

令和 5 年 4 月 12 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K03744

研究課題名（和文）マルチレベルモンテカルロ法の応用による確率的最適化の新展開

研究課題名（英文）Novel development in stochastic optimization using multilevel Monte Carlo methods

研究代表者

合田 隆（Goda, Takashi）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・准教授

研究者番号：50733648

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：入れ子型期待値と呼ばれる量がパラメータに依存する状況において、その量を最大値あるいは最小化するという問題に取り組んだ。このような問題設定はベイズ実験計画法だけでなく、機械学習を含む多様な科学技術分野に現れる。本研究は、特に目的関数（入れ子型期待値）の勾配に対する不偏推定量を構成することによって、確率的勾配降下法の適用範囲を拡大することを目標に取り組んだ。具体的な成果としては、マルチレベルモンテカルロ法と呼ばれる方法を適切に乱択化することによって、勾配の（有限な分散を持つ）不偏推定量を構成できることを理論的に示し、数値実験を通じて応用上における有効性を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

既存のアプローチとしては、入れ子になっている期待値のそれぞれをモンテカルロ法で近似するという方法が取られてきたが、どんなにサンプル数を増やしても不偏性を持たないことから、確率的最適化において正しい値に収束しないという問題点があった。本研究成果によってこの問題を解決し、より広いクラス的最適化問題に対して、確率的最適化が理論的にも実験的にも適切に最適解を探索できることになった点に学術的意義がある。また、様々な科学技術分野への応用が考えられるため、具体的な応用を通じて研究成果の社会的意義を見出すことが出来る。

研究成果の概要（英文）：This research addressed the problem of maximizing or minimizing a quantity called nested expectation, which depends on some parameters. Such problem settings arise not only in optimizing Bayesian experimental designs but also in various scientific fields including machine learning. The aim of this research was to expand the applicability of stochastic gradient descent by constructing unbiased estimators for the gradient of the objective function, i.e., parametrized nested expectation. Specifically, we theoretically demonstrated that an unbiased gradient estimator with finite variance can be constructed by appropriately randomizing a multilevel Monte Carlo method, and we revealed the effectiveness of our novel approach through numerical experiments in various practical applications.

研究分野：数値解析

キーワード：モンテカルロ法 マルチレベルモンテカルロ法 確率的最適化 確率的勾配降下法 入れ子型期待値
ベイズ実験計画法

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

確率的最適化とはパラメータを含む期待値を最小化あるいは最大化するための数値計算法であり、古典的には Robbins and Monro (1951) によるアルゴリズムが有名であるが、その汎用化や収束性改善を目的とした理論的研究から実応用に至るまで、機械学習分野を中心として近年急速な発展を遂げてきた。特に、Kingma and Ba (2014) によって提案されたアルゴリズム Adam (adaptive moment estimation) はニューラルネットワークのミニバッチ学習において標準的に用いられており、現在もその亜種が提案、議論されている。

しかし、これらのアルゴリズムはいずれも、期待値の(パラメータについての)勾配に対する不偏推定量を構成できることが陰に仮定されている。したがって、不偏推定量の構成が必ずしも容易ではない状況においては、推定量が持つバイアスの存在によって、理論的解析が極めて困難になるだけでなく、数値的にも正しい最適解に収束しないという問題が生じる。

2. 研究の目的

上記の背景を受けて、本研究では「バイアスを 0 には出来ないが、大きさを制御できる」程度の仮定の上で、勾配の不偏推定量を構成するためのアプローチを確立することを目的とした。ここでの仮定の意図としては、「計算コストを増大させることによって、バイアスが小さくなるような推定量ができる」あるいは「計算コストが小さい場合には、推定量には大きなバイアスがかかっている」という自然な状況を考えている。したがって、「推定量の列」があり、インデックスの増加とともに計算コストも増大するが、バイアスは減少していくものとした。

このような仮定を満たす具体的な状況としては、目的関数が「ある確率変数の関数の期待値」であるときに、

- 関数自体は計算できないが、その近似列がある場合(近似精度が低いものから高いもの)
 - 確率変数が別の確率変数に関する条件付き期待値から定まる場合
- が挙げられる。特に後者のような状況はベイズ実験計画法における目的関数(期待情報獲得量)に現れ、一般に入れ子型期待値(nested expectation)と呼ばれる量の最適化問題に帰着される。ここで、条件付き期待値が正確に計算できない場合、それをモンテカルロ法によって近似すると、用いるサンプル数の多さに応じて「バイアスを 0 には出来ないが、大きさを制御できる」という状況が再現される。本研究では、特に「パラメータを含む入れ子型期待値の最適化問題」に焦点を当てて、勾配の不偏推定について考究した。

