiv:1803.02999*, 2018.
 - [18] Nikhil Mishra, Mostafa Rohaninejad, Xi Chen, and P. Abbeel. A simple neural attentive meta-learner. In *International Conference on Learning Representations*, 2017.
 - [19] Adam Santoro, Sergey Bartunov, Matthew M. Botvinick, Daan Wierstra, and Timothy P. Lillicrap. Meta-learning with memory-augmented neural networks. In *International Conference on Machine Learning*, 2016.
 - [20] Marta Garnelo, Jonathan Schwarz, Dan Rosenbaum, Fabio Viola, Danilo J Rezende, SM Eslami, and Yee Whye Teh. Neural processes. *ICML Workshop on Theoretical Foundations and Applications of Deep Generative Models*, 2018.
 - [21] Jean Kaddour, Steindor Saemundsson, and Marc Deisenroth (he/him). Probabilistic active meta-learning. In H. Larochelle, M. Ranzato, R. Hadsell, M.F. Balcan, and H. Lin, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 33, pp. 20813–20822. Curran Associates, Inc., 2020.

ブラックボックス関数が与えられた予算制約付組合せ最適設備投資問題 に対するモンテカルロ木探索法の提案

行木 渉真[†] 中村 篤祥^{††} 安ヶ平裕介^{†††} 内垣内 洋^{†††} 平松 道晶^{†††}
竹本 享史^{†††}

[†] 北海道大学工学部情報エレクトロニクス学科 〒 060-8628 北海道札幌市北区北 13 条西 8 丁目

^{††} 北海道大学大学院情報科学研究院 〒 060-0814 北海道札幌市北区北 14 条西 9 丁目

^{†††} 株式会社日立製作所 日立北大ラボ 〒 001-0021 北海道札幌市北区北 21 条西 11 丁目

E-mail: [†]nameki@ist.hokudai.ac.jp, ^{††}atsu@ist.hokudai.ac.jp,

^{†††}{yusuke.yasugahira.yc,hiroshi.uchigaito.nx,michiaki.hiramatsu.nq,takashi.takemoto.tj}@hitachi.com

あらまし モンテカルロ木探索 (Monte Carlo tree search; MCTS) は、木で表された探索空間の部分空間をランダムサンプリングによって評価し、有望な部分空間を優先して探索する手法である。本論文では、ブラックボックス関数が与えられた予算制約付き組合せ最適設備投資問題に対して MCTS を用いる方法を提案する。具体的には、特徴選択問題に対して MCTS を適用する手法である FUSE アルゴリズムをベースとして、予算制約の下に無向グラフの頂点上に複数の施設を配置し、それぞれの施設に割り当てる多種類の装置の数量を最適化する問題に適用できるように MCTS アルゴリズムを設計する。また、実際の地図・人口・気候に基づくシミュレーションによる評価値をブラックボックス関数として用い、複数ナノグリッド最適設備投資設計へ適用し有効性を検証する。

キーワード 地理データ活用, スマートシティー, 資源・エネルギー, 設備投資最適化, ブラックボックス最適化, モンテカルロ木探索

1 はじめに

近年の持続可能な地域社会への関心の高まりを受け、地域産業の低炭素化や防災機能強化を目標とし、ナノグリッドと呼ばれる発電・蓄電設備や EV によって構成された、地産地消・自立型地域エネルギーシステムの構築のための取り組みが進められている [1]。

しかし実際の都市上へのナノグリッドによるエネルギーシステムの構築は非常に大規模な取り組みとなることから、使用可能な予算を効率的に活用するため、施設の設置数と各施設の設置位置、各施設内の複数の装置の種類・数量の可能な限り全てを最適化することが望ましい。目的関数が明示的に与えられていれば最急降下法や Adam 法等の一般の最適化手法による解決が望めるが、本問題における施設配置の評価はナノグリッドの電力収支や配置した EV による輸送需要への対応状況、発電時の環境負荷や災害時の対処能力など多様な観点による複雑な評価及び天候や人的要因による変動の考慮を必要とするため、目的関数は明示的に与えられず勾配などを用いた最適化は困難である。

そこで、本研究では複数ナノグリッドの配置とそれぞれのナノグリッドに設置する設備と EV の初期位置等をシミュレーションにより評価し、予算内で最適化する問題を予算制約付組合せ最適設備投資問題として定式化し、この問題の解法アルゴリズムを提案する。具体的には、モンテカルロ木探索 (Monte Carlo tree search; MCTS) [2] と呼ばれる木で表された探索空間

の部分空間をランダムサンプリングによって評価し、有望な部分空間を優先して探索する手法を用い、制約なしの 0-1 最適化問題である特徴選択問題に対して開発された FUSE アルゴリズム [3] をベースとして、予算制約付組合せ最適設備投資問題に適用できるように MCTS アルゴリズムを設計し、複数ナノグリッド最適設備投資設計への適用によってその有効性を検証する。

2 MCTS を用いた特徴選択アルゴリズム

モンテカルロ木探索 (Monte Carlo tree search; MCTS) [4] は、木で表された探索空間の部分空間 (部分木) をランダムサンプリングによって評価し、有望な部分空間を優先して探索する手法であり、碁 [5,6] やオセロ [7] などのボードゲームにおける最適手の探索や、特定の吸収波長を持つ分子の設計 [8]、機械学習における特徴選択の最適化 [3] などに適用されている。

MCTS における木の探索は、根ノードから開始して葉ノードに到達するまである基準に従って子ノードを選択することを繰り返す**選択**、到達した葉ノードが終端ノードでなければ、そのノードから新たな子ノードを生成する**展開**、展開された子ノードから生成しうる終端ノードからランダムに抽出を行い、これについて評価を行う**シミュレーション**、シミュレーション結果に基づいて、探索経路上の各ノードの評価値を更新する**バックプロパゲーション**の 4 つの操作を繰り返すことで行われる (図 1) [2]。選択操作における子ノードの選択基準としては、UCB1(Upper Confidence Bound 1) 方策 [9]((1) 式) や EXP3

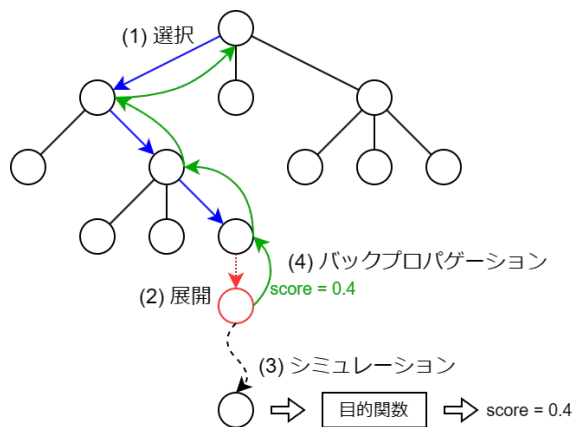


図 1 MCTS による探索のイメージ

方策 (Exponential-weight algorithm for Exploration and Exploitation) [10] に基づくものなど様々な手法が提案されており [2]、特に UCB 方策が適用された MCTS は、UCT(Upper Confidence Tree) [11] と呼ばれる。

Gaudel らの提案した FUSE アルゴリズム [3] は、UCT を 0-1 最適化問題である特徴選択問題に対して適用したものである。より詳細には、One-Player Game アプローチによって特徴選択問題を強化学習として定式化することで理論上最適な特徴選択方策を導出し、UCT による特徴集合の集合束上の探索によってこれを近似したものが、FUSE アルゴリズムである。MCTS を基 [6] やオセロ [7] などのゲーム AI に適用した研究において、MCTS が扱う探索空間として、ゲーム木と呼ばれる各ノードに現在の盤面、各エッジに取りうる手、各子ノードに次の盤面を対応付けた木を用いるように、FUSE アルゴリズムにおいても、根ノードに空集合、エッジに新たな特徴の追加あるいは追加の終了を対応付ける。このとき、集合への追加操作はその追加の順序によらないことから、複数の探索経路から同一の状態に到達する場面が多く出現するため、FUSE アルゴリズムは探索空間として純粋な木でなく、feature lattice と呼ばれる束状の空間を扱う。

FUSE アルゴリズムでは、選択操作における指標として UCB1((1) 式) でなく、よりタイトな指標である UCB-tuned [9]((2) 式) の適用や、MoGo [5] などで使用される AMAF(All Moves As First) ヒューリスティックの改良であって、探索経路に依存しない各特徴の評価である RAVE(Rapid Action Value Estimation) スコア [3] による暫定的な腕の評価の活用によって、探索の効率化が図られている。

本論文では、UCT を特徴選択問題に対して適用する手法である、FUSE アルゴリズム [3] をベースとして、MCTS を予算制約付組合せ最適設備投資設計へと適用するアルゴリズムを提案する。

$$a^* = \operatorname{argmax}_{a \in \mathcal{A}} \left(\mu_a + \sqrt{\frac{2 \ln N}{n_a}} \right) \quad (1)$$

$$a^* = \operatorname{argmax}_{a \in \mathcal{A}} \left(\mu_a + \sqrt{\frac{2 \ln N}{n_a} \min \left(\frac{1}{4}, \sigma_a^2 + \sqrt{\frac{2 \ln N}{n_a}} \right)} \right) \quad (2)$$

a^* 選択する行動

$\mathcal{A}$ 取りうる行動の集合

μ_a 行動 a をとった時に得られた報酬の標本平均

N 総選択回数

n_a 行動 a の選択回数

σ_a^2 行動 a をとった時に得られた報酬の標本分散

3 問題設定

本論文では、予算制約のもとに無向グラフの任意個数の頂点上に施設を配置し、与えられたノイズ入りブラックボックス関数上で最大の期待評価値が得られる設備投資設計を探索する問題を扱う。

この問題は以下のように定式化される。

与えられたグラフを $G = (V, E)$ とする。施設の種類集合を $\{1, 2, \dots, K\}$ 、種類 i の施設の数 n_i とする。種類 i の h 番目の施設の設計は m_i 次元のフィールド変数ベクトル $\mathbf{w}_{i,h} = (w_{i,h,1}, w_{i,h,2}, \dots, w_{i,h,m_i})$ を設定することで決定する。変数 $w_{i,h,j}$ の取りうる値の集合は、何番目であるかには依存せず $R_{i,j}$ とする。与えられたノイズ入りブラックボックス関数 F は、 $((n_1, \mathbf{w}_{1,1}, \dots, \mathbf{w}_{1,n_1}), (n_2, \mathbf{w}_{2,1}, \dots, \mathbf{w}_{2,n_2}), \dots, (n_K, \mathbf{w}_{K,1}, \dots, \mathbf{w}_{K,n_K}))$ を入力すると、実数評価値を出力するものとする。与えられた予算を B とし、変数 $w_{i,h,j}$ に対するコスト関数 $c_{i,j}$ が設定され、 $w_{i,h,j}$ の値に依存して $c_{i,j}(w_{i,h,j})$ のコストがかかるものとする。このとき、以下の予算制約付組合せ最適設備投資問題を考える。

$$\max \mathbb{E} [F((n_1, \mathbf{w}_{1,1}, \dots, \mathbf{w}_{1,n_1}), (n_2, \mathbf{w}_{2,1}, \dots, \mathbf{w}_{2,n_2}), \dots, (n_K, \mathbf{w}_{K,1}, \dots, \mathbf{w}_{K,n_K}))]$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^K \sum_{h=1}^{n_i} \sum_{j=1}^{m_i} c_{i,j}(w_{i,h,j}) \leq B$$

$$n_i \in \mathbb{N} \quad (i = 1, 2, \dots, K)$$

$$w_{i,h,j} \in R_{i,j}$$

$$(i = 1, 2, \dots, K, j = 1, 2, \dots, m_i, h = 1, 2, \dots, n_i)$$

各フィールド変数 $w_{i,h,j}$ は数値型、位置型、カテゴリ型のいずれかであり、それぞれ以下の条件を満たすものとする。

- 数値型の変数は実数あるいは整数の変数であり、変数に依存する有限の範囲 $[a, b]$ の値をとる。
- 位置型の変数は位置情報を表す変数であり、与えられた無向グラフ上の頂点番号を値にとる。
- カテゴリ型の変数は $\{1, 2, \dots, k\}$ の中の 1 つの値をとる。ただし、 k は変数に依存する整数とする。

〈補足〉 上述の問題設定ではグラフの接続関係が全く使われておらず無関係のようにみえる。実際には施設はある程度分散して配置した方が評価関数 F の値が大きくなることを仮定しており、接続関係は施設の最適配置に大きく影響する。本稿では位置型の値の階層構造をグラフの近接関係を用いて定義することにより与えられたグラフにおける (辺の重みや頂点の重みまで考慮した) 接続関係を取り込んでいる (4.1 節の位置変数に対する値域分割木の構築法の説明参照)。

4 提案アルゴリズム

本節では、本論文で提案する、予算制約付組合せ最適設備投資設計のアルゴリズムについての詳細を述べる。

4.1 探索状態空間

問題の探索空間 S は以下のように表現できる。種類 i の h 番目の施設はフィールド変数ベクトル $\mathbf{w}_{i,h} = (w_{i,h,1}, w_{i,h,2}, \dots, w_{i,h,m_i})$ で設計され、 $w_{i,h,j} \in R_{i,j}$ であるから、 $\mathbf{w}_{i,h} \in \prod_{j=1}^{m_i} R_{i,j}$ である。 $S_i = \prod_{j=1}^{m_i} R_{i,j}$ とする。種類 i の施設を n_i 個ずつ配置した場合の取りうる状態の集合を $S_{(n_1, \dots, n_K)}$ とすると、 $S_{(n_1, \dots, n_K)} = \prod_{k=1}^K S_k^{n_k}$ となる。各施設は任意の個数を配置できるが、本論文で扱う問題は予算制約付きのものであるため、ある十分大きい値 M をとり、 $P = \{0, \dots, M\}^K$ を用いて得られる $S = \bigcup_{p \in P} S_p$ によって、解が取りうる全ての状態を含む集合 S が得られる。

値を徐々に絞り込む探索を行うために、変数 $w_{i,h,j}$ は探索空間 S の値のみでなく、値の範囲をとることができるようにする。数値型フィールド変数 $w_{i,h,j}$ に対しては、値域 $R_{i,j} = [a, b]$ を階層的に分割した**値域分割木**を構築し、各ノードに対応する値の範囲を $w_{i,h,j}$ の値として設定できるようにする。位置型フィールド変数 $w_{i,h,j}$ に対しては、与えられたグラフ $G = (V, E)$ を階層的に連結領域分割した場合の頂点集合 V に対応する値域分割木を構築し、各ノードに対応する頂点集合を値として設定可能とする。カテゴリ変数に関しては、全ての値の集合に対応する根ノードと、各々の値に対応する葉ノードからなる高さ 1 の木を値域分割木とする。各種類 i の施設の数を表す変数 n_i に関しても、予算制約から範囲が $R_i = [0, M]$ に定まるため数値型変数として値域分割木を構築し、ノードに対応する範囲としての値を設定して探索する。

各 $R_{i,j}, R_i$ の値域分割木の各ノードに対応する値の集合をそれぞれ $\bar{R}_{i,j}, \bar{R}_i$ とする。探索中は、変数 $w_{i,h,j} \in \bar{R}_{i,j}$ ($i = 1, 2, \dots, K, j = 1, \dots, m_i, h = 1, 2, \dots, n_i$)、 $n_i \in \bar{R}_i$ ($i = 1, 2, \dots, K$) の値で状態を表す。探索時にとる行動としては「種類 i の h 番目の施設の変数 j を値 a に変更する」($w_{i,h,j} \leftarrow a$)、または「種類 i の施設の数 n_i を値 a に変更する」($n_i \leftarrow a$) の 2 つを考える。

数値型の値域分割木の例としては、根ノードに範囲 $[a, b]$ を、その子ノードにはそれぞれ $[a, (a+b)/3], [(a+b)/3, 2(a+b)/3], [2(a+b)/3, b]$ を、といったように対応付けていき、区間の幅がある値 ϵ 以下になるまで同様に分割を繰り返す、といっ

た手順で構築された木が考えられる。純粋な 3 等分に限らず、対数的な値域の分割や、あるいは問題に対する事前知識を活用した、局所的に詳細な分割の実行など、応用に適した構築法を用いるのが効率的であろう。

また位置型の値域分割木の例としては、根ノードには与えられたグラフ $G = (V, E)$ の全頂点の集合 V を、その子ノードには (V, E) 上での 3-median による頂点のクラスタリング結果 V_1, V_2, V_3 を、といったように対応付けていき、頂点集合のサイズが 1 になるまで同様に分割を繰り返す、といった階層的な 3-median 操作の繰り返しによって木を構成する方法が考えられる。なおこの例では、3-median の計算のために問題情報としてグラフの各辺の重み (距離) とグラフの各頂点の重み (人口情報など) が与えられることを前提としている。

4.2 選択操作

選択操作の段階における子ノード選択の指標は、UCB-tuned((2) 式) をベースに、活用項 (報酬の標本平均) を RAVE スコア [3] によって補正したものを用いる。

ここで、RAVE スコアは、以下のように定義される指標である。

$g\text{-RAVE}_{i,j,x}$ 種類 i の施設の j 番目の変数の値が x である解で行われたシミュレーション全ての評価値の平均値

$\ell\text{-RAVE}_{v,i,j,x}$ 頂点 v から生成可能な、種類 i の施設の j 番目の変数の値が x である解で行われたシミュレーション全ての評価値の平均値

ここで各 i, j, x は、

i 施設の種類インデックス

j 指定された種類の施設が持つ変数のインデックス

x 変数の値

を表す。また、アクション a が種類 i の施設の j 番目の変数の値を x とする行動であるとき、それぞれ $g\text{-RAVE}_a$ および $\ell\text{-RAVE}_{v,a}$ と表記する。

本来の MCTS においては、シミュレーションによって得られた評価値はそのイテレーションにおける探索経路上のノードのみに反映されるが、RAVE スコアの導入によって、探索経路外のノードに対してもある程度探索結果を共有することが可能となる。これによって、新たな層の探索を開始した直後など腕の本数に対して探索回数が不足している場面において、未知の腕の評価値を大まかに推定することが可能となるため、選択の効率化を図れる。

(3) 式が、提案アルゴリズムが選択操作の段階で用いる、UCB-tuned と RAVE スコアを組み合わせた指標である。

指標の活用項 ($X_{v,a}$) は、重み α, β による子ノードの平均報酬 μ_a , $\ell\text{-RAVE}$, $g\text{-RAVE}$ の加重平均で構成されている。各値の算出に使用されるサンプルの個数は μ_a , $\ell\text{-RAVE}$, $g\text{-RAVE}$ の順に少ないため、 μ_a の方が局所的な依存性や相互関係をよく反映するが値は不安定で、 $g\text{-RAVE}$ の方が値は安定しているが局所的な依存性や相互関係はあまり反映されない。そのため、 n_a を子ノード a の訪問回数、 n'_a を子ノード a から生成可能な終端ノード全ての訪問回数の総和とすれば、 n_a が十分大きい場

