

動的最適化の挑戦

丸山 宏

我々は最適化問題の系列 $P_1, P_2, \dots, P_t, P_{t+1}, \dots$ を考える。この系列の上で、様々な問題設定を考えることができる (例えば、最適化問題 P_t の最適解がわかっている場合に P_{t+1} の解を効率よく求めるにはどうしたらよいか、など)。本稿では、このような最適化問題の系列上での問題設定を動的最適化と呼び、このような一般的な枠組みにおいてどのような応用があるか、いくつかの例を提示し、さらに人工知能分野の研究における位置付けを議論する。なお本論文は機械学習工学研究会 2024 年夏合宿にて既発表のものを若干修正して再投稿するものである。

1 はじめに

最適化問題は、人工知能の様々な場面で現れる。最短経路問題、制約充足問題などは最適化問題の 1 形態として捉えられるし、深層学習や生成モデルの訓練は、ロス関数を最小化する最適化問題として定式化される。

最適化問題を解く手法は、**数理計画法**とも呼ばれ、線形計画法が最もよく知られている。線形計画法は実行可能空間と目的関数がどちらも線形の式で与えられる問題設定だが、これを非線形 (ただし凸空間) に拡張した凸計画法、離散問題に適用できる**整数計画法**、連続変数と離散変数を同時に扱うことのできる**混合計画法**などが研究・開発されてきた。さらに、それらの手法を実問題に効率的に適用する商用ツールが普及することによって、20 世紀終わり頃には、最適化問題は一通りやり尽くされた感があった。

一方、2010 年代に入ってから、機械学習 (特に深層学習) の急速な発展に伴ってハイパーパラメータチューニングのために最適化の研究が再び脚光を浴びることになった。ただし、今までの最適化問題が、目的関数の形を事前に与えたのに対し、ハイパーパラ

メタの最適化は、個別の値 x が与えられて初めて、その目的関数の値 $u(x)$ が与えられる (例えば、実際にモデル訓練を行って、あるいは外部のオラクルによって)、という問題設定になる。これを**ブラックボックス最適化**と呼ぶ。ブラックボックス最適化は、必ずしも機械学習の発展から生まれたものではない。以前から、進化計算、実験計画法、多腕バンディッド問題など様々な最適化問題が知られていたが、これらは上記の定義に従えばブラックボックス最適化問題といえる。

ブラックボックス最適化は、目的関数 $u(x)$ が計算可能であればその形には制限がないので、最適化問題の利用範囲を飛躍的に広げた。しかし、そこでは目的関数が静的、すなわち $u(x)$ の計算を何回行っても同じ x に対しては同じ $u(x)$ が返されることが仮定されていた。

世の中の実問題には、目的関数が時と共に変化するものが数多くある。動的最適化を考える第 1 のモチベーションは、目的関数が静的であるという条件を外したときに、どのような最適化問題が考えられるか、を明らかにすることにある。

最適化問題は、実行可能空間が、網羅的に走査できるくらいのサイズであれば解くのは難しいことではない。実行可能空間のサイズはその次元数に対して指数関数的に増加するので、最適化問題をうまく解く

コツの1つは、「この範囲の外側には、最適解は存在しない(だろう)」という知識を使って、できるだけ探索空間を狭くすることである。しかし、そのことによって、本来欲しかったはずの解を見過ごしてはならない。動的最適化問題を考える第2のモチベーションは、ある1つの最適化問題を解いたときに、実行可能空間を拡大することによって、よりよい解が見つかることが期待できるとしたら、どのように行うべきか、を考えることにある。

2 動的最適化問題

我々は、ドメイン D 上で目的関数 $u(x)(x \in D)$ を最大化する最適化問題 $P = \langle D, u \rangle$ を考える。目的関数を最大化する x を $\hat{x} = \operatorname{argmax}_{x \in D} u(x)$, その時の目的関数の値を $\hat{u} = u(\hat{x})$ とする。最適化問題の列 $\tilde{P} = P_1, P_2, \dots, P_t, P_{t+1}, \dots$ があったとする。ただし、 $P_t = \langle D_t, u_t \rangle$ とする。

系列 \tilde{P} 内の、それぞれの P_t がお互いに全く独立であるならばこのような問題設定を考える必要がない。 P_t を個別に解く以外にはよい方策がないからである。そこで、動的最適化の枠組みの中で、研究課題を考えるには、系列 \tilde{P} 内がどのような構造を持つか、に注目する必要がある。系列 \tilde{P} に構造を導入することによって、どのようなサブ問題が考えられるか、そのうちのいくつかの例を以下に示す。