3. 研究の方法

入れ子型期待値そのものを効率的に推定するための方法として、マルチレベルモンテカルロ法(Giles, 2008)と呼ばれるアルゴリズムがこれまでに研究されてきた(例えば、Giles and Goda, 2019; Goda, Hironaka and Iwamoto, 2020)。確率的最適化においては、「各ステップにおける勾配の推定を高精度に行う」ことによって決定的な勾配降下法に近づける必要はなく、「各ステップでは勾配は粗く推定するが、繰り返し計算によって徐々に最適解を近づけていく」だけで上手く行くところが重要である。このとき、推定量にバイアスがあると、繰り返し計算の向かう先がずれることになる。したがって、本研究では(入れ子型期待値推定で注力されてきた)高精度の推定よりも、推定量に対する不偏性の保証が優先されるべきであると考え、Rhee and Glynn (2015) によって提案されたマルチレベルモンテカルロ法の乱択化(RMLMC: randomized multilevel Monte Carlo methods)を採用した。

また、入れ子型期待値が特殊な形で与えられる場合には、必ずしも RMLMC を用いなくても不偏推定量を構成できることを見つけたため、それについても研究の対象に含めた。

4. 研究成果

ベイズ実験計画法の最適化に対する成果

まず、初年度(2020年度)は具体的な問題設定に対して取り組むことによって、RMLMC の適用可能性と汎用性を明らかにすることを目標とした。その題材として、先述のベイズ実験計画法の最適化問題を考えた。これは入れ子型期待値で与えられる期待情報獲得量が最大となるような実験計画を探索する問題である。実験計画を表すパラメータに関する期待情報獲得量の勾配もやはり入れ子型期待値の形で与えられることを示し、RMLMC による不偏推定量を構成した。この際、当時オックスフォード大学の博士課程学生であった Adam Foster 氏との共同研究によって、機械学習分野でよく用いられる reparameterization trick という技法を使うことによって、異なる形の勾配とそれに対応した不偏推定量の導出に成功した。さらに、その推定量の分散が有限になるための十分条件を数理的に明らかにした。大

学院生の協力を得て、この勾配不偏推定量を実装し、テストケースおよび薬物動態モデルへの数値実験を行った。詳細は略すが、テストケースに対する結果を図 1 に示す。横軸は最適化の各ステップまでに要した計算コスト、縦軸は真の最適解からのユークリッド距離の二乗であり、それぞれ底を 10 とする対数を取っている。既存手法である通常のモンテカルロ法を用いた場合、入れ子型期待値において内側の期待値推定に用いるサンプル数 (図中の M) の大小によって収束先が異なること、特に M が小さい場合には初期値からほとんど動かないままであることが分かる。一方で、RMLMC を用いた勾配推定では、各ステップで不偏性が保証されているため、最適解からの距離が 0 になる方向に向かって”正しく”最適化計算が実行されていることが確認できる。同様に、より複雑な薬物動態モデルに対しても、RMLMC を用いた優位性を示すことができた。これらの成果をまとめた論文が 2021 年度に SIAM Journal on Scientific Computing に受理された (Goda, Hironaka, Kitade and Foster, 2022)。

また、類似の問題設定が変分ベイズあるいは変分オートエンコーダにおける周辺尤度推定にも現れることを見つけ、機械学習分野の査読付き国際会議で発表した (Ishikawa and Goda, 2021)。

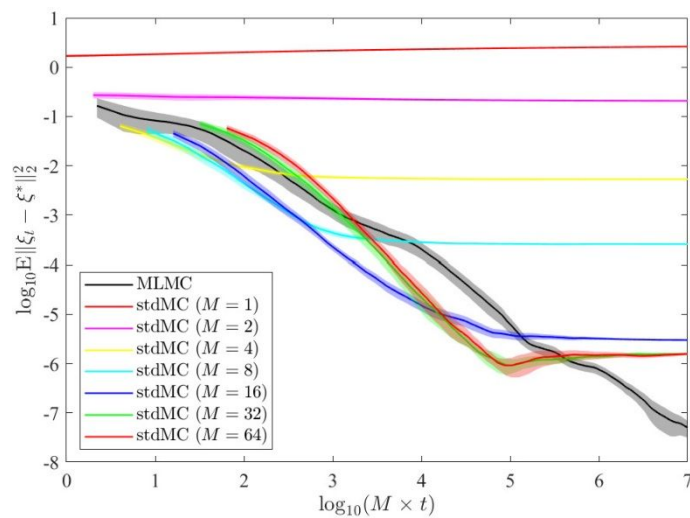


図 1: ベイズ実験計画最適化に関するテストケースに対する数値解の収束の様子

より一般の入れ子型期待値最適化に対する成果

この成果を受けて、RMLMC による勾配不偏推定をより広いクラスに展開できないかを 2021 年度・2022 年度にかけて考究した。結論として、より一般の入れ子型期待値最適化に対して、RMLMC を用いた勾配の不偏推定量が構成可能であること、適切な仮定のもとで有限な分散を持つことを示すことができた。では具体的な問題設定に限定して理論的解析を行ったため、ある点においては の理論的結果の方が強い仮定が必要となり、必ずしも の結果が の結果を包含することとはならなかった。一方で、入れ子型期待値が (期待情報獲得量とは異なる) 特殊な形をしている場合に、別の方法によっても勾配を不偏推定できることを見出し、大学院生の協力を得て、これらのアルゴリズムを全て実装し、機械学習分野における操作変数法を模した問題に対して適用を試みた。と同様に、RMLMC を用いた勾配の不偏推定によって適切に最適解が探索できるようになることを確認し、その有効性を検証した。これらの成果をまとめた論文は Mathematics and Computers in Simulation に受理された (Goda and Kitade, 2023)