合は平均評価値 μ_a を、 n_a が少なく、 n'_a が十分大きい場合は ℓ -RAVE を、両方少ない場合は g-RAVE を重視することで、探索回数の不足状況に合わせた評価値の補正を実現している。このために、重み係数 α, β は、それぞれ n_a と n'_a の増加に伴って減少するように構成されている。

$$a^* = \operatorname{argmax}_{a \in \mathcal{A}} (X_{v,a} + Y_{v,a}) \quad (3)$$

$$X_{v,a} = (1 - \alpha)\mu_a + \alpha((1 - \beta) \cdot \ell\text{-RAVE}_{v,a} + \beta \cdot \text{g-RAVE}_a)$$

$$Y_{v,a} = \sqrt{\frac{c_e \ln n_v}{n_a} \min\left(\frac{1}{4}, \sigma_a^2 + \sqrt{\frac{2 \ln n_v}{n_a}}\right)}$$

$$\alpha = \frac{c}{c + n_a}, \quad \beta = \frac{c_\ell}{c_\ell + n'_a}$$

v	現在選択操作を行っているノード
a^*	選択する子ノード
$\mathcal{A}$	選択可能な子ノードの集合
μ_a	子ノード a における平均報酬
σ_a^2	子ノード a における報酬の標準分散
n_v	現在選択操作を行っているノードの訪問回数
n_a	子ノード a の訪問回数
n'_a	子ノード a から生成可能な終端ノード全ての訪問回数の総和
c_e	探索項 ($Y_{v,a}$) の強さを指定するパラメータ
c	RAVE スコアの強さを指定するパラメータ
c_ℓ	g-RAVE の強さを指定するパラメータ

4.3 探索手順

MCTS におけるサンプルの抽出操作は、探索木の根から葉までのある選択指標 (UCB スコア等) による探索と、探索木の葉から新しいノードを生成し探索木を拡大する展開および、展開されたノードから生成する探索木の部分木からのランダムな抽出の3段階によって行われる。つまり、探索木に展開済みのノードであれば探索する子ノードは選択指標によって決定され、未展開のノードであれば探索はランダムに行われる。また未展開のノードを新たに選択指標の適用対象とする操作が展開である。

本提案手法では明示的な探索木の構築は行わず、「探索木に展開する」代わりに探索束上の各ノードに「(指標による) 選択操作の対象である」かそうでないかの状態を持たせることで、疑似的な探索木の構築を行う。具体的には、根ノードから探索を開始し、ノードが選択操作の対象であれば (3) 式に従って、ノードが選択操作の対象でなければランダムに探索束上を探索することで、探索空間からのサンプルの抽出を実行する。このとき、(ノードの訪問回数) $> \tau_{visit}$ を満たすノードを選択操作の対象として扱うものとする。ここで、 τ_{visit} は閾値を指定するパラメータである。ただし、通常の MCTS においてノードの訪問回数や平均評価値の記録が行われるのは探索木上に展開済みのノードのみであるため、本手法においても、それらの記録は既に選択操作の対象であるノードと、その子ノードのみで行う。

また、通常の MCTS では探索木上で親ノードを遡ることで評価値のバックプロパゲーションを実現しているが、本提案手法においては、探索束上のノードは複数の親ノードを持つ場合があるため、バックプロパゲーションの対象となる探索経路上のノードの集合を V_{path} として別に保管しておくことで、評価値の伝播を行う。

4.4 アルゴリズム

アルゴリズム 1 は、本論文で提案する予算制約付組合せ最適設備投資設計のアルゴリズムである。

本アルゴリズムは、解の抽出 (5–19 行目)、解の評価 (20 行目)、各ノードの平均スコアおよび RAVE スコアの更新 (21–24 行目) を T 回繰り返すことで最適解の探索を行う。

解の抽出操作は、「すべての変数の値が未決定である」解を初期状態として、「いずれかの変数の値を決定する」操作を繰り返すことで実行される。これは、アルゴリズム 5 行目の現在のノード v を「すべての変数の値が未決定である」解に対応するノード v_{root} で初期化する操作と、7–19 行目の while 内での探索束上の遷移を繰り返す操作に対応する。ここで、8 行目の関数 `get_child_list( $v$ )` が、現在のノードから遷移可能な子ノードの一覧 $\mathcal{C}$ を出力する関数であり、12 行目でノードが選択操作の対象であるかを確認したのち、13, 16 行目で式 (3) あるいは一様な乱数によって $\mathcal{C}$ からノードを選択し v を更新することで、探索束上の遷移を実行している。またこの探索束上の遷移は「すべての変数の値が決定済みである」終端ノード ($\mathcal{C}$ が空であるノード) に到達するまで繰り返される (9 行目)。

5 実験

本章では、本論文の提案する予算制約付組合せ最適設備投資設計アルゴリズムの有効性を検証するため、2021 年に AtCoder で開催された「日立北大ラボ×北大コンテスト 2021 「未来の自律分散型まちづくり」」 [12] で使用されたテストデータおよび設備配置評価シミュレータを用いて実験を行う。

5.1 データセットおよびシミュレータ詳細

本実験では、問題設定およびシミュレーションで使用する環境データとして、岩見沢市における実際の地図、天候、人口等から作成されたデータを用いる。地図情報は 6401 頂点からなる無向グラフで表現され、各辺には頂点間の距離、各頂点には人口、面積、電力需要量、土地面積当たりの価格の値が設定されている。またシミュレーションには、予算額、利用可能な施設の種類・コスト、天候情報、電力需要量、輸送需要量、評価日数 (1 シミュレーションで処理するシミュレータ内部のシミュレーション日数) の設定を変更した複数のテストケースを用いる (表 1)。

地図上に配置可能な施設は、発電・蓄電・給電設備であるナノグリッドと、人や電力の輸送に利用可能な EV の 2 種類である。ナノグリッドと EV の配置数および、各ナノグリッドの位置、初期充電量および 4 カテゴリの装置の種類・数量と、各 EV の初期位置、初期充電量および車種を最適化し、シミュレー

表 1 使用する問題設定		
	小規模テストケース	大規模テストケース
予算額	47058	247058
評価日数	4 日	6 日
天候情報	実データをもとにそれぞれランダムに生成	
電力・輸送需要量	実データをもとにそれぞれランダムに生成	
利用可能な設備の設定	実設備データをもとにそれぞれランダムに設定	

Algorithm 1 提案アルゴリズム

```
1: 施設構造体の持つ各フィールド変数について、値域分割木を構築
2: 探索束 (hash map) を初期化
3:  $v_{root} \leftarrow$  探索束の根ノード
4: for  $t = 1 \dots T$  do
5:    $v \leftarrow v_{root}$ 
6:    $V_{path} \leftarrow \{v_{root}\}$ 
7:   while true do
8:      $C \leftarrow \text{get\_child\_list}(v)$ 
9:     if  $C = \phi$  then
10:      break
11:    else
12:      if  $v$  の訪問回数  $> \tau_{visit}$  then
13:         $v \leftarrow \text{argmax}_{c \in C} (\text{式 (3)})$ 
14:         $V_{path} \leftarrow V_{path} \cup \{v\}$ 
15:      else
16:         $v \leftarrow (C \text{ から一様にランダムに選択})$ 
17:      end if
18:    end if
19:  end while
20:   $\text{score} \leftarrow (v \text{ のノイズ入りブラックボックス関数による評価値})$ 
21:  for  $v \in V_{path}$  do
22:     $v$  の平均スコアと訪問回数を更新
23:  end for
24:  g-RAVE、 $\ell$ -RAVE を更新
25: end for
26: 最も高いスコアを出した解  $v^*$  を出力
```

関数 `get_child_list(v)`

```
1:  $C \leftarrow \phi$ 
2:  $X \leftarrow \{n_1, \dots, n_K, w_{1,1,1}, \dots, w_{K,n_K,m_K}\}$ 
3: for all  $x \in X$  do
4:    $i \leftarrow v$  の変数  $x$  の値 (値域分割木のインデックス)
5:   for 値域分割木のノード  $i$  の各子ノード  $a$  do
6:      $c \leftarrow$  「変数  $x$  の値を  $a$  にする」操作によって得られる状態
7:     if  $c$  が制約を満たす then
8:        $C \leftarrow C \cup \{c\}$ 
9:     end if
10:  end for
11: end for
12: return  $C$ 
```

ションにより計算される期待評価値を最大化することが目標である。

シミュレータは入力された設備配置設定について運用シミュレーションを行い、ナノグリッドの電力収支や EV による輸送

需要への対応状況、発電時の環境負荷や災害発生時の対処能力等
を評価し、それらを総合した評価値を出力する。(付録参照)

5.2 比較手法

実験では以下の既存手法と比較を行い、提案アルゴリズムの有効性を検証する。

SOO 方策 [13] 探索空間の階層構造を 3 分木で表し、各層 (深さ) で葉ノードに対応する部分空間の midpoint で関数値が最大のノードを 3 分割して展開することを繰り返すことで探索を行う手法。

optuna [14] ハイパーパラメータ探索のためのブラックボックス最適化フレームワークで、ベイズ最適化の一種である TPE(Tree-structured Parzen Estimator) 手法による探索が可能。サンプラーは TPESampler、その他のオプションはデフォルトとした。

5.3 実験 1: 小規模テストケースにおける探索

実験 1 では、岩見沢市の地図情報から作成された予算額 47058 の比較的小規模なテストケースについて最適な施設配置の探索を行う。図 2 は、各シミュレータ呼び出し回数における評価値の推移を表したグラフである。各プロットは、各シミュレータ呼び出し回数時点までに得られた上位 10 個の解についてその平均評価値を算出したものであり、またその標準偏差を上下の半透明の領域の幅としている。

提案手法と SOO 方策を用いた実験では、概ね同等の、高い平均評価値を持つ解が得られた。本実験は予算額の少ないテストケースに対する最適化であったため、同等の平均評価値で頭打ちになったと考えられる。

本テストケースは予算額が比較的少額であり、また特定の変数 (EV の台数) の影響が支配的であった。提案手法が早期に平均評価値の高い解を発見できているのは、本提案手法の探索木は、「どの変数の値から決定するか」も含めて動的に探索可能であるため、UCB 等の選択指標の働きによって、このような重要度の高い変数を決定する選択枝を優先的に探索することが可能であったためであると考ええる。また、SOO 方策には「どの変数の値から決定するか」を動的に決定する機能は無いため、事前にランダムに設定した変数の決定順序に沿って探索を実行している。このため、SOO 方策による 1e8 スコアを超える解の発見は提案手法に比較して僅かに遅れたと考えられる。

optuna は他 2 手法と比較してうまく探索できていないことが確認できる。ある特定の要素に予算のほとんどを投入する場合、そのほかの変数を取りうる値は極端に制限されるため、そ

のような解からなる領域は、解空間全体に対して非常に小さく、かつ実行可能領域にない要素に囲まれた領域となる。optuna がその主な用途とするハイパーパラメータ最適化は、各ハイパーパラメータの純粋な直積空間上を探索する問題であるため、このように複雑な領域を探索する本テストケースに対しては、その性能を十分に発揮できなかったと考えられる。

図 4 は、提案手法によって得られた、高平均評価値の解の一例である。図 4 下図のような特定地域への重点的な施設配置や、図 4 上図のような広域への EV の分散配備など、設備配置として一定の妥当性がある解が生成されたと考える。

5.4 実験 2: 大規模テストケースにおける探索

実験 2 では、岩見沢市の地図情報から作成された予算額 247000 の比較的大規模なテストケースについて最適な施設配置の探索を行う。図 3 は、各シミュレータ呼び出し回数における評価値の推移を表したグラフである。実験 1 同様、各プロットは、各シミュレータ呼び出し回数時点までに得られた上位 10 個の解についてその平均評価値を算出したものであり、またその標準偏差を上下の半透明の領域の幅としている。

実験 1 とは異なり、提案手法によって SOO よりも明確に平均評価値の高い解を得られた。予算額が多い分多くの施設が配置可能であり、またその分設定すべき変数の個数も増加するため、探索過程における変数の決定順序も最適化可能である、提案手法の有利性がより強く表れたと考える。

また、探索空間や実行可能領域は実験 1 と同様に複雑で、かつそのサイズも拡大したため、optuna によって得られた解は実験 1 同様低い平均評価値の解であった。

6 おわりに

本稿では、ブラックボックス関数が与えられた予算制約付き組合せ最適設備投資問題を定式化し、MCTS アルゴリズムによる最適解の探索手法を提案した。

また実データから生成された問題を対象とした実験においては、他既存手法と比較して良い解を発見できることを確認した。

今後の課題としては、アルゴリズム (特に MCTS における選択・展開操作) の改良や、計算の並列化による探索の高速化を考えている。

文 献

- [1] 株式会社日立製作所公式 Web サイト「研究開発」. 「地域産業の低炭素化と防災機能強化を両立する地産地消・自立型地域エネルギーシステムを開発」. https://www.hitachi.co.jp/rd/news/topics/2021/2111_ing.html, 2020.
- [2] Cameron B. Browne, Edward Powley, Daniel Whitehouse, Simon M. Lucas, Peter I. Cowling, Philipp Rohlfshagen, Stephen Tavenor, Diego Perez, Spyridon Samothrakis, and Simon Colton. A survey of monte carlo tree search methods. *IEEE Transactions on Computational Intelligence and AI in Games*, Vol. 4, No. 1, pp. 1-43, 2012.
- [3] Romaric Gaudel and Michele Sebag. Feature selection as a one-player game. In *Proceedings of the 27th International Conference on International Conference on Machine*

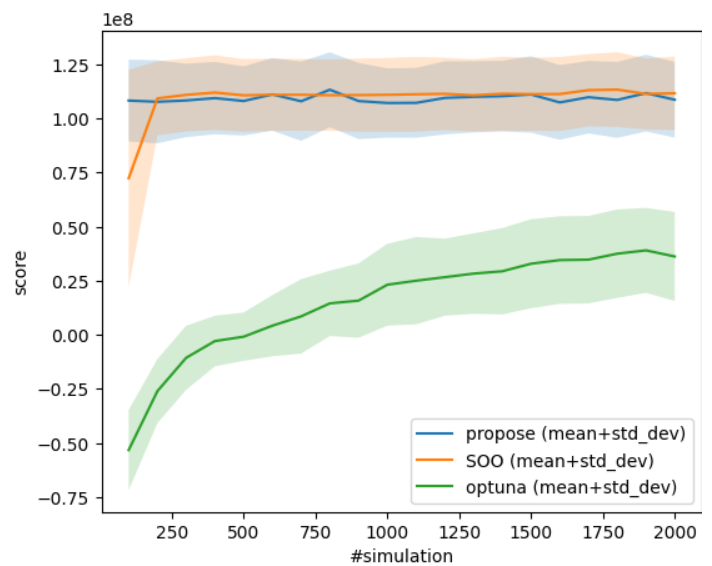


図 2 小規模テストケースにおける評価値の推移

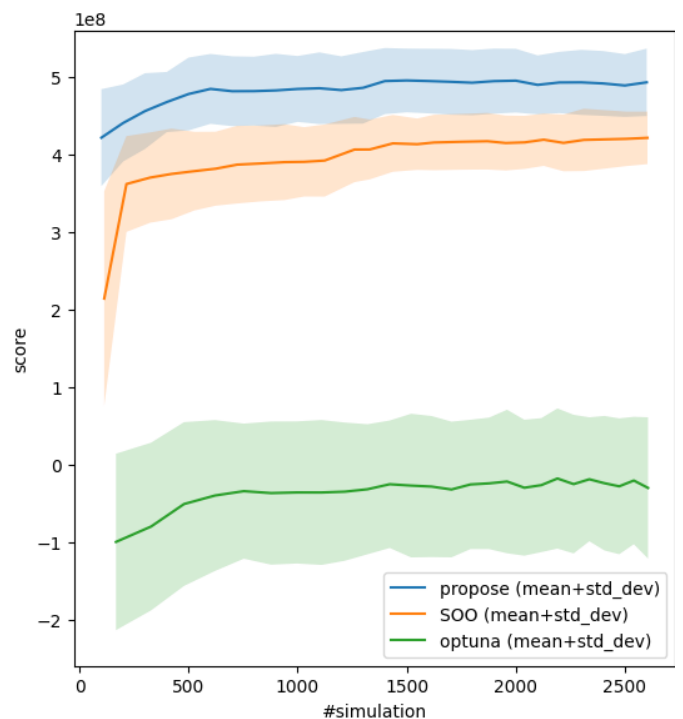


図 3 大規模テストケースにおける評価値の推移

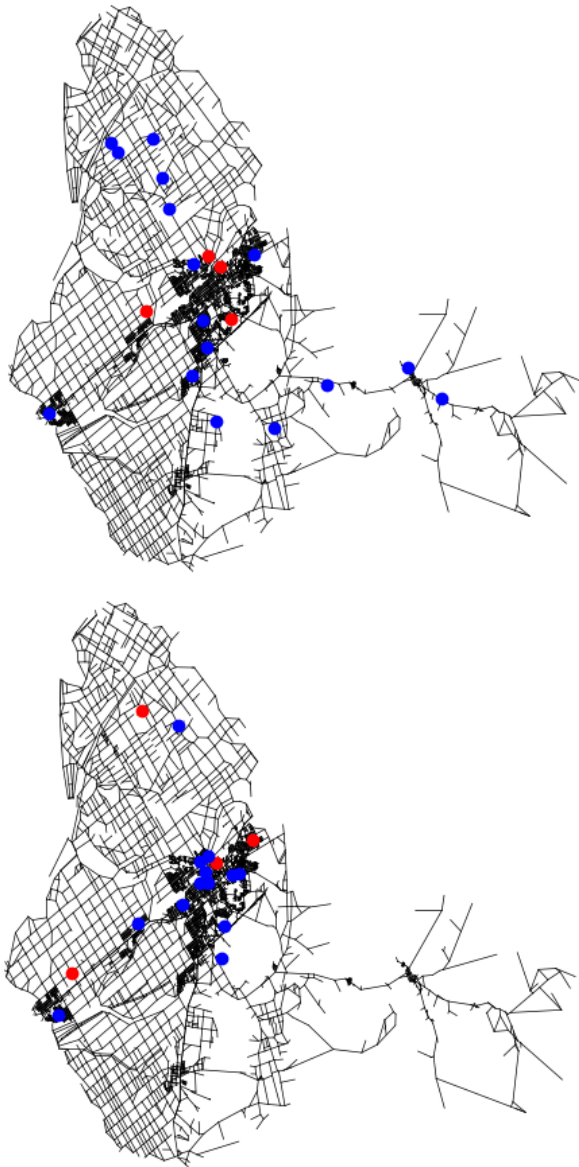


図 4 提案手法によって得られる解の一例 (赤丸がナノグリッド、青丸が EV の配置位置)

- Learning*, ICML'10, pp. 359–366, Madison, WI, USA, 2010. Omnipress.
- [4] Rémi Coulom. Efficient selectivity and backup operators in monte-carlo tree search. In *Proceedings of the 5th International Conference on Computers and Games*, CG'06, pp. 72–83, Berlin, Heidelberg, 2006. Springer-Verlag.
 - [5] Sylvain Gelly and David Silver. Combining online and offline knowledge in uct. In *Proceedings of the 24th International Conference on Machine Learning*, ICML '07, pp. 273–280, New York, NY, USA, 2007. Association for Computing Machinery.
 - [6] David Silver, Aja Huang, Christopher Maddison, Arthur Guez, Laurent Sifre, George Driessche, Julian Schrittwieser, Ioannis Antonoglou, Veda Panneershelvam, Marc Lanctot, Sander Dieleman, Dominik Grewe, John Nham, Nal Kalchbrenner, Ilya Sutskever, Timothy Lillicrap, Madeleine Leach, Koray Kavukcuoglu, Thore Graepel, and Demis Hassabis. Mastering the game of go with deep neural networks and tree search. *Nature*, Vol. 529, pp. 484–489, 01 2016.
 - [7] P. Hingston and M. Masek. Experiments with monte carlo othello. In *2007 IEEE Congress on Evolutionary Computation*, pp. 4059–4064, 2007.
 - [8] Masato Sumita, Xiufeng Yang, Shinsuke Ishihara, and Ryo Tamura. Hunting for organic molecules with artificial intelligence: Molecules optimized for desired excitation energies. Vol. 4, pp. 1126–1133, 08 2018.
 - [9] Djallel Bouneffouf. Finite-time analysis of the multi-armed bandit problem with known trend. In *2016 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, pp. 2543–2549, 2016.
 - [10] Peter Auer, Nicolò Cesa-Bianchi, Yoav Freund, and Robert E. Schapire. The nonstochastic multiarmed bandit problem. *SIAM Journal on Computing*, Vol. 32, No. 1, pp. 48–77, 2002.
 - [11] Levente Kocsis and Csaba Szepesvari. Bandit based monte-carlo planning. In *European Conference on Machine Learning*, 2006.
 - [12] Hitachi hokudai lab. & hokkaido university contest 2021. <https://atcoder.jp/contests/hokudai-hitachi2021>, 2021.
 - [13] Rémi Munos. Optimistic optimization of a deterministic function without the knowledge of its smoothness. In J. Shawe-Taylor, R. Zemel, P. Bartlett, F. Pereira, and K.Q. Weinberger, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 24. Curran Associates, Inc., 2011.
 - [14] Takuya Akiba, Shotaro Sano, Toshihiko Yanase, Takeru Ohta, and Masanori Koyama. Optuna: A next-generation hyperparameter optimization framework. In *Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*, KDD '19, pp. 2623–2631, New York, NY, USA, 2019. Association for Computing Machinery.