2.1 差分最適化

時刻 t の最適化問題 $P_t = \langle D_t, U_t \rangle$ についてその解 (\hat{x}_t, \hat{u}_t) がわかっているときに、 P_{t+1} を効率よく解くことができるか。

系列 \tilde{P} に構造を導入するやり方の1つとして単調性という概念を定義する。最適化問題の列 $\tilde{P} = \langle D_1, u_1 \rangle, \langle D_2, u_2 \rangle, \dots$ が単調であるとは、この列が以下の2つの条件を満たすもの、とする。

1. $D_t \subset D_{t+1}$
2. $u_{t+1}(x) = u_t(x)$ for $x \in D_t$

すなわち、実行可能空間は単調に増加し、今までの空間における目的関数の値は変化しない(安定)とする。

この条件のもとで、以下を示すことができる。

- $\hat{u}_{t+1} \geq \hat{u}_t$

- $\hat{x}_{t+1} \in D_t$ のとき、 $\hat{x}_{t+1} = \hat{x}_t$

つまり、最適化問題列 \tilde{P} が単調のときは、実行可能空間の拡張された部分だけを探索して、今までの最適解 \hat{u}_t と比較すれば良い。

例: 関東地方の最高峰は日光白根山 2578m である。関東・東北地方の最高峰はどこか。

この場合、関東 \subset 関東・東北であるから、東北地方の山々と日光白根山を比較するだけでよい。関東地方の他の山々は比較する必要がない。ドメインを東北まで広げても、関東の山々の高さは変わらないからである。

最短経路問題におけるダイクストラ法など、部分問題の最適解が、全体最適解の一部になるような動的計画法は、単調な動的最適化問題と位置づけることができる。

2.2 ドメイン拡張の最適化

ある最適化問題を解いたとき、最適解がドメインの境界付近にあるときなど、ドメインを拡張したらさらに良い解が見つかるかもしれない、と思うことがある。ドメインの拡張が許されるとき、どのようにドメインを拡張すればよりよい解が得られるだろうか。

最適化問題の単調な列 \tilde{P} があったとする。今が時刻 t だとして、時刻 $t+1$ のドメイン D_{t+1} をある集合 \mathcal{D} から自由に選べるとしたとき、どのような D_{t+1} を選べば \hat{u}_{t+1} を最大化できるだろうか、という問題として、ドメイン拡張の最適化問題を定式化できる。

ここで

- $dD \stackrel{\text{def}}{=} D_{t+\Delta t} - D_t$
- $d\hat{u} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{u}_{t+\Delta t} - \hat{u}_t$

とする。

単調な列 \tilde{P} が微分可能であるとは、 $\Delta t \rightarrow 0$ のとき、勾配 $\frac{d\hat{u}}{dD}$ が計算可能であることをいう。時刻 t での勾配がわかっているとき、時刻 $t+1$ での目的関数を最大化するためには、勾配が最大になる方向にドメイン D_{t+1} をとる、という戦略が考えられる。

例: 関東地方の最高峰は日光白根山 2578m である。隣接県を1つ追加して最高峰を最大にするには、どの県を追加すればよいか。

長野県を追加すれば、奥穂高岳 3190m になるが、

静岡県または山梨県を追加すれば富士山 3776m になる。したがって、静岡県または山梨県を追加するのが最適である。

関連する問題として、ドメイン拡張によって最適性の向上ではなく、解のロバスト性を向上させる、という設定もありうる。最適解に対する目的関数値 $\hat{u} = \hat{x}$ がドメインや目的関数の小さな擾乱に対して大きく動かないことをその解がロバストであるという。最適解のロバスト性を調べる手法を感度分析と呼び、機械学習を含む様々な領域で研究されている。

2.3 非連続点の検出

P_t と P_{t+1} の関係を調べるだけでなく、 \tilde{P} 全体の性質を調べる問題設定も考えられる。例えば、 \tilde{P} の中で、 \hat{x}_t が非連続に動く場合、そのような臨界点を事前に検出できるだろうか。

微分可能な最適化問題列 \tilde{P} があったとする。この場合、ドメイン D を連続に変化させれば \hat{u} は連続に変化するが、 \hat{x} はそうとも限らない。 $\hat{u}_{t+1} > \hat{u}_t$ ならば \hat{x}_{t+1} は、 D_t の外にあるので、 \hat{x}_t が D_t の内部点である場合には、 \hat{x}_t と \hat{x}_{t+1} は離れた点にあることになる。