関連するモンテカルロ法に関する成果

以上の研究成果を生み出す背景にあるモンテカルロ法そのものについても期間全体に亘って広く研究を行った。特に高次元領域上の数値積分を行うための、準モンテカルロ法と呼ばれるモンテカルロ法からの脱乱択化や積分誤差の次元への依存性について様々な観点から研究を進め、複数の論文を執筆・発表した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Takashi Goda, Wataru Kitade	4. 巻 204
2. 論文標題 Constructing unbiased gradient estimators with finite variance for conditional stochastic optimization	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Mathematics and Computers in Simulation	6. 最初と最後の頁 743 ~ 763
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.matcom.2022.09.012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Takashi Goda, Pierre L'Ecuyer	4. 巻 44
2. 論文標題 Construction-Free Median Quasi-Monte Carlo Rules for Function Spaces with Unspecified Smoothness and General Weights	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Scientific Computing	6. 最初と最後の頁 A2765 ~ A2788
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/22M1473625	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Josef Dick, Takashi Goda, Kosuke Suzuki	4. 巻 91
2. 論文標題 Component-by-component construction of randomized rank-1 lattice rules achieving almost the optimal randomized error rate	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Mathematics of Computation	6. 最初と最後の頁 2771-2801
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1090/mcom/3769	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Takashi Goda	4. 巻 72
2. 論文標題 A note on concatenation of quasi-Monte Carlo and plain Monte Carlo rules in high dimensions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Complexity	6. 最初と最後の頁 101647 ~ 101647
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jco.2022.101647	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Goda, Kosuke Suzuki	4. 巻 76
2. 論文標題 Improved bounds on the gain coefficients for digital nets in prime power base	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Complexity	6. 最初と最後の頁 101722 ~ 101722
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jco.2022.101722	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tomohiko Hironaka, Takashi Goda	4. 巻 421
2. 論文標題 An efficient estimation of nested expectations without conditional sampling	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Computational and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 114811 ~ 114811
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cam.2022.114811	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Goda	4. 巻 -
2. 論文標題 Polynomial tractability for integration in an unweighted function space with absolutely convergent Fourier series	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of the American Mathematical Society	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1090/proc/16444	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Goda, Tomohiko Hironaka, Wataru Kitade, Adam Foster	4. 巻 44
2. 論文標題 Unbiased MLMC Stochastic Gradient-Based Optimization of Bayesian Experimental Designs	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Scientific Computing	6. 最初と最後の頁 A286 ~ A311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/20M1338848	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Takashi Goda, Yuki Yamada	4. 巻 11
2. 論文標題 Probabilistic threshold analysis by pairwise stochastic approximation for decision-making under uncertainty	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 19671 ~ 19671
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-99089-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Goda	4. 巻 213
2. 論文標題 A simple algorithm for global sensitivity analysis with Shapley effects	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Reliability Engineering & System Safety	6. 最初と最後の頁 107702 ~ 107702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.j.res.2021.107702	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Josef Dick, Takashi Goda, Hiroya Murata	4. 巻 31
2. 論文標題 Toeplitz Monte Carlo	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Statistics and Computing	6. 最初と最後の頁 1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11222-020-09987-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計5件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Takashi Goda
2. 発表標題 Construction-free median lattice rules
3. 学会等名 15th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takashi Goda
2. 発表標題 Multilevel Monte Carlo methods for estimating the expected value of information
3. 学会等名 SIAM Conference on Uncertainty Quantification (UQ22) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kei Ishikawa, Takashi Goda
2. 発表標題 Efficient debiased evidence estimation by multilevel Monte Carlo sampling
3. 学会等名 Thirty-Seventh Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takashi Goda
2. 発表標題 Multilevel Monte Carlo methods for efficient nested simulations
3. 学会等名 Satellite Bayesian/Monte Carlo workshop on Statistical modeling for stochastic processes and related fields (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Tomohiko Hironaka, Takashi Goda
2. 発表標題 Two applications of multilevel Monte Carlo methods to Bayesian experimental designs
3. 学会等名 14th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing (MCQMC 2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
オーストラリア	University of New South Wales			
カナダ	University of Montreal			
英国	University of Oxford			