付 録

1 評価実験 シミュレータ詳細

提案手法の評価実験に使用したシミュレータについて、その詳細を記述する。

まず、本設備投資評価シミュレータにおいて、地図上に配置可能な施設は、発電・蓄電・給電設備である**ナノグリッド**と、人や電力の輸送に使用される**EV**の2種類である。地図上に配置された各ナノグリッドは、その内部設定として、その配置位置、太陽光発電設備の機種・数量、燃料発電機の機種、蓄電池の機種・数量・初期蓄電量、EVチャージャーの機種の設定を必要とする。同様に、地図上に配置された各EVは、その内部設定として、その初期配置位置と車種、初期蓄電量の設定を必要とする。

また、本設備投資評価シミュレータには、問題情報として以下の情報が与えられる。

シミュレーション時間情報 シミュレーションを行う日数や、

一日分のシミュレーションにかけるステップ数を表す整数値

スコア情報 評価指標となる各種スコアの比重を表す実数値

地図情報 設備の配置可能位置やその位置関係を表す無向グラフで、各頂点には座標、人口、利用可能面積、地価の値、また各エッジにはその距離を表す重みが設定されている

電力需要情報 電力需要の設定された頂点番号のリストと、その各頂点の各シミュレーション時刻における電力需要量の期待値および分散

日射量情報 地図上の各頂点の各シミュレーション時刻における日射量の期待値

輸送需要情報 各シミュレーション時刻における輸送需要の発生頻度

避難所情報 避難所が存在する頂点番号のリストと、各避難所の収容人数および避難時の電力需要量

利用可能な設備の情報 利用可能な設備のパラメータを記述したリストで、各設備種類につきそれぞれ2から4機種程度

各設備のパラメータ

- 太陽光発電設備：1台あたりの面積、価格
- 燃料発電機：最大出力量、価格
- 蓄電池：1台あたりの蓄電容量、価格
- EVチャージャー：最大入力電力量、最大出力電力量、価格
- EV：充電容量、乗車可能人数、充電速度、放電速度、移動距離当たりの消費電力、価格

本設備投資評価シミュレータは、与えられた環境・問題情報のもと、入力された設備投資設計についてその運用をシミュレーションし、その評価値を返す。このとき評価は、輸送スコア、電力スコア、環境スコア、災害対応スコア、の4つのスコアの線形和によって算出される。

各スコアの詳細は以下の通りである。

輸送スコア 輸送依頼の達成度合いを表すスコアで、シミュレーション終了までに完了した輸送依頼の数と、時間内に完了

できなかった輸送依頼の数から算出される。このとき輸送依頼は、シミュレーション中の各時刻に、各頂点の人口に応じた確率でランダムに発生する。

電力スコア 施設群全体の電力収支を表すスコアで、各ナノグリッドおよびEVの初期蓄電量とシミュレーション終了時の蓄電量の差と、シミュレーション中に系統から購入した電力量から算出される。

環境スコア 環境負荷の発生する行動に対するペナルティを表すスコアで、シミュレーション中に燃料発電機を使用した量に応じて算出される。

災害対応スコア 災害による停電への対処能力を表すスコアで、系統電力からの電力購入を禁止した状態での無停電運用日数によって算出される。

微生物学的水質予測のための符号制約付き学習アルゴリズム

高田 裕也[†] 小野 晴生[†] 門屋 俊祐^{††} 佐野 大輔^{†††} 加藤 毅^{††††}

[†] 群馬大学大学院理工学府 〒376-8515 群馬県桐生市天神町 1-5-1

^{††} 東京大学大学院工学系研究科 〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

^{†††} 東北大学大学院工学研究科 〒980-8579 仙台市荒巻字青葉 6-6-06

^{††††} 群馬大学情報学部 〒371-8510 群馬県前橋市荒牧町 4-2

E-mail: [†]{t221d047,t221d023,katotsu.cs}@gunma-u.ac.jp, ^{††}kadoya@env.t.u-tokyo.ac.jp,
^{†††}daisuke.sano.e1@tohoku.ac.jp

あらまし 病原微生物の暴露に由来する水質汚染の公衆衛生上のリスクを管理することは、世界的な課題となっている。病原微生物による暴露のリスクを正しく評価するためには、物理化学的水質データから病原微生物を高精度に予測する機械学習アルゴリズムを確立する必要がある。本研究では、水質工学で蓄積されたドメイン固有の事前知識を符号制約で表し、その制約下で効率的に学習問題を解くアルゴリズムを開発した。このアルゴリズムは、確率的双対座標上昇法 (SDCA) の枠組みに基づいており、最適解への線形収束が保証されている。微生物学的水質予測の実データを用いた数値実験を通して、符号制約を用いた学習の有効性を報告する。

キーワード 符号制約, 凸最適化, 確率的双対座標上昇法 (SDCA), 経験リスク最小化, 微生物学的水質予測。

1 はじめに

水は生命にとって最も重要な資源の一つであるが、その汚染によって公衆衛生の安全が脅かされている。一見飲めるように見える透明な水であっても、実際は微生物によって汚染されており、重大な健康リスクを引き起こす可能性がある。水が病原微生物にさらされると、深刻な下痢性疾患を引き起こしており、毎年 485,000 人が死亡している [1]。国家経済にも被害を及ぼすほどの事態に発展するリスクもあることから [2], 病原微生物の暴露に由来する水質汚染の公衆衛生上のリスクを管理することは、世界的な課題となっている。

規制当局は、水質ガイドラインを策定することで公衆衛生を保全しようと努めている [1], [3]。水質ガイドラインは、最小限のモニタリングコストで微生物学的安全性を確保することを目的としている。水中の病原微生物を直接測定することはしばしばコストがかかりすぎるため、現実的ではない。その代わりに、測定が容易な物理化学的水質データによって水質管理が行われている。そのため、物理化学的水質データから病原微生物を高精度に予測できれば、適切に水質管理を行うことが可能となる。

本研究では、物理化学的水質データから病原微生物を予測するために、以下のような経験リスク最小化問題を考える。

$$\begin{aligned} \min \quad & P(\mathbf{w}) \quad \text{wrt } \mathbf{w} \in \mathbb{R}^d, \\ \text{where} \quad & P(\mathbf{w}) := \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi_i(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle). \end{aligned} \quad (1)$$

ただし、入力ベクトルを $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^d$, 凸な損失関数を $\phi_1, \dots, \phi_n: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, 正則化定数を $\lambda > 0$ とする。

サポートベクトルマシン (SVM) は、損失関数をヒンジ損失 $\phi_i(s) = \max(0, 1 - y_i s)$ と設定することで表現できる。ただ

し、 $y_i \in \{\pm 1\}$ はクラスラベルである。損失関数を **2 値交差エントロピー損失** $\phi_i(s) = \log(1 + \exp(-y_i s))$ とすると、ロジスティック回帰になる。 y_i を連続値のラベルとし、損失関数を **二乗誤差損失** $\phi_i(s) = \frac{1}{2}(y_i - s)^2$ とすると、リッジ回帰になる。

線形予測器 $\langle \mathbf{w}, \cdot \rangle$ の重みベクトル $\mathbf{w} := [w_1, \dots, w_d]^\top \in \mathbb{R}^d$ の学習タスクにおいて、高い汎化性能を得るためには、十分な個数の訓練用問題が必要である。しかし、微生物学的水質予測に対しては、データの収集に多大なコストがかかるため、訓練用問題の規模は限られる。訓練用問題の不足による学習性能の低下を抑制するには、事前知識の活用が有効である。

水質工学の分野では、一部の物理化学的水質データと病原微生物との間に正の相関または負の相関があることが知られている [19]。この事前知識は**ドメイン知識**と呼ばれる。例えば、ドメイン知識として、 h 番目の特徴量 x_h がクラスラベルと正の相関があることが分かっている場合、対応する重み w_h は正になるべきである。逆に、負の相関があることが分かっている場合、 w_h は負になるべきである。しかし、訓練用問題数が十分でなく、相関が弱い場合は、対応する重みは、既知の相関の符号と逆の符号に学習されてしまうことがしばしば起こる。その結果、学習された重みが正しい予測を妨げてしまう。

最近では、Tajima et al [33] が線形 SVM の重みベクトル $\mathbf{w}$ に**符号制約**を課し、生物学的配列分類への応用において、その有効性を示した。符号制約は、重みベクトル $\mathbf{w} = [w_1, \dots, w_d]^\top$ のいくつかの要素に与える。このとき、クラスラベルと正の相関が既知の特徴の添え字集合 $\mathcal{I}_\geq \subseteq [d] (= \{1, \dots, d\})$ に対して、 $h \in \mathcal{I}_\geq$ となる w_h に非負制約 $w_h \geq 0$ を課し、クラスラベルと負の相関が既知の特徴の添え字集合 $\mathcal{I}_\leq \subseteq ([d] \setminus \mathcal{I}_\geq)$ に対して、 $h \in \mathcal{I}_\leq$ となる w_h に非正制約 $w_h \leq 0$ を課す。このような符号制約を課すことで、特徴とクラスラベルの相関方向に関する事前知識との矛盾を明示的に回避することができる。

本研究では、符号制約の下で経験リスク最小化する問題に対する新しい最適化アルゴリズムを開発した。提案するアルゴリズムは、主目的関数値を直接最小化する代わりに双対問題を解く。すると、主目的関数値と双対目的関数値の差を計算することができるため、明確な停止条件が得られるという長所がある。主目的関数値と双対目的関数値の差が閾値以下の場合、目的誤差は閾値より小さいことが保証される。Tajima et al [33] は、損失関数を古典的な非平滑ヒンジ損失関数に限定したうえで、フランクウルフアルゴリズム [16] を採用した。本研究で提案するアルゴリズムは、**確率的双対座標上昇法 (SDCA)** [30] に基づいており、**平滑な損失関数**で定式化された符号制約付き経験リスク最小化問題を解く。ここで、平滑とは勾配がリプシッツ連続であることを指す。提案するアルゴリズムの長所は、 **ϵ -最適解**（目的関数の最小値との差が ϵ 以下の解）に到達するための反復回数を上限とする**線形収束** [27] を理論的に保証できるところである。

微生物学的水質データセットを用いた数値実験により、符号制約を課すことで予測性能が顕著に向上することを確認した。さらに、公開データセットを用いた数値実験により、提案するアルゴリズムが従来のアルゴリズムより高速に収束することも確認した。

本稿の構成は以下の通りである。関連する研究は次節で述べる。3 節では、符号制約付き学習問題を定式化し、その双対問題を示す。4 節で一般的な SDCA の枠組みを紹介し、5 節で符号制約付き学習問題に対する SDCA 反復処理の実装を示す。6 節で微生物学的水質予測への応用に関する実験結果を報告し、最後に本稿の結論を述べる。なお、本稿に記述した理論や実験結果の多くは、採択済みの査読付き論文 [32] に掲載したものと同一である。

2 関連研究

符号制約は、回帰タスクや識別タスクなど多様な学習問題に広く用いられてきた。符号制約付き回帰は非負行列分解の重要な構成要素の 1 つである [8], [11], [21], [24], [34]。他には、符号制約付き最小二乗推定は、非負画像復元 [14], [22], [31], [35]、顔表現 [13], [17]、微生物分析 [6]、病原性水質分析 [19]、画像の超解像 [9]、スペクトル分析 [37]、断層イメージング [26]、音源定位 [25] などの多様な分野で応用されている。識別タスクに関しては、Tajima et al [33] が符号制約付き SVM を開発した。

二乗誤差損失に関しては、高速かつ安定した最適化アルゴリズムが利用可能である [5], [20], [23]。古典的なヒンジ損失に関しては、Tajima et al がフランクウルフ最適化アルゴリズムを開発した [33]。一方、符号制約を課さない一般的な経験リスク最小化であれば、安定した最適化アルゴリズムが多数存在する [7], [18], [28], [29], [36]。しかし、筆者らの知る限り、符号制約の下で一般的な損失関数を用いて最適化するアルゴリズムは、これまでにほとんど研究されていない。

3 主問題と双対問題

本研究の目的は、以下の制約付き経験リスク最小化問題に対する最適化アルゴリズムを開発することである：

$$\begin{aligned} \min \quad & P(\mathbf{w}) \quad \text{wrt } \mathbf{w} \in \mathbb{R}^d, \\ \text{subject to} \quad & \forall h \in \mathcal{I}_{\geq}, \quad w_h \geq 0, \\ & \forall h \in \mathcal{I}_{\leq}, \quad w_h \leq 0, \end{aligned} \quad (2)$$

添え字集合 $\mathcal{I}_{\geq}$ と $\mathcal{I}_{\leq}$ は以下を満たすように設定する。

$$\mathcal{I}_{\geq} \cup \mathcal{I}_{\leq} \subseteq [d] \quad \text{and} \quad \mathcal{I}_{\geq} \cap \mathcal{I}_{\leq} = \emptyset. \quad (3)$$

残りの添え字集合 $\mathcal{I}_0 := [d] \setminus (\mathcal{I}_{\geq} \cup \mathcal{I}_{\leq})$ は空でなくてもよい。通常、バイアス項の添え字は $\mathcal{I}_0$ に含まれる。1 節で前述したように、符号制約は事前知識に基づいて設定する。もし、 h 番目の特徴量 x_h がクラスラベルと正の相関があるという事前知識があれば、 w_h に非負制約を適用することができ、逆の関係が成り立つ場合は、 w_h に非正制約を適用することができる。

あらかじめ $h \in \mathcal{I}_{\leq}$ の特徴量 $x_{h,i}$ の符号を逆転しておく（すなわち、 $x_{h,i} \leftarrow -x_{h,i}$ ）ことで、非正制約を非負制約に変換することができる。そのため、以降のアルゴリズムの説明においては、 $\mathcal{I}_{\leq} = \emptyset$ として、議論を進める。 $x_{h,i}$ は $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ の h 番目の要素を表す。ただし、 $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ は、訓練に用いられる i 番目の入力ベクトルである。訓練後、対応する重み w_h の符号を逆転することで、 $w_h \leq 0$ を満たす重みを得ることができる。

実行可能領域を $\mathcal{S}$ とすると、(2) の制約問題は以下のように書き換えることができる：

$$\min \quad P(\mathbf{w}) \quad \text{wrt } \mathbf{w} \in \mathcal{S} \subseteq \mathbb{R}^d. \quad (4)$$

$\sigma \in \{1, 0\}^d$ を次のようにおく：その h 番目の要素が $h \in \mathcal{I}_{\geq}$ のときは、 $\sigma_h = 1$ とし、 $h \in \mathcal{I}_0$ のときは、 $\sigma_h = 0$ とする。すると、実行可能領域 $\mathcal{S}$ を次のように簡潔に表すことができる：

$$\mathcal{S} := \{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d \mid \forall h \in [d], \sigma_h w_h \geq 0\}. \quad (5)$$

開発した最適化アルゴリズムは、フェンシエル双対 [4] と呼ばれる双対関数を最大化する SDCA の枠組みに基づいている。双対関数を $D: \mathbb{R}^n \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$ とおく。ただし、 $\bar{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{\pm\infty\}$ とする。このとき、双対関数 D は以下のように表される：

$$D(\boldsymbol{\alpha}) := -\frac{1}{2\lambda n^2} \left\| \boldsymbol{\pi} \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{x}_i \right) \right\|^2 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi_i^*(-\alpha_i), \quad (6)$$

ただし、 $\boldsymbol{\alpha} := [\alpha_1, \dots, \alpha_n]^\top \in \mathbb{R}^n$ は双対変数ベクトル、 $\phi_i^*: \mathbb{R} \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$ は ϕ_i の**凸共役**、ベクトル値関数 $\boldsymbol{\pi}: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ は $\mathcal{S}$ への射影演算子であり、 $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}) := \mathbf{v} + \max(\mathbf{0}, -\boldsymbol{\sigma} \odot \mathbf{v})$ である。また、演算子 $\odot$ はアダマール積を表す。 $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{v})$ の h 番目の要素を $\pi_h(\mathbf{v})$ とすると、 $h \in \mathcal{I}_{\geq}$ かつ $v_h \leq 0$ のとき、 $\pi_h(\mathbf{v}) = 0$ が成り立つ。そうでなければ、 $\pi_h(\mathbf{v}) = v_h$ となる。

双対関数 $D(\boldsymbol{\alpha})$ を最大にする解 $\boldsymbol{\alpha}_* := [\alpha_1^*, \dots, \alpha_n^*]^\top$ が見つければ、次のように主問題 (4) の最適解を復元することができる。

きる：

$$\mathbf{w}_* = \frac{1}{\lambda n} \pi \left[\sum_{i=1}^n \alpha_i^* \mathbf{x}_i \right]. \quad (7)$$

損失関数 ϕ_i は、 $1/\gamma$ -平滑であると仮定する（すなわち、 $\nabla \phi_i$ は $1/\gamma$ -リプシッツ連続である）。例えば、**2 値交差エントロピー損失**は 0.25 -平滑である。**2 次ヒンジ損失**

$$\phi_i(s) := \frac{1}{2} (\max\{0, 1 - y_i s\})^2 \quad (8)$$

および、平滑化ヒンジ損失

$$\phi_i(s) := \begin{cases} \frac{1-2y_i s}{2} & \text{for } s < 0, \\ \frac{1}{2} (\max\{0, 1 - y_i s\})^2 & \text{for } s \geq 0 \end{cases} \quad (9)$$