複雑系のシステムで、あるパラメータを変化させていったときにシステムに非連続な変化が起きることを、事前に察知できるか、という問題については、Scheffer らによる興味深い論文[1]があり、システムが臨界点に近づくとき、システムの自己相関が大きくなるなど特有のシグナルが観測されることが示されている。動的最適化の文脈で、このような非連続点の検出ができるための条件は何か、などは大変興味深い問題と言えるだろう。

例: 関東地方の最高峰は日光白根山 2578m である。隣接地域を少しずつ追加する場合、白根山より高い地域が現れた瞬間に最高峰の位置 \hat{x} がジャンプして移動する。このようなジャンプは、探索している地点の標高が 2578m に近づくとき臨界点が近いことがわかる。

2.4 その他の問題設定

目的関数 u_t が時と共に変化する問題設定では、 u_t に様々な制約を置くことによって、様々なサブ問題を

作ることができる。また、ドメインの拡張においては、ドメインの次元を変化させる問題設定もあり (例えば、制約充足問題において新たな変数を導入する、など) 大変興味深い。動的最適化問題のタクソノミができれば、今後の研究が大いに進むだろう。

3 動的最適化の応用

3.1 材料探索・創薬

第一原理計算によるシミュレーションを、機械学習によるサロゲートモデルによって何桁も高速化する技術が発展してきていることにより、材料探索や創薬の世界で、今までに全く知られていない新しい材料や医薬が開発されることが期待されている。

しかし、いかに高速化されたとしても可能な原子の組み合わせ空間は膨大であり、やみくもな探索はいたずらに計算資源を浪費することになる。動的最適化の研究の進展によって、見込みのありそうな部分空間を探索し、その結果に基づいて最適なドメイン拡張を提案できる一般的な手法が確立されれば、材料探索や創薬の研究が飛躍的に進むことが可能かもしれない。

3.2 アルゴリズムの探索

テスト駆動開発や自動デバッグの文脈では、与えられたテストセットを満たすプログラムを自動生成する手法が研究されている。これも、可能な空間は膨大であるので、少しずつテストケースを加えて、既存の(それまでのテストケースを満たす)コードを修正していく、という手法がとられる。この場合、ドメイン D はプログラムコード全体の集合であり、 $u(x)$ がテストスイートに相当する。ある時点のテストスイート u_t を満たすプログラム \hat{x}_t が知られているときに、新たに加えられたテストケースを加えた u_{t+1} を満たす \hat{x}_{t+1} を見つけるにはどうしたらよいか、という意味で、動的最適化問題の 1 形態といえる。

3.3 科学法則の探索

科学の営みを AI で加速するにはどうしたらよいか、という議論が活発になされている。例えば、AI ファインマン [2] は、ファインマン物理学の方程式を機械による探索で再発見しようという試みであるが、

長さ・時間などの基本物理量が事前に与えられた空間の中を探索するため、今までの物理学の枠を超えた新たな発見を求めるには無理があった。動的最適化の研究が進めば、まだ知られていない基本物理量を仮定してみる、など、ドメインを拡張して新たな法則を発見する、などということが可能になるかもしれない。

3.4 政策の探索

政策は、それを実現する法体系が文書で表現されるのであれば、法律の可能空間をドメイン D とし、何を善とするか (例えば「最大多数の最大幸福」) に関する合意を目的関数 u とした最適化問題によって構築できるはずである。しかし、実際に法律が制定されたとして、その効果がどのように社会に現れるかを予測することが難しく、高度に技術的な政策決定以外にはほとんど用いられてこなかった。

大規模言語モデル (LLM) の登場によって、その条件は変化するかもしれない。すなわち、LLM は様々な人の価値観を内在していて、適切なプロンプト (例えば「あなたは 66 歳の男性で、…」のようなペルソナを指定する) を与えることで、そのような個別の価値観を引き出すことができる。これらのペルソナを使って新法令に対する人々の反応をシミュレートできれば、政策決定はブラックボックス最適化問題として定式化できる。この場合、人々の価値観は時と共に変化するので、価値観の変化を法令に反映させるためには動的最適化を行う必要がある。

4 関連領域

4.1 探索問題・制約充足問題

最短経路問題などの探索問題は、経路の集合をドメインとする最適化問題として定式化できる。また、3SAT 問題などの制約充足問題は、目的関数として制約を満たせば 1、そうでなければ 0 とする最適化問題と考えることができる。制約充足問題の 1 つのバリエーションとして、制約に重みを付け、満たしている制約の重みの合計を最大化する問題があり、このような場合に制約を動的に出し入れする動的制約充足問題があり、これは動的最適化の 1 形態といえる。