は両方とも、 1 -平滑である。 $(1/\gamma)$ -平滑な凸関数の凸共役は、 γ -強凸関数 [15] である。これは、 $\forall \eta \in [0, 1]$ に対して、以下を満たす：

$$\begin{aligned} & \eta \phi_i^*(-u) + (1 - \eta) \phi_i^*(-\alpha) \\ & \geq \phi_i^*(-\eta u - (1 - \eta)\alpha) + \frac{\gamma}{2} (u - \alpha)^2 (1 - \eta) \eta. \end{aligned} \quad (10)$$

SDCA の枠組みでは、上記の不等式を次のように式変形したものを使用する：

$$\begin{aligned} & \phi_i^*(-\alpha) - \phi_i^*(-\alpha - \eta(u - \alpha)) \\ & \geq (\phi_i^*(-\alpha) - \phi_i^*(-u))\eta + \frac{\gamma}{2} (u - \alpha)^2 (1 - \eta) \eta. \end{aligned} \quad (11)$$

4 SDCA の枠組み

SDCA は、各反復ごとに双対変数ベクトル α の中から無作為に要素の一つを選択し、更新する。 α の中から選択された要素の添え字を i とおく。無作為に選択された要素の 1 反復前の値との差を $\Delta\alpha$ とすると、 $\alpha_i^{(t)} := \alpha_i^{(t-1)} + \Delta\alpha$ と表せる。 $i' \in [n] \setminus \{i\}$ のとき、双対変数の値は変化しない（つまり、 $\alpha_{i'}^{(t)} := \alpha_{i'}^{(t-1)}$ ）。

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{w}}^{(t)} &:= \frac{1}{\lambda n} \sum_{i'=1}^n \alpha_{i'}^{(t)} \mathbf{x}_{i'}. \quad \text{and} \\ \mathbf{w}^{(t)} &:= \pi \left[\bar{\mathbf{w}}^{(t)} \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

とおく。各反復で $\Delta\alpha$ が決まれば、このベクトル $\bar{\mathbf{w}}^{(t)}$ を次のように $O(d)$ のコストで更新できる：

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{w}}^{(t)} &= \frac{\alpha_i^{(t-1)} + \Delta\alpha}{\lambda n} \mathbf{x}_i + \frac{1}{\lambda n} \sum_{i' \in [n] \setminus \{i\}} \alpha_{i'}^{(t-1)} \mathbf{x}_{i'} \\ &= \bar{\mathbf{w}}^{(t-1)} + \frac{\Delta\alpha}{\lambda n} \mathbf{x}_i. \end{aligned} \quad (13)$$

表記を簡単にするために、ここでは上付き文字 $(t-1)$ を省略して次のように書く：

$$\mathbf{w} := \mathbf{w}^{(t-1)}, \quad \mathbf{v}_0 := \bar{\mathbf{w}}^{(t-1)}, \quad \text{and} \quad \alpha := \alpha^{(t-1)}. \quad (14)$$

$\Delta\alpha$ は、次の関数を最大化する値を選ぶのが理想的である：

Algorithm 1: SDCA algorithm for maximizing $D(\alpha)$.

```

1 begin
2   Choose  $\alpha^{(0)}$  s.t.  $\alpha^{(0)} \in \text{dom}(-D)$ ;
3   for  $t := 1$  to  $T$  do
4     Pick  $i$  randomly from  $\{1, \dots, n\}$ ;
5      $\eta_t \in \operatorname{argmax}_{\eta \in [0, 1]} J_t^1(\eta)$ ;
6      $\alpha^{(t)} := \alpha^{(t-1)} - (\nabla \phi(\langle \mathbf{w}^{(t-1)}, \mathbf{x}_i \rangle) + \alpha_i^{(t-1)} \eta_t \mathbf{e}_i)$ ;
7     Compute  $\bar{\mathbf{w}}^{(t)}$  and  $\mathbf{w}^{(t)}$ ;
8   end
9 end
```

$$\begin{aligned} J_t^0(\Delta\alpha) &:= D(\alpha + \Delta\alpha \mathbf{e}_i) - D(\alpha) \\ &= \frac{\lambda}{2} \|\pi[\mathbf{v}_0]\|^2 - \frac{\lambda}{2} \left\| \pi \left[\mathbf{v}_0 + \frac{\Delta\alpha}{\lambda n} \mathbf{x}_i \right] \right\|^2 \\ &\quad + \frac{1}{n} (\phi_i^*(-\alpha_i) - \phi_i^*(-\alpha_i - \Delta\alpha)) \end{aligned} \quad (15)$$

ただし、 $\mathbf{e}_i$ は i 番目の要素が 1 の単位ベクトルである。 $\Delta\alpha$ は、 ϕ_i^* の引数のままなので、最適な $\Delta\alpha$ を見つけるのは一般的に難しい。閉形式の更新則を得るために、 $\Delta\alpha$ の範囲を以下のように制限する。 $\alpha_i + \nabla \phi(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle) \neq 0$ のとき、

$$\eta := -\frac{\Delta\alpha}{\alpha_i + \nabla \phi(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle)} \in [0, 1] \quad (16)$$

それ以外のとき、 $\Delta\alpha := 0$ とする。以下では、 $u := -\nabla \phi(\langle \mathbf{w}, \mathbf{x}_i \rangle) \neq \alpha_i$ が非自明な場合のみを議論する。ただし、 α_i は $\alpha^{(t-1)}$ の i 番目の要素である。このとき、 $q := u - \alpha_i$ とすると、 $\Delta\alpha = q\eta$ となる。

$$\mathbf{v}_q := \frac{q}{\lambda n} \mathbf{x}_i \quad (17)$$

とする。不等式 (11) を適用すると、 $J_t^0(q\eta)$ は次のように下から抑えられる：

$$\begin{aligned} J_t^0(q\eta) &= \frac{\lambda}{2} \|\pi[\mathbf{v}_0]\|^2 - \frac{\lambda}{2} \|\pi[\mathbf{v}_0 + \eta \mathbf{v}_q]\|^2 \\ &\quad + \frac{1}{n} (\phi_i^*(-\alpha_i) - \phi_i^*(-\alpha_i - q\eta)) \\ &\geq \frac{\lambda}{2} \|\pi[\mathbf{v}_0]\|^2 - \frac{\lambda}{2} \|\pi[\mathbf{v}_0 + \eta \mathbf{v}_q]\|^2 \\ &\quad + a_{\text{offs}} \eta^2 + b_{\text{offs}} \eta =: J_t^1(\eta). \end{aligned} \quad (18)$$

ただし、

$$\begin{aligned} a_{\text{offs}} &:= -\frac{q^2 \gamma}{2n}, \quad \text{and} \\ b_{\text{offs}} &:= \frac{\phi_i^*(-\alpha_i) - \phi_i^*(-u) + 0.5q^2 \gamma}{n}. \end{aligned} \quad (19)$$

下限 J_t^1 では、 $\Delta\alpha$ が ϕ_i^* の引数に含まれていないので、 J_t^1 は J_t^0 よりも扱いやすい。以上の議論により、符号制約の下で学習する SDCA は、Algorithm 1 のようにまとめることができる。 J_t^0 の代わりに J_t^1 を最大化しても、SDCA の線形収束は保証される：

定理 1. $R := \max_{i \in [n]} \|\mathbf{x}_i\|$, $h_P^{(t)} := P(\mathbf{w}^{(t)}) - P(\mathbf{w}_*)$, $h_D^{(t)} := D(\boldsymbol{\alpha}_*) - D(\boldsymbol{\alpha}^{(t)})$ とする. 任意の $\epsilon_P > 0$ に対して, *Algorithm 1* が以下の反復数に達したとき, $\mathbb{E}[h_P^{(t)}] \leq \epsilon_P$ が成り立つ:

$$t \geq \frac{\lambda n \gamma + R^2}{\lambda \gamma} \log \left(\frac{h_D^{(0)}}{\epsilon_P} \frac{\lambda n \gamma + R^2}{\lambda \gamma} \right). \quad (20)$$

この定理の証明は, 付録 1 を参照されたい. 従来の符号制約のない学習を行う SDCA アルゴリズムが要する反復数の下限は, 基本的に定理 1 で与えた下限と変わらない. [30] で示された従来 SDCA の反復数の下限では, $h_D^{(0)}$ を $\boldsymbol{\alpha}^{(0)} = \mathbf{0}, \phi_i(0) \leq 1$ と仮定して, 1 に置き換えている.

次節では, *Algorithm 1* の第 5 行の実装方法について説明する.

5 SDCA 反復処理の実装

本節では, $J_t^1(\eta)$ の最大値を求めるアルゴリズムを示す. 本研究の主要な発見は, J_t^1 が凹な区分 2 次関数で表されるという性質である. この発見により, 更新則の効率的なアルゴリズムを開発することができた. 以下では, まず $J_t^1(\eta)$ が区分 2 次関数の形式で表すことができることを示し (5.1 節), そのうえで $J_t^1(\eta)$ の最大値を求める 2 種類のアルゴリズムについて説明する (5.2 節と 5.3 節).

5.1 区分 2 次関数

$v_{h,0}$ と $v_{h,q}$ を, それぞれ $\mathbf{v}_0$ と $\mathbf{v}_q$ の h 番目の要素とする. $\mathcal{I}_0 := \{h \in [d] \mid \sigma_h = 0\}$ とする. $0 = \theta_1 < \dots < \theta_{d_t+1} = 1$ となるような $\boldsymbol{\theta} := [\theta_1, \dots, \theta_{d_t}, \theta_{d_t+1}]^\top$ を定義する. ただし, $\theta_1, \dots, \theta_{d_t}, \theta_{d_t+1}$ は, 以下で定義される $\text{Card}[\Theta] = d_t + 1$ の離散集合 $\Theta \subset \mathbb{R}$ の元である:

$$\begin{aligned} \Theta := & \{0, 1\} \cup \{\theta \in (0, 1) \\ & \mid \exists h \in \mathcal{I}_\geq \text{ s.t. } v_{h,0} = -\theta v_{h,q} \neq 0\}. \end{aligned} \quad (21)$$

$k \in \{2, \dots, d_t\}$ における要素 θ_k は, ある $h \in \mathcal{I}_\geq$ に対して, アフライン関数 $\eta \mapsto v_{h,0} + \eta v_{h,q}$ が 0 の水平線を横切る位置である. 図 1 は, $d = 3, \mathcal{I}_\geq = \{1, 2, 3\}, \mathbf{v}_0 = [0.5, 0.75, -0.5]^\top, \mathbf{v}_q = [0.5, -1, 1]^\top$ のときのアフライン関数の数値例である. Θ の定義より, $d_t = 3, \theta_1 = 0, \theta_2 = 0.5, \theta_3 = 0.75, \theta_4 = 1$ となる. アフライン関数 $\eta \mapsto v_{3,0} + \eta v_{3,q}$ は, $\eta = \theta_2$ で 0 の水平線を横切り, $\eta \mapsto v_{2,0} + \eta v_{2,q}$ は, $\eta = \theta_3$ で 0 の水平線を横切る.

$k \in [d_t]$ に対して, 次のような添え字集合を定義する:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_k := & \mathcal{I}_0 \cup \{h \in \mathcal{I}_\geq \mid \\ & 2v_{h,0} + (\theta_k + \theta_{k+1})v_{h,q} > 0\}. \end{aligned} \quad (22)$$

図 1 の例の場合, 定義 (22) より, 添え字集合は

$$\mathcal{H}_1 = \{1, 2\}, \mathcal{H}_2 = \{1, 2, 3\}, \mathcal{H}_3 = \{1, 3\} \text{ となる.}$$

$h \in \mathcal{H}_k \cap \mathcal{I}_\geq$ に対して, アフライン関数 $\eta \mapsto v_{h,0} + \eta v_{h,q}$ は 0 の水平線を超える. すなわち,

$$\forall \eta \in (\theta_k, \theta_{k+1}), \quad \forall h \in \mathcal{H}_k, \quad v_{h,0} + \eta v_{h,q} > 0, \quad (23)$$

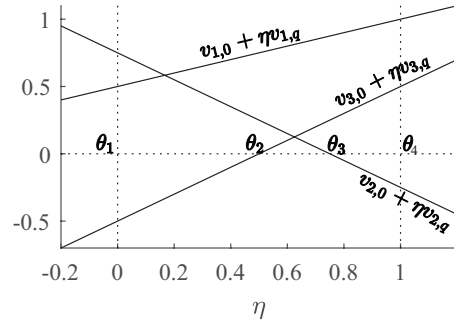


図 1: アフライン関数 $\eta \mapsto v_{h,0} + \eta v_{h,q}$ の数値例.

が成り立ち, $\forall \eta \in (\theta_k, \theta_{k+1})$ に対して,

$$[\boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}_0 + \eta \mathbf{v}_q)]_h = \begin{cases} v_{h,0} + \eta v_{h,q} & \text{for } h \in \mathcal{H}_k, \\ 0 & \text{for } h \notin \mathcal{H}_k \end{cases} \quad (24)$$

が導ける. ただし, $[\boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}_0 + \eta \mathbf{v}_q)]_h$ は, d 次元ベクトル $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{v}_0 + \eta \mathbf{v}_q)$ の h 番目の要素である. ベクトル $\boldsymbol{\theta}$ と $k \in [d_t]$ に関する集合 $\mathcal{H}_k$ より, 関数 J_t^1 は以下の区分 2 次関数で表すことができる:

$$\forall \eta \in [\theta_k, \theta_{k+1}], \quad J_t^1(\eta) = a_k \eta^2 + b_k \eta \quad (25)$$

ただし, a_k と b_k は以下のように与えられる.

$$\begin{aligned} a_k &= a_{\text{offs}} - \frac{\lambda}{2} \sum_{h \in \mathcal{H}_k} v_{h,q}^2, \quad \text{and} \\ b_k &= b_{\text{offs}} - \lambda \sum_{h \in \mathcal{H}_k} v_{h,q} v_{h,0}. \end{aligned} \quad (26)$$

5.2 $O(d^2)$ の実装

J_t^1 の凹性と微分可能性から, η_* で表される $J_t^1(\eta)$ の最大値の一つは, 次のように求められる:

- $\nabla J_t^1(0) = b_1 \leq 0$ のとき, $\eta_* = 0$;
- $\nabla J_t^1(1) = 2a_{d_t+1} + b_{d_t+1} \geq 0$ のとき, $\eta_* = 1$;
- それ以外のとき, 区間 $[\theta_{k_*}, \theta_{k_*+1}]$ に最大値 $\eta_* = -0.5b_{k_*}/a_{k_*}$ を含むような $k_* \in [d_t]$ が存在する.

第 3 の場合 (つまり, $2a_{d_t+1} + b_{d_t+1} < 0 < b_1$) の区間番号 k_* は, 全ての区間を調べることで求めることができる. なぜなら, J_t^1 の微分可能性より, $\nabla J_t^1(\theta_{k_*}) \geq 0 \geq \nabla J_t^1(\theta_{k_*+1})$ が成り立つからである. この議論と前述の発見を組み合わせると, SDCA の各反復は以下のように実装することができる:

1. $i \in [n]$ を無作為に選ぶ; $O(1)$.
2. $\mathbf{v}_0$ および $\mathbf{v}_q$ を計算する; $O(d)$.
3. Θ を計算する; $O(d)$.
4. Θ の要素を昇順に整列する; $O(d \log d)$.
5. $k \in [d_t]$ に対して, $\mathcal{H}_k$ を計算する; $O(d^2)$.
6. $k \in [d_t]$ に対して, 係数 (a_k, b_k) を計算する; $O(d^2)$.
7. 最大値 η_* を求める; $O(d)$.
8. $\Delta \alpha = q \eta_*$; $O(1)$.
9. $\bar{\mathbf{w}}^{(t)} = \bar{\mathbf{w}}^{(t-1)} + \frac{\Delta \alpha}{\lambda n} \mathbf{x}_i$ を計算する; $O(d)$.

この実装より、各反復は $O(d^2)$ の計算コストで実行できる。この実装で最も重いステップは、添え字集合 $\mathcal{H}_k$ を計算するステップ (ステップ 5) と係数 a_k, b_k を計算するステップ (ステップ 6) であり、どちらも $O(d^2)$ のコストがかかる。これらの時間複雑度は次のように導かれる。区分 2 次関数の個数は $d_t \leq \text{Card}(\mathcal{I}_{\geq}) + 1 \leq d + 1 = O(d)$ で抑えられる。このとき、 $k \in [d_t]$ に対して、各 $\mathcal{H}_k$ は、 $\mathcal{H}_k \subseteq [d]$ より、 $O(d)$ 時間で計算できる。したがって、ステップ 5 の時間複雑度は $O(d^2)$ であることが証明される。 $\text{Card}(\mathcal{H}_k) = O(d)$ より、 $2d_t (= O(d))$ 個の係数 $a_1, b_1, \dots, a_{d_t}, b_{d_t}$ を (26) を用いて計算すると、全部で $O(d^2)$ のコストがかかる。

一方、筆者らは、時間複雑度を線形コストに削減できるアルゴリズムを発見した。その線形時間アルゴリズムを以下に示す。

5.3 $O(d \log d)$ の実装

ここでは、 $J_t^1(\eta)$ を $\eta \in [0, 1]$ に関して厳密に最大化するための線形時間のアルゴリズムを示す。5.2 節で与えられたアルゴリズムの理論的な時間複雑度は $O(d^2)$ であるが、以下に示すアルゴリズムの時間複雑度は、 $O(d \log d)$ に減少する：

$$\mathcal{H}_{k,\text{in}} := \mathcal{H}_k \setminus \mathcal{H}_{k-1} \quad \text{and} \quad \mathcal{H}_{k,\text{out}} := \mathcal{H}_{k-1} \setminus \mathcal{H}_k \quad (27)$$

を定義すると、区分 2 次関数の係数は、 $\forall k \geq 2$ に対して、

$$\begin{aligned} a_k &:= a_{k-1} - \frac{\lambda}{2} \sum_{h \in \mathcal{H}_{k,\text{out}}} v_{h,q}^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{h \in \mathcal{H}_{k,\text{in}}} v_{h,q}^2, \\ b_k &:= b_{k-1} - \lambda \sum_{h \in \mathcal{H}_{k,\text{out}}} v_{h,q} v_{h,0} + \lambda \sum_{h \in \mathcal{H}_{k,\text{in}}} v_{h,q} v_{h,0}, \end{aligned} \quad (28)$$

として再帰的に表現できる。(28) を使って、 a_k と b_k を計算するには、集合 $\mathcal{H}_{k,\text{in}}$ と $\mathcal{H}_{k,\text{out}}$ だけでなく、 $\mathcal{H}_1$ もあらかじめ必要になる。集合 $\mathcal{H}_1$ は、以下の 3 つの条件の内 1 つが満たされているかどうかを調べることで、 $O(d)$ 以内で求めることができる：

$$\begin{aligned} & \text{(i) } h \in \mathcal{I}_0; \quad \text{(ii) } v_{h,0} > 0; \\ & \text{(iii) } v_{h,0} = 0 \quad \text{かつ} \quad v_{h,q} > 0. \end{aligned} \quad (29)$$

すなわち、 $h \in [d]$ が上記の 3 つの条件の内 1 つを満たすなら、 $h \in \mathcal{H}_1$ となり、満たさないなら、 $h \notin \mathcal{H}_1$ となる。ここで、 $\mathcal{H}_{k,\text{in}}$ と $\mathcal{H}_{k,\text{out}}$ の計算方法について述べる。そのために、まず、 $h \in \mathcal{I}_{\geq}$ に対して、 $\tilde{\theta}_h^\circ := -\frac{v_{h,0}}{v_{h,q}}$ を計算する。次に、 $(d_t - 1)$ 個の端点 $\theta_2, \dots, \theta_{d_t}$ を、 $\tilde{\theta}_h^\circ$ の値を昇順に並べ替え、開区間 $(0, 1)$ の外の値と重複する値を取り除くことで求める。このとき、 θ を計算する過程で、 $k \in \{2, \dots, d_t\}$ に対して、集合 $\mathcal{H}_{k,\text{in}}$ および $\mathcal{H}_{k,\text{out}}$ は、次のように同時に計算できる：

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{k,\text{in}} &= \left\{ h \in \mathcal{I}_{\geq} \mid \theta_k = \tilde{\theta}_h^\circ, v_{h,q} > 0 \right\}, \quad \text{and} \\ \mathcal{H}_{k,\text{out}} &= \left\{ h \in \mathcal{I}_{\geq} \mid \theta_k = \tilde{\theta}_h^\circ, v_{h,q} < 0 \right\}. \end{aligned} \quad (30)$$

これらの議論から、5.2 節で与えられた $O(d^2)$ の実装は以下のように修正することができる。

1. $i \in [n]$ を無作為に選ぶ; $O(1)$.
2. $\mathbf{v}_0$ および $\mathbf{v}_q$ を計算する; $O(d)$.
3. $\mathcal{H}_1$ を計算する; $O(d)$.
4. $h \in \mathcal{I}_{\geq}$ に対して、 $\tilde{\theta}_h^\circ$ を計算する; $O(d)$.
5. $k \in [d_t]$ に対して、 $(\mathcal{H}_{k,\text{in}}, \mathcal{H}_{k,\text{out}})$, θ_k を計算する; $O(d \log d)$.
6. $k \in [d_t]$ に対して、係数 (a_k, b_k) を計算する; $O(d)$.
7. 最大値 η_* を求める; $O(d)$.
8. $\Delta\alpha = q\eta_*$; $O(1)$.
9. $\bar{\mathbf{w}}^{(t)} = \bar{\mathbf{w}}^{(t-1)} + \frac{\Delta\alpha}{\lambda n} \mathbf{x}_i$ を計算する; $O(d)$.

ステップ 5 は、並び替える値の数が $\text{Card}(\mathcal{I}_{\geq}) = O(d)$ であるため、 $O(d \log d)$ のコストで $\tilde{\theta}_h^\circ$ を並べ替えることができる。ステップ 6 の計算量は、 $O(d)$ である。なぜならば、関係式

$$\bigcup_{k=2}^{d_t} \mathcal{H}_{k,\text{in}} \subseteq \mathcal{I}_+ \subseteq [d] \quad \text{and} \quad \bigcup_{k=2}^{d_t} \mathcal{H}_{k,\text{out}} \subseteq \mathcal{I}_+ \subseteq [d] \quad (31)$$

より、 $k \in \{2, \dots, d_t\}$ に対して、(28) の項の総数の上限は、 $4d$ であるからである。したがって、SDCA の各反復は、 $O(d \log d)$ の計算コストで済むことが示された。

6 数値実験

6.1 パターン認識性能

微生物学的水質予測において、符号制約がパターン認識性能に及ぼす効果を確認するために数値実験を行った。使用した微生物学的水質データセットは、Sapporo, NY top, NY bottom, Indian の 4 つである。Sapporo データセットは、[19] で提供されたもので、 $n_{\text{tot}} := 177$ 個の例題からなり、各例題は、目的変数 E.coli と 9 個の特徴変数 WT, pH, EC, DO, SS, BOD, TN, TP, FR から構成されている。このタスクは、大腸菌が 500 MPN を超えるかどうかを予測することである。このデータセットは、88 個の正例と 89 個の負例からなる。NY top, NY bottom, Indian は、kaggle.com で提供されていたものである。この 3 つのデータセットには、それぞれ、534 個、523 個、896 個の例題が含まれている。各例題は目的変数 FC と 5 種類の物理化学的水質データからなる。これらに対し、FC が中央値を超えれば陽性、下回れば陰性とする 2 クラス分類問題を構成した。

符号制約は、表 1 の通りである。3 種類の損失関数、平滑化ヒンジ損失、2 次ヒンジ損失、2 値交差エントロピー損失を試した。各損失関数に対して、従来の学習と符号制約学習を行った。その結果、6 種類の予測結果が得られた。性能基準には、正解率 (すなわち、評価用例題数に対する真陽性と真陰性の合計) を用いた。訓練用例題数 n は、5 から 100 まで変化させた。ただし、 n 個の例題は、各データセットから無作為に抽出した。この n 個の例題を 6 種類の学習手法に与え、6 個の予測器を得た。残りの $(n_{\text{tot}} - n)$ 個の例題は、評価に用いた。この手順を 200 回繰り返した。

図 2, 図 3, 図 4, 図 5 は、それぞれ 4 つの水質データセットから得られた 200 個の正解率の平均をプロットしたものであ

表 1: 4つのデータセットの特徴と符号制約. チェックがついている特徴は, 対応する各データセットに含まれている. 符号制約は, 一番右の列に表す. ≥ 0 と ≤ 0 はそれぞれ非負と非正の制約を意味する.

特徴	Sapporo	NY top	NY bottom	Indian	符号制約
WT	✓				≥ 0
pH	✓	✓	✓		≤ 0
EC	✓	✓	✓	✓	
DO	✓	✓	✓	✓	≤ 0
SS	✓				≥ 0
BOD	✓	✓	✓	✓	
TN	✓				≥ 0
TP	✓				≥ 0
FR	✓				≤ 0
TC		✓	✓	✓	≥ 0
Nitro				✓	≥ 0

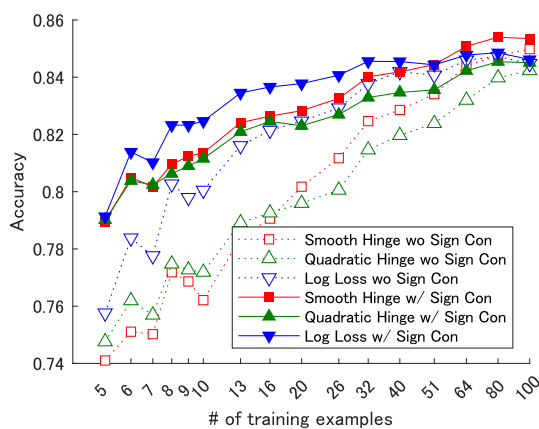


図 2: Sapporo データセットでの予測性能. 実線の曲線は符号制約の下で最適化したときの予測性能を示し, 破線の曲線は符号制約を用いない場合の予測性能を示す. 正方形, 上向きの三角形, 下向きの三角形の印は, それぞれ, 平滑化ヒンジ損失, 2 次ヒンジ損失, 2 値交差エントロピー損失を用いた場合を表す.

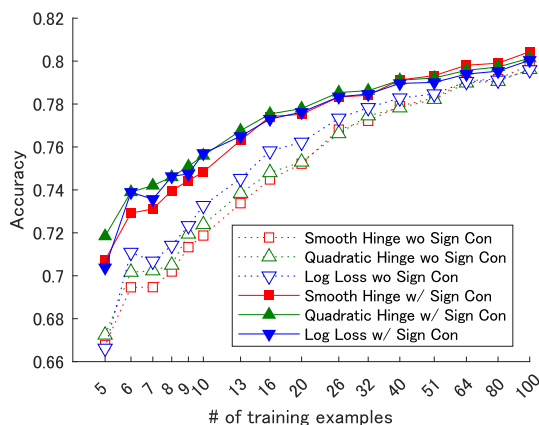


図 3: NY top データセットでの予測性能.

る. 横軸は訓練用例数 n を表す. 4つのデータセットと 3 個の損失関数の全てにおいて, 符号制約は予測性能を向上させた.

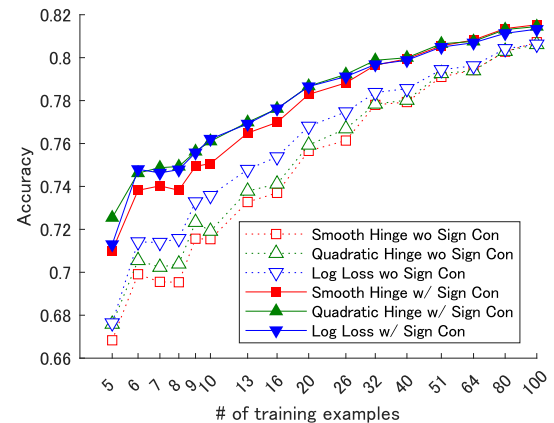


図 4: NY bottom データセットでの予測性能.

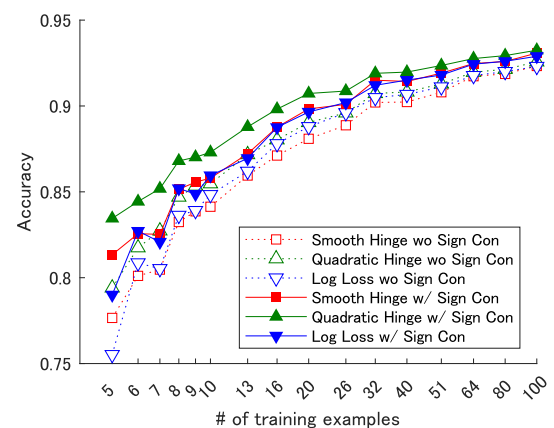


図 5: Indian データセットでの予測性能.

特に, 訓練用例数が少ない程, 符号制約の効果は顕著であった. 符号制約は, ドメイン固有の事前知識の一種であり, 学習が事前知識に矛盾することを明示的に防ぐことができる. 符号制約がないと, 訓練用例数が少ない場合, 重み w_h の符号が特徴とクラスラベル間の相関の真の符号から反転してしまうという現象がしばしば起こる. 重みの符号反転を回避する符号制約が効果的に働き, 汎化性能を向上させた.

6.2 収束性能

提案する SDCA アルゴリズムの収束の速さを評価するために, 3つの異なるデータセット (Magic04, Segment, Waveform) で収束実験を行った. この実験では, 提案アルゴリズムと射影確率的勾配降下法 (PSGD) の収束性能を比較した. PSGD は, $\mathbf{w}^{(t+1)} := \pi(\mathbf{w}^{(t)} - \eta \nabla P(\mathbf{w}^{(t)}))$ という式で解を更新する. ただし, η はステップサイズである.

データセットの特徴は, 以下の通りである. Magic04 は, 19,024 個の例題と 10 個の特徴を持ち, Segment は, 2,310 個の例題と 19 個の特徴を持ち, Waveform は, 5,000 個の例題と 21 個の特徴を持つ. PSGD のステップサイズは, $\eta = 10^0$, $\eta = 10^{-1}$, $\eta = 10^{-2}$, $\eta = 10^{-3}$ とした. 正則化定数は, $\lambda = 1/n$ とした. 最適化には, 2 値交差エントロピー損失 $\phi_i(s) = \log(1 + \exp(-y_i s))$ を用いた. 無作為に選択した特徴の半分に非負制約を課し, 残りの半分に非正制約を課し

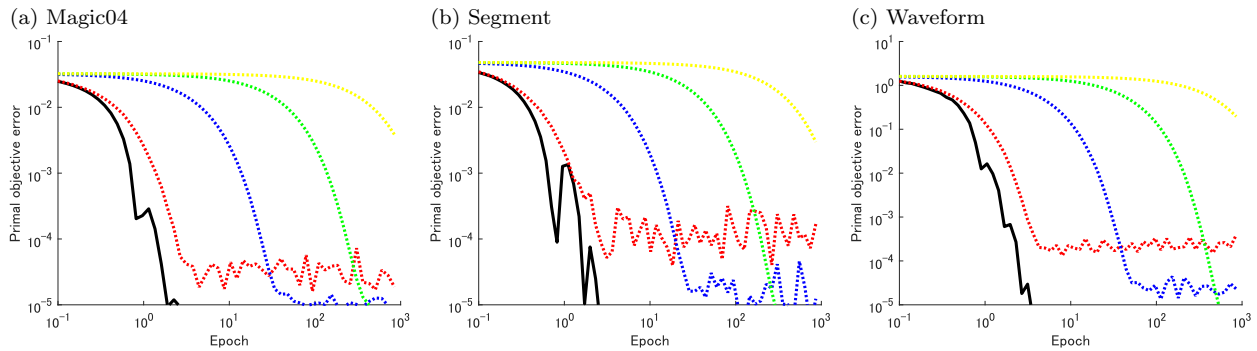


図 6: 3つのデータセットにおける収束のふるまい. 黒の実線が提案アルゴリズム, 破線が PSGD の収束のふるまいを表す. 赤, 青, 緑, 黄の破線はそれぞれ, ステップサイズを 10^0 , 10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3} としたときの PSGD の収束のふるまいを表す.

た. このとき, 各反復で目的誤差を観察した. しかし, $P(\mathbf{w}_*)$ は未知のため, 真の目的誤差 $P(\mathbf{w}) - P(\mathbf{w}_*)$ は直接評価できない. そこで, この誤差を近似するために, 提案アルゴリズムを実行し, $T' := 1,000$ 回目の反復における双対目的関数値 $D(\boldsymbol{\alpha}^{(T')})$ を用いて評価した. $D(\boldsymbol{\alpha}^{(T')})$ は, 真の双対目的関数値の最大値より若干小さくなる可能性があるが, 十分最大値に近い値とみなせる. そこで, $P(\mathbf{w}) - D(\boldsymbol{\alpha}^{(T')})$ を目的誤差の評価値とした. いずれのデータセットでも, 提案アルゴリズムを用いた場合, $P(\mathbf{w}^{(T')}) - D(\boldsymbol{\alpha}^{(T')})$ が 10^{-7} 以下となり, 目的誤差は 10^{-7} に収まることが確認できた.

図 6 では, 3つのデータセット Magic04, Segment, Waveform でのエポック数に対する目的誤差の変化を, それぞれ, (a), (b), (c) の3つのパネルに示す. 提案アルゴリズムは, 各データセットに対して, 約 1.9, 2.7, 3.7 エポック後に, 10^{-5} の誤差に達した. 一方, PSGD は, どのデータセットでも, ステップサイズが $\eta = 10^0$ と $\eta = 10^{-3}$ のとき, 10^{-5} に達しなかった. これは, ステップサイズが大きすぎたり, 小さすぎたりしたためである. $\eta = 10^{-2}$ のステップサイズでは, 最終的に 10^{-5} に達したが, かなりの数のエポックを経た後だった. すなわち, 3つのデータセットでそれぞれ, 429, 306, 536 エポックを要して, 目的誤差が 10^{-5} に達した. これらのエポック数は, 提案アルゴリズムの 100 倍以上である. また, $\eta = 10^{-1}$ のステップサイズでは, PSGD は, Magic04 と Segment の各データセットで, 79 エポック, 109 エポックで 10^{-5} に達した. しかし, データセット Waveform では, PSGD は 10^3 エポック経っても, 10^{-5} に達しなかった. このように, 提案アルゴリズムが PSGD よりも有意に速く最適解に収束した.

筆者らの実装では, 3つのデータセットにおける提案アルゴリズムの 1 エポック当たりの平均実行時間はそれぞれ, 0.488 秒, 0.0556 秒, 0.146 秒であった. 一方, PSGD の 1 エポック当たりの平均実行時間はそれぞれ, 0.141 秒, 0.0231 秒, 0.0428 秒であった. 提案アルゴリズムの 1 エポック当たりの実行時間は PSGD を上回るが, 高精度な解を得るために必要なエポック数を大幅に減少させることができる. この効率性により, PSGD に比べて, 高精度な解に達するまでにかかる全体的な計算時間は短縮される.

7 ま と め

本稿では, 符号制約下での経験リスク最小化のための新しいアルゴリズムを提案した. 本研究で開発したアルゴリズムは, 任意の平滑で凸な損失関数を適用できる. この最適化アルゴリズムは, SDCA の枠組みに基づいており, 最適解への線形収束が保証されている. パターン認識における符号制約の効果を, 微生物学的水質予測の実データを用いた計算機実験により実証した.

筆者らは, 未発見の符号制約に適した事前知識が, 多くの応用分野で眠っていると考える. 今後の課題として, 符号制約に適した他の応用を模索していくことが考えられる.

謝 辞

本研究の一部は, 独立行政法人環境保全機構の環境研究総合推進費 (5-2006) により, 実施された. また, JSPS 科研費 22K04372 の助成を受けた.

文 献

- [1] World Health Organization. Guidelines for drinking-water quality: Fourth edition incorporating the first and second addenda. <https://www.who.int/publications/i/item/9789240045064>, 2022.
- [2] Helen Bridle. Waterborne Pathogens: Detection Methods and Applications. Academic Press, 2020.
- [3] T. J. Wade and N. Pai and J. N. Eisenberg and J. r. Colford JM. Do U.S. Environmental Protection Agency water quality guidelines for recreational waters prevent gastrointestinal illness? A systematic review and meta-analysis. *Environ Health Perspect*, 111(8):1102-9, Jun 2003. doi: 10.1289/ehp.6241.
- [4] D.P. Bertsekas. *Nonlinear Programming*. Athena Scientific, 1999.
- [5] M. Bierlaire, Ph.L. Toint, and D. Tuytens. On iterative algorithms for linear least squares problems with bound constraints. *Linear Algebra and its Applications*, 143:111-143, jan 1991. doi: 10.1016/0024-3795(91)90009-1.
- [6] Y. Cai, H. Gu, and T. Kenney. Learning microbial community structures with supervised and unsupervised non-negative matrix factorization. *Microbiome*, 5(1):110, Aug 2017.