また、共通の部分問題の最適解を 1 回だけ計算す

ることによって探索を効率化する動的計画法は、部分問題の列を動的最適化問題と見做すこともできる。2 章で議論したような動的最適化問題のテクニックが、既存の動的計画法に新たな知見をもたらすかもしれない。

4.2 ブラックボックス最適化

1 章で、機械学習におけるハイパーパラメタのチューニングが、ブラックボックス最適化に新たな光を与えたことを述べたが、ブラックボックス最適化のアイデア自体は、古くから知られている。典型的には進化計算であるが、それ以外にも、直交表を用いる実験計画法や工場における品質管理に用いられるタグチメソッド、マーケティングに使われるコンジョイント分析は、いずれも 2 変数間の不明な従属性が目的関数に与える影響を最短のステップで見つけ出して全体を最適化する手法であり、ブラックボックス最適化の範疇である。また、多腕バンディット問題や、オンライン予測問題、ベイズ最適化、強化学習も、探索をしながら目的関数の確率分布を推定することで最適化を行うという意味で、ブラックボックス最適化といえる。

4.3 制御理論

制御理論は目標に対する現状の差を最小化する問題を継続的に解いている、という意味で、本稿の動的最適化の枠組みの 1 例と考えられるものである。制御理論においては、通常ドメイン (入力変数の数や値の範囲) は変化しないものとして扱うが、一方で評価関数 $u()$ は、外界の擾乱などによって変化するものとして扱われる。また、入力変数に対してシステムの応答が遅れるために、システムの時間軸上での動的な挙動を目的関数に反映させる必要がある。

制御理論では、短い時間単位での振る舞いを線形と仮定することが多いが、ロボット等の制御で注目を浴びている深層強化学習では任意の多次元非線形モデルを扱えることで、より複雑でかつ各ステップで大きな変化が起きる系の制御を可能にした。

4.4 ゲーム理論

複数のエージェントが、それぞれの時刻で何等かの打ち手を実行するゲームにおいては、一方のエージェントから見ると、1手ごとに可能な打ち手の集合 D と、打ち手 x の評価関数 $u(x)$ が変化する動的最適化問題を解いている、と見ることもできる。ゲームによっては、特定の盤面の評価関数とその前後の文脈によって変化しないものがあり(例えばオセロのある盤面では、先手必勝か、後手必勝か、あるいは引き分けかが決まっている)、そのようなゲームにおいては、動的計画法で使われる、部分問題の計算を記憶しておくテクニックが使える。このように、様々な分野で研究されてきたテクニックを、動的最適化問題という枠組みで捉え直し、他の分野にも適用可能であるかどうかを考えるのも興味深い問いといえよう。

5 おわりに

初期の人工知能研究においては、真の知性は理性的・論理的思考にあるという考え方から、探索や最適化問題のアルゴリズムが盛んに研究された。その後、このようなアルゴリズム的な手法では、人間が子供でも簡単に行える画像認識や、言語の運用などが到底実現できないことがわかり、人工知能の冬が訪れた。近年、大規模言語モデルの発展によって、画像認識や言語運用が人間並み(ヒューマン・パリティ)に行え

ることがわかってきた。

今後、人間の知性を模倣する技術の開発が一段落すると、より高次の知性を求めて探索・最適化の技術が再発展するであろう。今までの探索・最適化の大きなボトルネックは、探索空間(ドメイン)が予め固定されて与えられていることにある。動的最適化は、ドメインを拡張できる枠組みなので、現状の最適化における問題に、1つの突破口を与えるものとして期待したい。

謝辞

本稿は、2024年2月に箱根強羅温泉で行われた機械学習工学研究会(MLSE)冬合宿での議論が元になったものである。特に、ドメインや目的関数の拡張を、最適化問題の列として定式化することは、今井健男氏の示唆によるところが大きい。議論に参加してくださった方々に感謝する。また、査読者のコメントは原稿を改善するのに大いに役立った。ここに感謝する。

参考文献

- [1] Scheffer, M., Bascompte, J., Brock, W. A., Brovkin, V., Carpenter, S. R., Dakos, V., Held, H., Van Nes, E. H., Rietkerk, M., and Sugihara, G.: Early-warning signals for critical transitions, *Nature*, Vol. 461, No. 7260(2009), pp. 53–59.
- [2] Udrescu, S.-M. and Tegmark, M.: AI Feynman: A physics-inspired method for symbolic regression, *Science Advances*, Vol. 6, No. 16(2020), pp. eaay2631.