- [7] Aaron Defazio, Francis Bach, and Simon Lacoste-julien. Saga: A fast incremental gradient method with support for non-strongly convex composite objectives. In Z. Ghahramani, M. Welling, C. Cortes, N.d. Lawrence, and K.q. Weinberger, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 27*, pages 1646–1654. Curran Associates, Inc., 2014.
- [8] Chris Ding, Tao Li, Wei Peng, and Haesun Park. Orthogonal nonnegative matrix tri-factorizations for clustering. In *Proceedings of the 12th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining - KDD06*. ACM Press, 2006. doi:10.1145/1150402.1150420.
- [9] W. Dong, F. Fu, G. Shi, X. Cao, J. Wu, G. Li, and G. Li. Hyperspectral image super-resolution via non-negative structured sparse representation. *IEEE Trans Image Process*, 25(5):2337–52, May 2016.
- [10] Kelwin Fernandes and Jaime S. Cardoso. Hypothesis transfer learning based on structural model similarity. *Neural Computing and Applications*, nov 2017. doi:10.1007/s00521-017-3281-4.
- [11] Cédric Févotte and Jérôme Idier. Algorithms for nonnegative matrix factorization with the β -divergence. *Neural Computation*, 23(9):2421–2456, sep 2011. doi:10.1162/neco.a.00168.
- [12] Trevor Hastie, Robert Tibshirani, and Jerome Friedman. *The Elements of Statistical Learning – Data Mining, Inference, and Prediction*. Springer, 2nd edition, 2009.
- [13] R. He, W. S. Zheng, B. G. Hu, and X. W. Kong. Two-stage nonnegative sparse representation for large-scale face recognition. *IEEE Trans Neural Netw Learn Syst*, 24(1):35–46, Jan 2013.
- [14] Simon Henrot, Said Moussaoui, Charles Soussen, and David Brie. Edge-preserving nonnegative hyperspectral image restoration. In *2013 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing*. IEEE, may 2013. doi: 10.1109/icassp.2013.6637926.
- [15] Jean-Baptiste Hiriart-Urruty. *Fundamentals of Convex Analysis*. Springer, 2001.
- [16] Martin Jaggi. Revisiting Frank-Wolfe: Projection-free sparse convex optimization. In Sanjoy Dasgupta and David McAllester, editors, *Proceedings of the 30th International Conference on Machine Learning*, volume 28 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 427–435, Atlanta, Georgia, USA, 17–19 Jun 2013. PMLR.
- [17] Yangfeng Ji, Tong Lin, and Hongbin Zha. Mahalanobis distance based non-negative sparse representation for face recognition. In *2009 International Conference on Machine Learning and Applications*. IEEE, dec 2009. doi:10.1109/icmla.2009.50.
- [18] Rie Johnson and Tong Zhang. Accelerating stochastic gradient descent using predictive variance reduction. In *Advances in Neural Information Processing Systems 26: Proceedings of a meeting held December 5-8, 2013, Lake Tahoe, Nevada, United States.*, pages 315–323, 2013.
- [19] T. Kato, A. Kobayashi, W. Oishi, S. S. Kadoya, S. Okabe, N. Ohta, M. Amarasiri, and D. Sano. Sign-constrained linear regression for prediction of microbe concentration based on water quality datasets. *J Water Health*, 17(3):404–415, Jun 2019.
- [20] Dongmin Kim, Suvrit Sra, and Inderjit S. Dhillon. Tackling box-constrained optimization via a new projected quasi-newton approach. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 32(6):3548–3563, jan 2010. doi:10.1137/08073812x.
- [21] Keigo Kimura, Mineichi Kudo, and Yuzuru Tanaka. A column-wise update algorithm for nonnegative matrix factorization in bregman divergence with an orthogonal constraint. *Machine Learning*, 103(2):285–306, mar 2016. doi:10.1007/s10994-016-5553-0.
- [22] Germana Landi and Elena Loli Piccolomini. NPTool: a Matlab software for nonnegative image restoration with Newton projection methods. *Numerical Algorithms*, 62(3):487–504, jun 2012. doi: 10.1007/s11075-012-9602-x.
- [23] Charles L. Lawson and Richard J. Hanson. *Solving Least Squares Problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, jan 1995. doi:10.1137/1.9781611971217.
- [24] Daniel D Lee and H Sebastian Seung. Algorithms for non-negative matrix factorization. In *Advances in neural information processing systems*, pages 556–562, 2001.
- [25] Yuanqing Lin, D.D. Lee, and L.K. Saul. Nonnegative deconvolution for time of arrival estimation. In *2004 IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing*. IEEE, 2004. doi:10.1109/icassp.2004.1326273.
- [26] Jun Ma. Algorithms for non-negatively constrained maximum penalized likelihood reconstruction in tomographic imaging. *Algorithms*, 6(1):136–160, mar 2013. doi: 10.3390/a6010136.
- [27] Yurii E. Nesterov. *Introductory Lectures on Convex Optimization: A Basic Course*. Kluwer Academic Publishers, 2003.
- [28] Nicolas L. Roux, Mark Schmidt, and Francis R. Bach. A stochastic gradient method with an exponential convergence rate for finite training sets. In F. Pereira, C.J.C. Burges, L. Bottou, and K.Q. Weinberger, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 25*, pages 2663–2671. Curran Associates, Inc., 2012.
- [29] Mark Schmidt, Nicolas Le Roux, and Francis Bach. Minimizing finite sums with the stochastic average gradient. *Mathematical Programming*, 162(1-2):83–112, jun 2016. doi:10.1007/s10107-016-1030-6.
- [30] Shai Shalev-Shwartz and Tong Zhang. Stochastic dual coordinate ascent methods for regularized loss. *J. Mach. Learn. Res.*, 14(1):567–599, February 2013.
- [31] Amnon Shashua and Tamir Hazan. Non-negative tensor factorization with applications to statistics and computer vision. In *Proceedings of the 22nd international conference on Machine learning - ICML'05*. ACM Press, 2005. doi:10.1145/1102351.1102451.
- [32] Yuya Takada, Rikuto Mochida, Miya Nakajima, Syun suke Kadoya, Daisuke Sano, and Tsuyoshi Kato. Stochastic dual coordinate ascent for learning sign constrained linear predictors. *IEICE Transactions on Information & Systems*, Exxx-D:–, xxx 2024. accepted.
- [33] Kenya Tajima, Kohei Tsuchida, Esmeraldo Ronnie R. Zara, Naoya Ohta, and Tsuyoshi Kato. Learning sign-constrained support vector machines. In *2020 25th International Conference on Pattern Recognition (ICPR)*. IEEE, January 2021. doi:10.1109/icpr48806.2021.9412786.
- [34] J. Wang, F. Tian, H. Yu, C. H. Liu, K. Zhan, and X. Wang. Diverse non-negative matrix factorization for multiview data representation. *IEEE Trans Cybern.*, (-):–, Sep 2017.
- [35] Yanfei Wang and Shiqian Ma. Projected barzilai–borwein method for large-scale nonnegative image restoration. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 15(6):559–583, sep 2007. doi: 10.1080/17415970600881897.
- [36] Lin Xiao and Tong Zhang. A proximal stochastic gradient method with progressive variance reduction. *SIAM Journal on Optimization*, 24(4):2057–2075, jan 2014. doi:10.1137/140961791.
- [37] Qiang Zhang, Han Wang, Robert Plemmons, and V. Paul Pauca. Spectral unmixing using nonnegative tensor factorization. In *Proceedings of the 45th annual southeast regional conference on ACM-SE 45*. ACM Press, 2007. doi: 10.1145/1233341.1233449.

付 録

1 定理 1 の証明

ここで示す定理 1 の証明は、主に [30] の従来の SDCA で用いられた証明技法に従う。以下の補助定理がこの証明において重要である。

補助定理 2. 任意の $\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_q \in \mathbb{R}^d$ と $\eta \in [0, 1]$ に対して、以下が成り立つ。

$$\|\pi[\mathbf{v}_0]\|^2 - \|\pi[\mathbf{v}_0 + \eta \mathbf{v}_q]\|^2 + 2\eta \langle \pi[\mathbf{v}_0], \mathbf{v}_q \rangle + \eta^2 \|\mathbf{v}_q\|^2 \geq 0. \quad (\text{A.1})$$

補助定理 3. $F_i^{(t-1)} := \phi_i(z_i^{(t-1)}) + \phi_i^*(-\alpha_i^{(t-1)}) + z_i^{(t-1)} \alpha_i^{(t-1)}$ とする。このとき、以下が成り立つ。

$$h_P^{(t-1)} + h_D^{(t-1)} \leq \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n F_j^{(t-1)}. \quad (\text{A.2})$$

補助定理 2 の証明: これは、 $\forall h \in [n]$ に対して、

$$\pi_h[v_{h,0}]^2 - \pi_h[v_{h,0} + \eta v_{h,q}]^2 + 2\eta \pi[v_{h,0}]v_{h,q} + \eta^2 v_{h,q}^2 \geq 0. \quad (\text{A.3})$$

を証明すれば十分である。このとき、 $v_h \in \mathbb{R}$ に対して、 $\pi_h[v_h] := v_h + \max\{0, -\sigma_h v_h\}$ となる。これは、 $h \in [n]$ 上で、(A.3) の左辺の和は、(A.1) の左辺と等しくなるためである。

$v_{h,0} + \eta v_{h,q} \geq 0$ かつ $v_{h,0} \geq 0$ となるような $h \in \mathcal{I}_0$ および $h \in \mathcal{I}_{\geq}$ に対して、(A.3) の左辺は以下のように式変形できる。

$$v_{h,0}^2 - (v_{h,0} + \eta v_{h,q})^2 + 2\eta v_{h,0}v_{h,q} + \eta^2 v_{h,q}^2 = 0. \quad (\text{A.4})$$

$v_{h,0} + \eta v_{h,q} \leq 0$ かつ $v_{h,0} \geq 0$ となるような $h \in \mathcal{I}_{\geq}$ に対して、(A.3) の左辺は以下のように式変形できる。

$$v_{h,0}^2 - 0 + 2\eta v_{h,0}v_{h,q} + \eta^2 v_{h,q}^2 = (v_{h,0} + \eta v_{h,q})^2 \geq 0. \quad (\text{A.5})$$

$v_{h,0} + \eta v_{h,q} \geq 0$ かつ $v_{h,0} \leq 0$ となるような $h \in \mathcal{I}_{\geq}$ に対して、(A.3) の左辺は以下のように式変形できる。

$$0 - (v_{h,0} + \eta v_{h,q})^2 + 0 + \eta^2 v_{h,q}^2 \geq 0. \quad (\text{A.6})$$

これは、 $0 \leq v_{h,0} + \eta v_{h,q} \leq \eta v_{h,q}$ より導かれる。

q.e.d. of 補助定理 2

補助定理 3 の証明: $\forall \mathbf{v} := [v_1, \dots, v_d]^\top \in \mathbb{R}^d$ に対して、

$$\begin{aligned} \|\pi[\mathbf{v}]\|^2 &= \sum_{h \in \mathcal{I}_0} v_h^2 + \sum_{h \in \mathcal{I}_{\geq}} \pi_h[v_h]^2 \\ &\leq \sum_{h \in \mathcal{I}_0} v_h^2 + \sum_{h \in \mathcal{I}_{\geq}} v_h^2 = \|\mathbf{v}\|^2, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} \|\bar{\mathbf{w}}^{(t-1)}\|^2 &= \left\langle \bar{\mathbf{w}}^{(t-1)}, \frac{1}{\lambda n} \sum_{j=1}^n \mathbf{x}_j \alpha_j^{(t-1)} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\lambda n} \sum_{j=1}^n z_j^{(t-1)} \alpha_j^{(t-1)}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

に着目する。これらの不等式は以下を導く。

$$\begin{aligned} h_P^{(t-1)} + h_D^{(t-1)} &= P(\pi[\boldsymbol{\alpha}^{(t-1)}]) - D(\boldsymbol{\alpha}^{(t-1)}) \\ &= \lambda \|\pi[\bar{\mathbf{w}}^{(t-1)}]\|^2 + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \phi_j(z_j^{(t-1)}) + \phi_j^*(-\alpha_j^{(t-1)}) \\ &\leq \lambda \|\bar{\mathbf{w}}^{(t-1)}\|^2 + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \phi_j(z_j^{(t-1)}) + \phi_j^*(-\alpha_j^{(t-1)}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n F_j^{(t-1)}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

q.e.d. of 補助定理 3

ここまでで定理 1 を証明する準備ができた。 $z_i^{(t-1)} := \langle \mathbf{w}^{(t-1)}, \mathbf{x}_i \rangle$, $u_i^{(t-1)} := -\nabla \phi_i(z_i^{(t-1)})$, $q_i^{(t-1)} := u_i^{(t-1)} - \alpha_i^{(t-1)}$, $\bar{\beta} := \lambda\gamma/(\lambda n\gamma + R^2)$ とする。このとき、

$$\begin{aligned} h_D^{(t-1)} - h_D^{(t)} &\geq J_t^1(\eta_t) \geq J_t^1(n\bar{\beta}) \\ &\geq -2\lambda n\bar{\beta} \left\langle \mathbf{w}^{(t-1)}, \frac{\mathbf{x}_i q_i^{(t-1)}}{\lambda n} \right\rangle - \lambda n^2 \bar{\beta}^2 \left\| \frac{\mathbf{x}_i q_i^{(t-1)}}{\lambda n} \right\|^2 \\ &\quad + a_{\text{offs}} n^2 \bar{\beta}^2 + b_{\text{offs}} n \bar{\beta} \\ &= \bar{\beta} F_i^{(t-1)} + \frac{\gamma \bar{\beta} (q_i^{(t-1)})^2}{2} \left(1 - \frac{(\lambda n\gamma + \|\mathbf{x}_i\|^2) \bar{\beta}}{\lambda\gamma} \right) \\ &\geq \bar{\beta} F_i^{(t-1)} + \frac{\gamma \bar{\beta} (q_i^{(t-1)})^2}{2} \left(1 - \frac{(\lambda n\gamma + R^2) \bar{\beta}}{\lambda\gamma} \right) = \bar{\beta} F_i^{(t-1)} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

が成り立つ。ここで、3 番目の不等式は補助定理 2 より得られた。 t 回目の反復で $i \in [n]$ を選択するためのランダム性に関する期待値をとると、以下が得られる。

$$\begin{aligned} h_D^{(t-1)} - \mathbb{E}[h_D^{(t)}] &\geq \frac{\bar{\beta}}{n} \sum_{i=1}^n F_i^{(t-1)} \\ &\geq \bar{\beta} \cdot (h_P^{(t-1)} + h_D^{(t-1)}) \geq \bar{\beta} \cdot \max\{h_P^{(t-1)}, h_D^{(t-1)}\} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

ここで、2 番目の不等式は補助定理 3 より成り立つ。これは、以前の反復におけるランダム性に関して、期待される目的誤差の下限を導く：

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[h_P^{(t)}] &\leq \bar{\beta}^{-1} \mathbb{E}[h_D^{(t)} - h_D^{(t+1)}] \leq \bar{\beta}^{-1} \mathbb{E}[h_D^{(t)}] \\ &\leq \bar{\beta}^{-1} \mathbb{E}[h_D^{(t-1)}] (1 - \bar{\beta}) \\ &\leq \bar{\beta}^{-1} h_D^{(0)} \cdot (1 - \bar{\beta})^t \leq \bar{\beta}^{-1} h_D^{(0)} \exp(-\bar{\beta}t). \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

よって、任意の $\epsilon_P > 0$ に対して、 $\mathbb{E}[h_P^{(t)}] \leq \bar{\beta}^{-1} h_D^{(0)} \exp(-\bar{\beta}t) \leq \epsilon_P$ が成り立つとき、以下を得る。

$$t \geq \frac{1}{\bar{\beta}} \log \left(\frac{h_D^{(0)}}{\epsilon_P \bar{\beta}} \right). \quad (\text{A.13})$$

q.e.d. of 定理 1

SABM：大規模言語モデルに基づくエージェントベース実世界シミュレーション

呉 増青^{†,††} 彭 潤^{†††} 韓 颯^{††††} 鄭 舒元[†] 肖 川^{†,††††}

[†] 大阪大学情報科学研究科 〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-5

^{††} 京都大学情報科学研究科 〒 606-8501 京都市左京区吉田本町 36-1

^{†††} ミシガン大学コンピューターサイエンス工学部 2260 Hayward Street, Ann Arbor, MI 48109, USA

^{††††} フォードダム大学ガベリビジネススクール 140 W 62nd St, New York, NY 10023, USA

^{†††††} 名古屋大学情報科学研究科 〒 464-8601 名古屋市千種区不老町

E-mail: [†]wuzengqing@outlook.com, ^{††}troihn@umich.edu, ^{†††}xhan44@fordham.edu,

^{††††}zheng@ist.osaka-u.ac.jp, ^{†††††}chuanx@nagoya-u.jp

あらまし エージェントベースのモデリング (ABM) は、コンピュータシミュレーションの分野において特に影響力のあるアプローチである。それは、個々のエージェント間の相互作用を利用して複雑なシステムダイナミクスをシミュレートするものである。本研究では、従来の ABM 方法が非定型的な行動パターン、主観的判断、常識、コミュニケーションのシミュレーションにおいて不足している問題に対処し、新たなスマート ABM フレームワーク (SABM) を構築した。このフレームワークでは、大規模言語モデルに基づくエージェントを使用して、エージェント間の相互作用をより現実的に設定し、実際の現象を模倣し解釈することができる。また、SABM に基づくケーススタディを提示し、現実世界のシステムモデリングにおけるこのシミュレーション方法の有効性を示すとともに、複雑なシステムをより深く理解する上でのその潜在的な可能性について議論する。

キーワード エージェントベースのモデリング, 大規模言語モデル, 実世界シミュレーション

1 はじめに

コンピュータシミュレーションの出現は、様々な分野における問題解決へのアプローチを革新的に変革し、複雑なシステムを理解するための強力なツールを提供した。シミュレーション手法の中でも、エージェントベースモデリング (ABM) は、単純なルールによって特定された個々のエージェントの相互作用を通じて複雑なシステムをモデル化する独自の能力により、特に有力なツールとして登場している [5]。このボトムアップ構築アプローチにより、ABM はこれらの相互作用から生じる複雑な現象を観察し理解することを研究者に可能にし、理論やモデルの開発を促進する。ABM は多様な分野での応用が見られ、疫学における病気の蔓延モデル [24]、経済学における市場ダイナミクスのシミュレーション [26]、生態学における生態系の振る舞い理解 [16] など、これらの分野における複雑なシステムの理解を進展させる上で重要な役割を果たしてきた。これらの研究は、ABM が取り組む問題の幅広さを示し、コンピュータシミュレーションの領域におけるその重要性を強調している。

エージェントベースモデリング (ABM) は、複雑なシステムのシミュレーションにおいて強力なツールであるが、その限界も存在する。例えば、自然言語の記述や常識を含む高度な人間行動のモデリングにおいて、これらを形式言語で表現することは困難であり、ABM 手法ではこれらの自然言語要素を無視するか、発見則や学習規則によって簡略化することが一般的で

ある。これらの行動の高い複雑さのため、このようなモデリングはしばしば過度の単純化をもたらし、その特性の一部のみを捉えるに留まり、その精度を制限し、実世界のシナリオへの関連性を低減する [5]。さらに、ABM 手法はエージェントの行動を定義するために予め決定されたパラメータに大きく依存する。このアプローチは特定のシナリオでは効果的だが、パラメータ設定が適切に校正されていない場合には、研究者の偏見やモデル出力の高い不確実性を引き起こす可能性がある [16]。

このような限界に対処するために、生成的事前学習トランスフォーマー (GPT) などの大規模言語モデル (LLM) の出現が新たな可能性を提供している。自然言語の処理と生成が可能な LLM は、前述の高度な人間行動を模倣するために使用できる。プロンプトエンジニアリング [28] を LLM 上で行うことにより、研究者は自然言語でモデルを設計し、エージェントの行動を定義するためのパラメータ選択において労力を軽減できる。さらに、LLM は強力な推論能力を持っており [3]、これを活用することでモデルの解釈可能性を向上させることができる。LLM を ABM に組み込むことにより、研究者は定められた規則に従うだけでなく、手作りの例 [6] や推論指示 [17] から学習することにより意思決定を行うエージェントを作成することができる。これによりシミュレーションのリアリズムが高まり、システムの振る舞いを駆動するメカニズムに関するより深い洞察が得られる。LLM の学習能力を活用することで、コンピュータシミュレーションはシステムの変化に対してより適応的となり、より堅牢なシミュレーションが可能となる。LLM はさま

ざまな役割を模倣することもでき [25]、実世界のシステムで見られるエージェント行動の多様性を捉える。したがって、LLM を ABM に組み込むことは、シミュレーションにおける ABM 手法のパフォーマンスを向上させる可能性を秘めている。

本論文の主要な目的は、エージェントベースのアプローチの能力を向上させ、理論、仮説、説明を自然言語に基づくコンピュータシミュレーションの枠組みで構築することである。本論文では、実世界のシステムをモデル化するために、特に大規模言語モデル (LLM) を活用する最新の AI モデルの力を利用した革新的なエージェントベースのアプローチである **スマートエージェントベースモデリング (SABM)** のモデリングフレームワークを提案し、この枠組みに基づくコンピュータシミュレーションの方法論的構築を紹介する。

スマートエージェントの概念は、将来の組織の文脈において、Carley によって提案された [9]。[9] において、スマートエージェントは、知的で、適応的で、計算可能な実体として定義され、人間は典型的なスマートエージェントである。現代の AI モデル、特に LLM の出現により、人間の行動を模倣する驚異的な言語能力と推論能力を備えたこれらのモデルを用いて、ABM の領域におけるスマートエージェントの概念を拡張する。我々は、LLM によって駆動されるこれらのスマートエージェントが、より繊細で現実的な方法で現実世界の問題をシミュレートすることにより、複雑なシステムの理解を深めることができると考えている。

2 関連研究

2.1 ABM が対象とする問題の本質

現在、複雑なシステムをシミュレートするために、さまざまな発展した方法が使用されている。これらの方法には、マイクロシミュレーション、システムダイナミクス、ABM が含まれる。マイクロシミュレーションは、実際のサンプルから全体的な予想状況を予測する方法であり、個々のデータが利用可能な状況で特に有用である。これは個々の特性と転移確率の数に基づいて統計結果を提供するが、主な限界はエージェント間の相互作用を考慮していないことである [13, pp. 13, 58]。一方、システムダイナミクスは、マクロスケールの変数セットに焦点を当てた方法である。これは多重フィードバックループを含む大規模システムを扱うことができ、システムの変数の時間経過による動的な因果関係を捉えることができる [2]。しかし、システムダイナミクスではシステム全体が唯一のエージェントとしてシミュレートされるため、マイクロレベルからのモデル対象の違いを区別することが難しく、個々の行動や適応性を実行することが困難である [13, pp. 28-30]。ABM は、システムの挙動が個々のエージェントの相互作用から生じる状況で特に有用である。しかし、現実と一致するエージェントと相互作用を確立することの難しさも抱えている。これらのアプローチの比較は表 1 に示されている。これらの方法はそれぞれ適用範囲を持ち、複雑なシステムの研究において互いに補完し合っている。一般的に言えば、個々の間の動的で複雑な相互作用がシステム全体

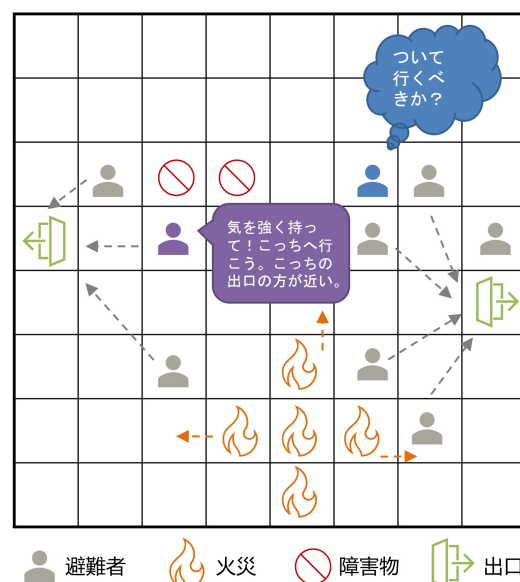


図 1 ABM ではモデル化が困難な要素を含む火災避難シミュレーション。

のパフォーマンスにどのように影響するかを理解したい場合、ABM を使用することが良い選択である [11]。

2.2 現在の ABM 手法の欠点

ABM は理論上、上記の特性を持つ問題を扱うことが可能であるが、従来のモデルや計算能力の制約により、実際の運用においては依然として限界が存在する。議論は、以下の例から始める。

例として、図 1 は、避難者の行動をモデル化することに焦点を当てた火災避難のシミュレーションを示している。避難中の情報共有の実世界のダイナミクスを捉えるために、エージェント間のコミュニケーションをシミュレーションに含める。一部のエージェントは自然に情報の伝達者となり、近くのエージェントに自然言語のメッセージを伝える。これらのエージェントは、メッセージおよび出口までの距離や混雑のレベルなどの他の要因に基づいて、これらのメッセージの提案に従うかどうかを決定する。コミュニケーション内容のシミュレーションプロセスは自然言語生成を要求し、膨大な数のアクション（すなわち、すべての可能なメッセージを出力として）を生み出す。一方、コミュニケーションを考慮に入れたフォロワーの意思決定をシミュレートするためには、自然言語理解が必要であり、膨大な数の状態（すなわち、すべての可能なメッセージを入力として）を処理する必要がある。これらの複雑さは、意思決定ルールと学習アルゴリズムに依存する現在の ABM 方法の限界を超えている。

上記の例は行動科学のシナリオを強調しているが、同様の状況は他の分野でも見られる。たとえば、独立した市場プレイヤーが共謀して利益を増やすカルテルの場合を考えてみよう。現在の市場競争のシミュレーション研究は、人間のボランティ

表 1 複雑なシステムを研究するためのシミュレーション方法の比較.			
シミュレーション方法	研究スケール	個体行動	システム状態
マイクロシミュレーション	ミクロ	単純 (統計)	静的
システムダイナミクス	マクロ	なし (システムレベルの行動)	動的
ABM	ミクロ	複雑	動的

アに依存する [1] か、暗黙の共謀に焦点を当てて、企業間のコミュニケーションを迂回する [8]。これらの例では、自然言語と常識に基づいてコミュニケーションをシミュレートすることが、問題のモデリングと理解に不可欠である。リアルな状況におけるコミュニケーションの範囲が特定の範囲に限定されていないため、これらのエージェント間のコミュニケーションの影響をその行動に単純にマッピングすることはできない。ABM アプローチは特定のタスクのために事前学習された言語モデルを使用することがあるが [31]、言語はエージェントの入出力の一部としてほとんど使用されない。ABM の限界により、これらの複雑な行動を含む問題をモデル化することは困難である。

3 提案手法

ABM のシミュレーションにおける基本的な側面は、その個々の構成要素であるエージェント、環境、相互作用、そしてこれらの要素を特徴づけるパラメータとデータから成る [19]。シミュレーションの品質と関連性は、これらの要素の正確な表現に大きく依存しており、モデルの全体的なパフォーマンスに影響を与える。関連研究で要約された制約を踏まえ、これらの制約に対処し、コンピュータシミュレーションの適用範囲を拡大する方法が求められている。自然言語理解と人間行動の模倣において優れた能力を持つ LLM [7] を利用することにより、ABM の構成要素に LLM を統合することが改善のための潜在的な道である。我々は、LLM を使用し、その構成要素を自然言語で定式化することにより、ABM からモデリングアプローチを拡張するスマートエージェントベースモデリング (SABM) を提案する。この新しいモデリングアプローチの名前には、Carley によって定義された、知的で、適応的で、計算可能な実体としてのスマートエージェント [9] という用語を借用している。これらの特性は、LLM を活用することにより新しいモデリングアプローチが具備するものである。

図 2 は、SABM の特徴を示し、それを ABM の特徴と比較している。続く議論では、言語能力、モデリングパラダイム、適応性、解釈可能性などの観点から SABM の特徴を探索する。これらの側面を分析することにより、SABM がコンピュータシミュレーションにもたらす可能性のある改善と、SABM の潜在的な適用範囲を判断することを目指す。

3.1 エージェントに自然言語能力を持たせることの再考察

SABM は、自然言語を入力と出力の両方で取り扱うことができるエージェントを生み出し、より繊細でリアリスティックなシミュレーションを実現し、その適用範囲を拡大する。自然言語を取り扱う効果は、モデリングと理解能力の観点から説明されるであろう。

3.1.1 自然言語におけるモデリング

LLM を核として、エージェントは自然言語を入力と出力の両方で処理する能力を持つ。エージェントの属性を定義するために経験則や数学的な公式に依存する代わりに、自然言語で与えられたテキスト記述が主要な参照となる。

例：アリの行動のモデリング ゴードンは ABM を利用してアリの行動をモデル化した [14]。この研究では、個々のアリの行動は、観察されたアリの行動を反映するように設計・微調整された数学的ルールに基づいてモデル化された。

数学的アプローチとは対照的に、SABM はアリの決定プロセスに関する質的な記述に基づいてアリの行動をモデル化する可能性を提示する。研究者はアリがどのようにして採餌場所を決定し、仲間のアリと食糧源の場所をどのように伝達し、環境の変化にどのように適応するかについての自然言語の記述を提供することができる。これらの自然言語の記述は、数学的表現よりも直感的に理解しやすく、アリの行動をモデル化するためのアクセスしやすい方法を提供する。また、LLM はこれらの自然言語の記述を利用して、モデル内のアリエージェントに適切な行動を生成することができる。たとえば、モデルはアリが他のアリが食糧を見つけた場所でより多く採餌する可能性が高いことを示すかもしれない。この情報は、シミュレーション内のアリエージェントの行動を指示するために利用される。

さらに、ルールを表現するためのパラメータの使用を避けるこのアプローチは、シミュレーション実験の再現性と比較可能性にも寄与する：同じタイプの背景を持つ研究問題に対して、同様のプロンプトを使って背景設定を記述し、その上に問題固有の要素を追加することができる。

3.1.2 複雑な行動のモデリング

ABM から自然言語を省略することは、形式言語で表現するのが難しい記述を正確にモデル化し、自然言語が重要なシステムをシミュレートする際に情報交換の詳細を失うことを意味する [21], [22]。LLM が自然言語入力を理解し、文脈に関連した一貫性のある出力を作成する能力を活用することにより、SABM はこの問題に対する解決策を提供する。

例：公衆衛生 公衆衛生の分野を考えると、ABM は病気の蔓延を予測し、さまざまな介入の影響を評価するために利用されている。マーシャルらは、複雑なシステムアプローチを使用して高リスク集団における HIV 伝播をモデル化し、統合予防介入の潜在的な集団的利益について貴重な洞察を得た [20]。このようなモデルでは、エージェントは個々の行動や相互作用が定められたルールに基づいている個人を表す。しかし、通信や意思決定プロセスなど、人間の行動の複雑さやニュアンスを取り込むことにしばしば苦労している。これらは通常、自然言語で説明される。

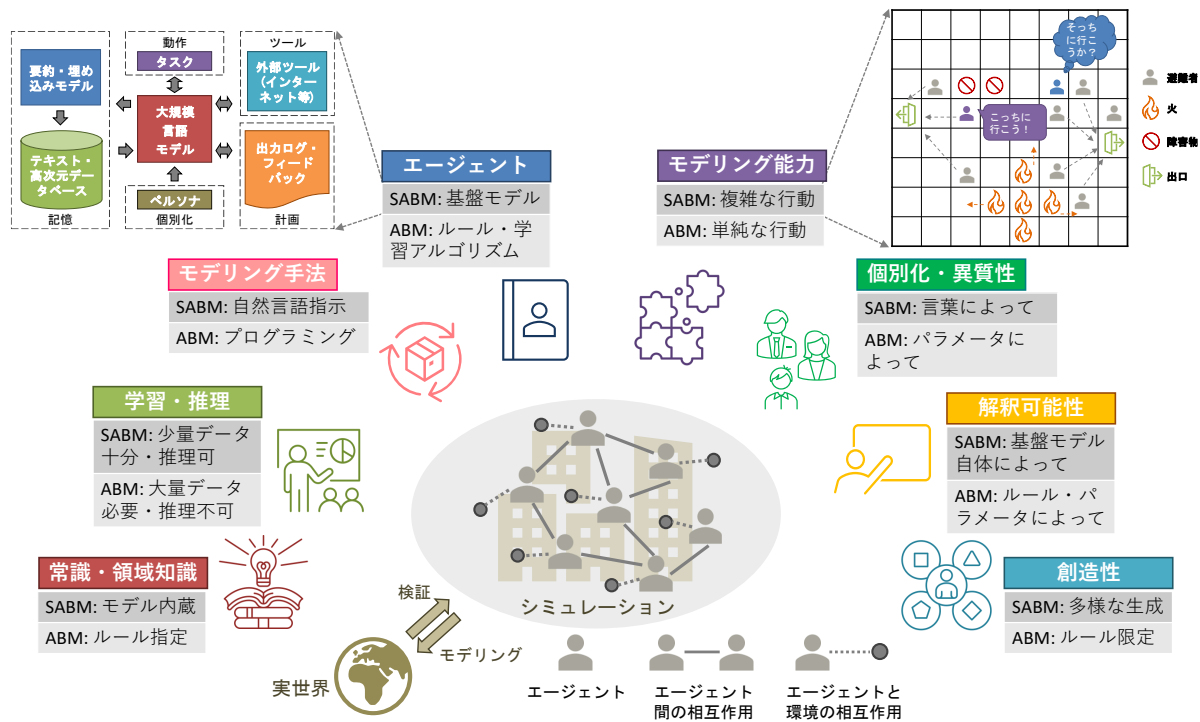


図2 SABMとABMの特徴の比較。

SABMは、エージェントが自然言語による指示（LLMの文脈では**プロンプト**と呼ぶ）を処理することを可能にする。エージェントは自然言語で記述された複雑な振る舞いや相互作用をシミュレートできる。例えば、エージェントは自身の健康状態について議論したり、疾病予防情報を共有したり、これらの議論に基づいて検査や治療を求める決定をすることができる。これにより、コミュニティ内での情報伝播とその行動への影響をよりリアルにシミュレートすることが可能となる。

3.2 事前モデリングのためのアラインメント

多くのLLMは、人間の価値観と知識とのアラインメントを目指し、RLHFを用いて微調整されている[23]。これにより、モデルのパフォーマンスが向上するだけでなく、その反応の倫理的・道徳的なアラインメントも増すことが期待される[12], [18]。これはSABMにとって特に有益であり、人間の相互作用により近いシミュレーションを可能にし、シミュレーション結果の精度を高める。

Carleyの定義によれば、人間は典型的な賢明なエージェントであるが[9]、GPT-4や他のLLMは、少なくとも短い会話においては多くの人を欺くことができ、おそらくチューリングテストに合格するとされている[4]。評価によると、GPT-3.5/4は感情認識[10]、数学、コーディングなどの面で人間と同等かそれ以上のパフォーマンスを発揮するという。LLMがこれらの能力を持ち、人間の価値観や行動とアラインメントされていることから、SABM内で事前モデリングパラダイムを採用することが可能となる。逆に、ABMでは、行動規則やパラメータが観察された人間の行動から導き出されたり推測されたりする事後モデリングパラダイムを採用する。

これら二つのパラダイムの違いを明確にするために、消費者行動の領域を考える。ABMでは、研究者は実際の消費パターンを調査し、それを数学的表現や公式に落とし込むことで、消費者が商品やサービスを選ぶ際の細かなニュアンスを表現する。しかし、実際には、個人の購買決定は、必要性、個人的好み、認識された価値を評価するといったより本能的な推論や常識によって支配されていることが多い。SABMの枠組み内では、このような消費行動を、人間とアラインメントされたLLMの本能的な常識から出発点として模倣することができる。これにより、そのような行動を包括するための規則やパラメータが不要となる。さらに、LLMは少数例から学習することができるため、行動を人間のデータにさらに調整することが可能である。

人間の価値観と知識とのアラインメントのおかげで、SABMは事前モデリングの地平を広げる。事前モデリングは従来、実データに依存しない形式科学や理論研究（例えば、初等セルオートマトン[29, pp. 23–50]）に限定されていた。さらに、SABMでは、モデルを二つのコンポーネントに分けることができる。「エンジン」はLLMによって表され、「シャーシ」はモデルの残りの部分を包括する。AI研究者がエンジンの強化に取り組むことで、事前モデリングの基盤（上記の仮定）を固めると同時に、SABMを使用する人々はシャーシの作成に集中し、特定の取り組みに最も適したエンジンを使用することができる。この実践はモデリングの難易度を大幅に低減し、研究者が迅速にモデリングのメタワーズンを見つけるのに役立つ[16]。より高度なLLMが利用可能になった場合、研究者はエンジンを交換するだけでパフォーマンスを向上させることができる。一方、ABMでは、人間の行動を模倣するエージェントのパフォーマンス向上とシミュレーションモデルの構築が密接に結びついており、

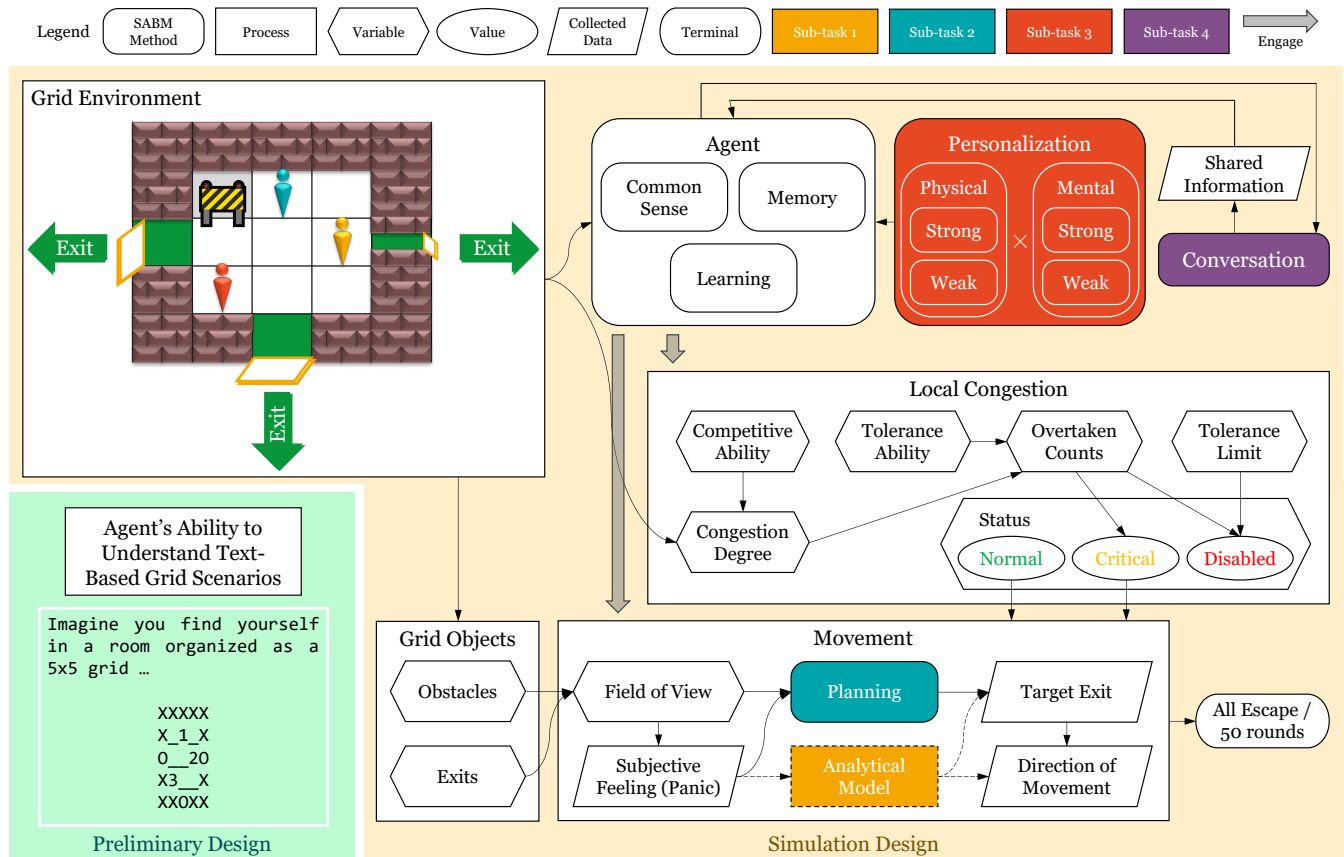


図 3 緊急避難のモデル設計。

研究者はこれらの両方の手続きを管理する必要がある、それは必然的により多くの専門知識とモデリング努力を要求する。

3.2.1 共通認識

先に議論されたように、LLM の注目すべき特徴の一つは、共通認識推論能力である [32]。この能力は、幅広いトピックや日常知識を含む広範かつ多様な訓練データから派生する。共通認識推論は、SABM におけるモデル設定を単純化し、複雑な構成の必要性を減少させることができる。例えば、エージェントはこの特性を利用して、環境を理解し、他のエージェントと相互作用し、文脈に基づいて行動を適応させることができる。これらの能力を明示的にプログラムする必要はない。

3.2.2 内蔵知識

ABM はしばしば、エージェントに明示的にコーディングされたドメイン知識によって制約され、その行動の深さと多様性が限定される。これに対して、SABM は、多様なインターネットテキストによる訓練を受けた LLM の持つ広大なドメイン知識のリソースにアクセスすることが可能である。LLM に内在するドメイン知識は、SABM を単純化し豊かにし、潜在的な応用の範囲を広げ、これらのシミュレーションの複雑なシステム理解への有用性を高める大きな機会を提供する。

3.2.3 個人化

人間とのアラインメントにより生じる SABM の重要な特徴は、エージェントの個人化である [25], [27]。つまり、エージェントは、シミュレートされるシナリオに関連する異なる特性、例えば異なる性格やスタイルを持つように個人化することがで

きる。この異質性は、シミュレーション内の現実感を高め、モデルの忠実度を向上させる。

例：歩行者の避難 このような応用の一例として、ABM を使用した歩行者避難シミュレーションがある [30]。この研究では、個人化された空間認識道路ネットワーク (PSCRN) モデルが導入されている。PSCRN モデルは、各歩行者が空間認識に基づいて特定の避難経路を認識する確率が異なるという仮定に基づいている。この個人化は統計的確率に基づいており、理論的およびシミュレーション的に健全であるが、個々の経験や特性を完全に包括することはできないかもしれない。これは元の研究の限界ではないが、LLM はシミュレーションと方法論をさらに発展させる可能性がある。

SABM は、エージェントの特徴付けに自然言語をツールとして利用することで、個人化の度合いを高めることができる。各エージェントは、知識、経験、視点を反映した特有の言語入力を用いて個人化される。例えば、歩行者避難シミュレーションでは、エージェントに環境に関する多様な知識を割り当てることができる。これは、彼らの個人的な経験や特性を反映している。高齢者を表すエージェントは、異なる知識を持ち、動きが遅い可能性がある一方で、若いアスリートを象徴するエージェントとは区別される。このような個人化の度合いにより、より現実的で微妙なシミュレーションが可能となる。重要なことに、複雑なパラメータ設定を回避し、自然言語の手がかりを用いてエージェントの個人化プロセスを単純化することができる。

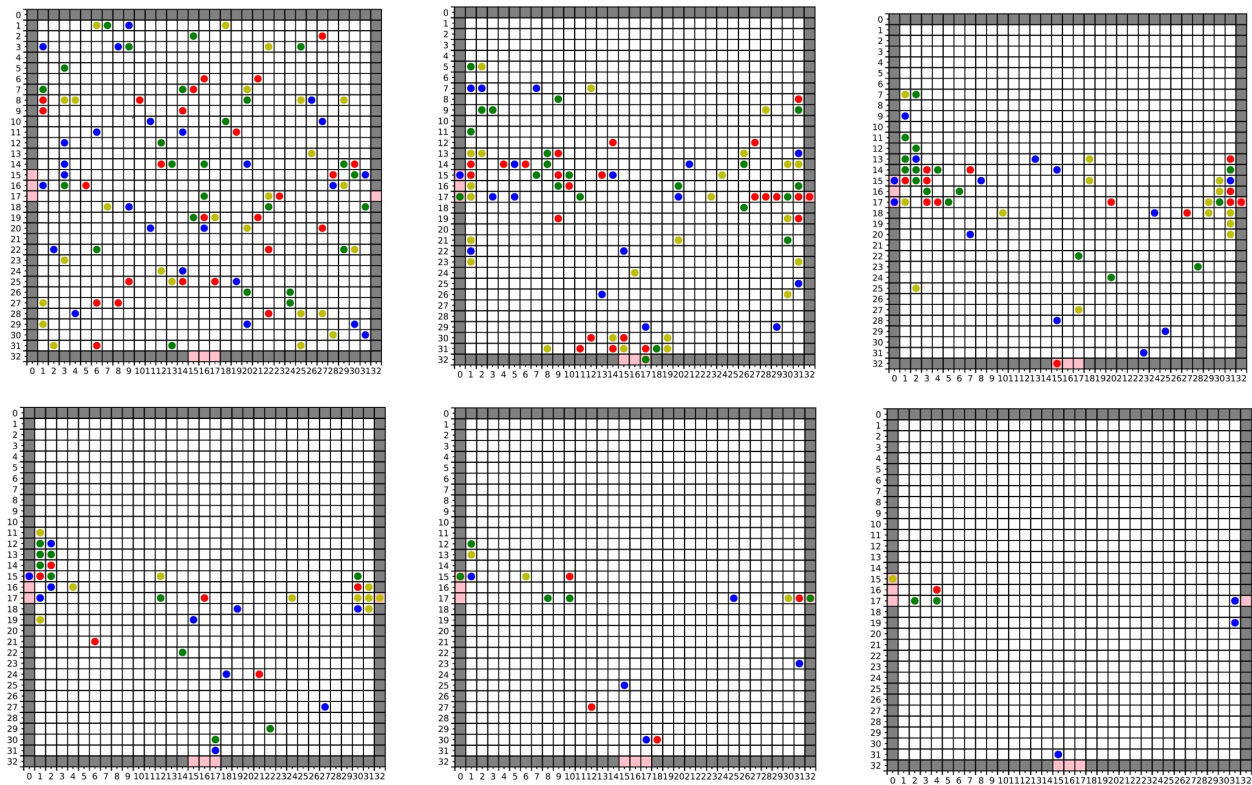


図4 緊急避難の実行スナップショット。

3.3 より適応的で解釈可能な相互作用

静的で規定されたルールとパラメータを持つ ABM は、動的で複雑なシステムを正確に表現するために必要な柔軟性と適応性を欠いている。ABM に LLM を導入することで、硬直的なルールベースの相互作用から脱却し、よりダイナミックで適応的なエージェント間の相互作用を可能にする。

3.3.1 学習と推論

LLM の固有の学習と推論能力は、少ないデータサンプル [6] やデータサンプルがない場合でも [17]、様々なタスクを効果的に行うことがすでに証明されている。SABM では、この学習と推論能力により、事前のトレーニングプロセスや学習アルゴリズムの必要性を回避する。その代わりに、現実 に密接に模倣する適応的な学習の側面を導入し、実世界のシステムのダイナミックな性質を捉えることがしばしば困難な規定されたルールからの重要な進歩を示している。

3.3.2 モデルの解釈可能性

LLM によるエージェントの解釈能力とテキスト生成能力を組み合わせることで、SABM の解釈可能性を向上させる独自の機会を提供する。ABM におけるエージェント間の相互作用では、エージェントの行動の背後にある動機がしばしば曖昧である。これらの行動を複雑なパラメータやルールの複雑な網から解き明かすことは困難な作業であり、モデルのダイナミクスを包括的に理解することを妨げることがある。一方で、LLM の解釈的な性質を活用することにより、エージェントの行動や相互作用をより直感的で人間に理解しやすい表現で抽出すること

ができる。規定されたルールに従って相互作用するのではなく、エージェントは自分の「意図」や「感情」を自分のパフォーマンスと他のエージェントとの相互作用に基づいて解釈し、それに応じて行動を調整することができる。これは、意味が文字通りの言語自体ではなく、言語的手がかりの解釈からしばしば導かれる人間のコミュニケーションの解釈的な性質を反映している [15]。この文脈では、エージェント相互作用の基礎となるテキスト自体が、シミュレーションを解釈する能力を持つ。

上記の SABM の特徴についての議論から、SABM は実際の状況の複雑さ、常識、適応性、およびその他の特性を再現するためのより広い適用範囲を持ち、問題解決に適切なリアリズムのレベルを保証し、ABM よりも優れた解釈可能性を持つことが期待できる。モデル化されたシステムのシミュレーション度の改善は、複雑でリアルなシミュレーション設定の説明能力を維持しながら、シミュレーション結果と現場調査結果とのギャップを狭めることができる。

4 実験

実験では、緊急避難の複雑なパターンをシミュレートするために、100～400 の異質なエージェントをモデル化する (図 3)。これらのエージェントはそれぞれ避難者を表し、共通感覚推論、記憶、学習、計画立案、会話などの方法を通じて複雑な行動をシミュレートする。モデルの設計には、ABM を用いた緊急避難のシミュレーションに関する研究を基盤とし、そのコンポーネントを SABM で段階的に置き換える。様々な人口密度のシ

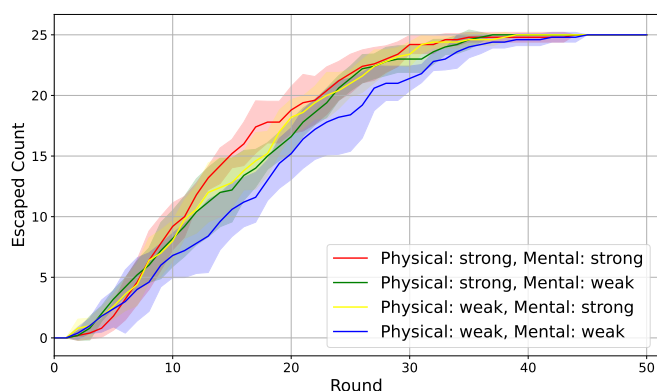


図 5 緊急避難の実行結果.

ナリオをシミュレートし、緊急避難のダイナミクスを検証する。主に、個々の特性（身体的な強さ、精神状態、位置関連要因）がエージェントの意思決定や動きにどのように影響するか、そして彼らが同僚の行動にどう反応するかを観察する。特に、混雑の存在がエージェントに元の計画された避難経路を放棄させ、より近い出口ではないかもしれないが混雑が少ない代替ルートを探すようにさせるかどうかに注目する。

この研究は、大規模言語モデルを用いたエージェントベースモデリングが、緊急避難シミュレーションのような複雑なシナリオを効果的にシミュレートするための有望なアプローチであることを示唆している（図 4、図 5）。今後の研究では、さらに多様な状況下でのモデルの適用性と精度を評価する必要がある。

5 まとめと今後の課題

本論文では、GPT のような LLM を ABM に組み込むことで、SABM フレームワークを提案した。LLM が強化されたエージェントが、複雑な行動をモデル化し、実世界の状況をより本物らしく再現する方法について検討した。ABM の詳細なレビューを提供し、SABM の能力と方法論を説明し、SABM の方法論と実世界システムのエミュレーションにおけるその有用性を示すケーススタディを提供する。さらに、SABM の将来の方向性について概説し、その使用の広範な範囲を予見する。

LLM の統合を超えて、SABM は、自然言語でのモデリングを容易にし、ABM にはない 2 つの側面である事前モデリングパラダイムを採用することで、ABM とは区別される。行動の複雑さを測定するための基礎理論を提唱し、これにより SABM を ABM とさらに対比させるのに役立つ。また、LLM が人間の行動をどの程度模倣できるか、および SABM の適用範囲の境界を定義する上でも助けとなる。技術的な観点からは、より進んだプロンプトエンジニアリングが適用され、シミュレーションの性能を向上させる可能性がある。

6 謝 辞

本研究の一部は、JSPS 科研費 JP22H03903, JP23H03406, JP23K17456, JP21K19767, JP22KJ1721, JST CREST JP-MJCR22M2 の助成を受けたものである。ここに記して謝意を

表す。本研究を遂行するにあたり、資金面および設備面での支援をくださった鬼塚真先生および佐々木勇和先生に感謝する。

文 献

- [1] Maximilian Andres, Lisa Bruttel, and Jana Friedrichsen. How communication makes the difference between a cartel and tacit collusion: A machine learning approach. *European Economic Review*, 152:104331, 2023.
- [2] Ahmad Taher Azar. System dynamics as a useful technique for complex systems. *International Journal of Industrial and Systems Engineering*, 10(4):377–410, 2012.
- [3] Jacob Bayless. It's not just statistics: GPT-4 does reason. <https://jbconsulting.substack.com/p/its-not-just-statistics-gpt-4-does>, 2023.
- [4] Celeste Biever. ChatGPT broke the turing test-the race is on for new ways to assess AI. *Nature*, 619(7971):686–689, 2023.
- [5] Eric Bonabeau. Agent-based modeling: Methods and techniques for simulating human systems. *Proceedings of the national academy of sciences*, 99(suppl.3):7280–7287, 2002.
- [6] Tom Brown, Benjamin Mann, Nick Ryder, Melanie Subbiah, Jared D Kaplan, Prafulla Dhariwal, Arvind Neelakantan, Pranav Shyam, Girish Sastry, Amanda Askell, et al. Language models are few-shot learners. *Advances in neural information processing systems*, 33:1877–1901, 2020.
- [7] Sébastien Bubeck, Varun Chandrasekaran, Ronen Eldan, Johannes Gehrke, Eric Horvitz, Ece Kamar, Peter Lee, Yin Tat Lee, Yuanzhi Li, Scott Lundberg, et al. Sparks of artificial general intelligence: Early experiments with GPT-4. *arXiv preprint arXiv:2303.12712*, 2023.
- [8] Emilio Calvano, Giacomo Calzolari, Vincenzo Denicolo, and Sergio Pastorello. Artificial intelligence, algorithmic pricing, and collusion. *American Economic Review*, 110(10):3267–3297, 2020.
- [9] Kathleen M Carley. Smart agents and organizations of the future. *The handbook of new media*, 12:206–220, 2002.
- [10] Zohar Elyoseph, Dorit Hadar-Shoval, Kfir Asraf, and Maya Lvovsky. ChatGPT outperforms humans in emotional awareness evaluations. *Frontiers in Psychology*, 14:1199058, 2023.
- [11] Joël Foramitti. Agentpy: A package for agent-based modeling in python. *Journal of Open Source Software*, 6(62):3065, 2021.
- [12] Deep Ganguli, Amanda Askell, Nicholas Schiefer, Thomas Liao, Kamilė Lukošiuūtė, Anna Chen, Anna Goldie, Azalia Mirhoseini, Catherine Olsson, Danny Hernandez, et al. The capacity for moral self-correction in large language models. *arXiv preprint arXiv:2302.07459*, 2023.
- [13] Nigel Gilbert and Klaus Troitzsch. *Simulation for the social scientist*. McGraw-Hill Education (UK), 2005.
- [14] Deborah M Gordon. Ant encounters. In *Ant Encounters*. Princeton University Press, 2010.
- [15] Herbert P Grice. Logic and conversation. In *Speech acts*, pages 41–58. Brill, 1975.
- [16] Volker Grimm, Eloy Revilla, Uta Berger, Florian Jeltsch, Wolf M Mooij, Steven F Railsback, Hans-Hermann Thulke, Jacob Weiner, Thorsten Wiegand, and Donald L DeAngelis. Pattern-oriented modeling of agent-based complex systems: lessons from ecology. *Science*, 310(5750):987–991, 2005.
- [17] Takeshi Kojima, Shixiang Shane Gu, Machel Reid, Yutaka Matsuo, and Yusuke Iwasawa. Large language models are zero-shot reasoners. *arXiv preprint arXiv:2205.11916*, 2022.
- [18] Gabrielle Kaili-May Liu. Perspectives on the social impacts of reinforcement learning with human feedback. *arXiv preprint arXiv:2303.02891*, 2023.

- [19] Charles M Macal and Michael J North. Tutorial on agent-based modeling and simulation. In *Proceedings of the Winter Simulation Conference, 2005.*, pages 14–pp. IEEE, 2005.
- [20] Brandon DL Marshall, Magdalena M Paczkowski, Lars Seemann, Barbara Tempalski, Enrique R Pouget, Sandro Galea, and Samuel R Friedman. A complex systems approach to evaluate hiv prevention in metropolitan areas: preliminary implications for combination intervention strategies. 2012.
- [21] Birgit Müller, Stefano Balbi, Carsten M Buchmann, Luís De Sousa, Gunnar Dressler, Jürgen Groeneveld, Christian J Klassert, Quang Bao Le, James DA Millington, Henning Nolzen, et al. Standardised and transparent model descriptions for agent-based models: Current status and prospects. *Environmental Modelling & Software*, 55:156–163, 2014.
- [22] Mark E Nissen and Raymond E Levitt. Agent-based modeling of knowledge dynamics. *Knowledge Management Research & Practice*, 2(3):169–183, 2004.
- [23] Long Ouyang, Jeffrey Wu, Xu Jiang, Diogo Almeida, Carroll Wainwright, Pamela Mishkin, Chong Zhang, Sandhini Agarwal, Katarina Slama, Alex Ray, et al. Training language models to follow instructions with human feedback. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 35:27730–27744, 2022.
- [24] Liliana Perez and Suzana Dragicevic. An agent-based approach for modeling dynamics of contagious disease spread. *International journal of health geographics*, 8(1):1–17, 2009.
- [25] Leonard Salewski, Stephan Alaniz, Isabel Rio-Torto, Eric Schulz, and Zeynep Akata. In-context impersonation reveals large language models’ strengths and biases. *arXiv preprint arXiv:2305.14930*, 2023.
- [26] Leigh Tesfatsion. Agent-based computational economics: Growing economies from the bottom up. *Artificial life*, 8(1):55–82, 2002.
- [27] Zhenhailong Wang, Shaoguang Mao, Wenshan Wu, Tao Ge, Furu Wei, and Heng Ji. Unleashing cognitive synergy in large language models: A task-solving agent through multi-persona self-collaboration. *arXiv preprint arXiv:2307.05300*, 2023.
- [28] Lilian Weng. Prompt engineering. <https://lilianweng.github.io/posts/2023-03-15-prompt-engineering/>, 2023.
- [29] Stephen Wolfram et al. *A new kind of science*, volume 5. Wolfram media Champaign, IL, 2002.
- [30] Lei Wu and Hui Lin. A personalized spatial cognitive road network for agent-based modeling of pedestrian evacuation simulation: A case study in Hong Kong. *Annals of GIS*, 18(2):109–119, 2012.
- [31] Guangping Zhang, Dongsheng Li, Hansu Gu, Tun Lu, Li Shang, and Ning Gu. Simulating news recommendation ecosystem for fun and profit. *arXiv preprint arXiv:2305.14103*, 2023.
- [32] Wayne Xin Zhao, Kun Zhou, Junyi Li, Tianyi Tang, Xiaolei Wang, Yupeng Hou, Yingqian Min, Beichen Zhang, Junjie Zhang, Zican Dong, et al. A survey of large language models. *arXiv preprint arXiv:2303.18223*, 2023.