

分布的ロバスト最適化におけるパラメータの選択

後藤 順哉¹

¹ 中央大学 理工学部 経営システム工学科 *
(*2021年4月からビジネスデータサイエンス学科に名称変更)

2021年2月5日

NTT データ数理システム
アカデミックカンファレンス

Virtual

アウトライン

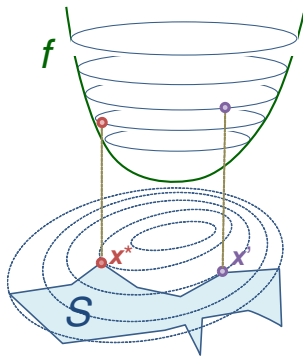
- ① 数理最適化とソルバー
- ② 分布的ロバスト最適化 (DRO)
- ③ データ駆動型の DRO

数理最適化（数理計画）

$$\begin{array}{lll} \min_{\mathbf{x}} & f(\mathbf{x}) & \dots \text{目的} \\ \text{subject to} & \mathbf{x} \in S & \dots \text{条件} \end{array}$$

ただし

- f は $\mathbf{x} := (x_1, \dots, x_d)$ を引数とする関数
- S は変数 (x_1, \dots, x_d) の制限を表す集合



- 最大化は $-f$ の最小化

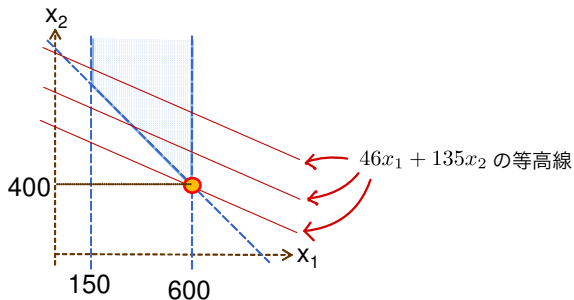
定式化の例) 発電計画問題

某電力会社では石炭, 石油各 1 基の発電機を保有している.
需要を満たし, 発電コストが最小になるよう発電量 [MWh] を決めたい

決めたいもの : x_1 : 石炭による発電量, x_2 : 石油による発電量

定式化 :

\min_{x_1, x_2}	$46x_1 + 135x_2$	← 発電コスト
sub.to	$x_1 + x_2 \geq 1000,$	← 需要量
	$150 \leq x_1 \leq 600$	← 石炭の発電上下限
	$0 \leq x_2$	← 石油の発電上下限



数理最適化（数理計画）ソルバー

- Numerical Optimizer ... LP, MILP, SDP, NLP, meta-heuristics, etc.
- Gurobi ... LP, SOCP, MILP, MISOCP
- IBM CPLEX ... LP, SOCP, MILP, MISOCP, CP, etc.
- FICO Xpress-MP ... LP, SOCP, MILP, MISOCP, NLP, MINLP, CP, etc.

...

-
- MATLAB Optimization Toolbox ... LP, MIP, QP, NLP, etc.
 - Excel ソルバー ... LP (simplex), NLP, GA, etc.

...

-
- SCIP ... LP, SOCP, MILP, MISOCP
 - LPSolve ... LP, MIP
 - GLPK ... LP, MIP

...

ソルバーを使うには数式を用いた定式化が大切

$$\begin{array}{ll} \max_{x_A, x_B} & 18x_A + 11x_B \\ \text{sub.to} & x_A + x_B \leq 40, \\ & 2x_A \leq 50, \\ & x_B \leq 25, \\ & x_A, x_B \geq 0 \end{array}$$

∴ 多くのモデリング言語では直接的に定式化を与える

SIMPLE (NTT データ数理システム)

```
Variable xA, xB;  
Objective f(type=maximize);  
f=18*xA+11*xB;  
xA+xB<=40;  
2*xA<=50;  
xB<=25;  
xA>=0;  
xB>=0;
```

LPSolve (フリー)

```
max: 18 xA+11 xB;  
xA+xB <= 40;  
2 xA <= 50;  
xB <= 25;
```

OPL (IBM ILOG)

```
dvar float+ xA;  
dvar float+ xB;  
maximize 18*xA+11*xB;  
subject to {  
xA+xB<=40;  
2*xA<=50;  
xB<=25;  
}
```

① 数理最適化とソルバー

② 分布的ロバスト最適化 (DRO)

③ データ駆動型の DRO

動機

現実問題における最適化問題のパラメータの多くはデータ

[再掲] 発電計画の例

最小化	$46 x_1 + 135 x_2$	←コスト
x_1, x_2		
条件	$x_1 + x_2 \geq 1000$,	←需要量
	$150 \leq x_1 \leq 600$	←石炭の発電上下限
	$0 \leq x_2$	←石油の発電上下限

- 「最適化」は与えられたデータに対して「最適」（を目指す）
- データが（少しでも）変化する場合には最適性は保証できない
- 特に不確実性を含む場合には不確実性のモデルに対する理解（とその帰結に対する覚悟）が必要

Ben-Tal, Nemirovski (2000) による動機

- そういったデータの多くは“醜い (ugly)”

例 NETLIB の LP のテスト問題集の中の問題例 PILOT4 (1000 変数, 410 制約) の 372 番目の制約 :

$$\begin{aligned} a^\top x \equiv & -15.79081 x_{826} - 8.598819x_{827} - 1.88789x_{828} - 1.362417x_{829} \\ & - 1.526049x_{830} - 0.031883x_{849} - 28.725555x_{850} - 10.792065x_{851} \\ & - 0.19004x_{852} - 2.757176x_{853} - 12.290832x_{854} + 717.562256x_{855} \\ & - 0.057865x_{856} - 3.785417x_{857} - 78.30661x_{858} - 122.163055x_{859} \\ & - 6.46609x_{860} - 0.48371x_{861} - 0.615264x_{862} - 1.353783x_{863} \\ & - 84.644257x_{864} - 122.459045x_{865} - 43.15593x_{866} - 1.712592x_{870} \\ & - 0.401597x_{871} + x_{880} - 0.946049x_{898} - 0.946049x_{916} \\ \geq & b \equiv 23.387405 \end{aligned}$$

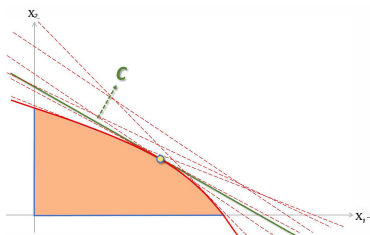
→ CPLEX による最適解の一部 :

$$\begin{aligned} x_{826}^* &= 255.6112787181108, & x_{827}^* &= 6240.488912232100, \\ x_{828}^* &= 3624.613324098961, & x_{829}^* &= 18.20205065283259, \\ x_{849}^* &= 174397.0389573037, & x_{870}^* &= 14250.00176680900, \\ x_{871}^* &= 25910.00731692178, & x_{880}^* &= 104958.3199274139 \end{aligned}$$

→ もし制約式の係数がそれぞれ 0.1% ずつずれると制約式の違反は右辺の 450% !

ロバスト最適化 (Soyster, '73)

$$\left| \begin{array}{l} \text{最大化} \quad c^T x \\ x \geq 0 \\ \text{条件} \quad \sum_{j=1}^d \underbrace{a_j}_{\text{推定値}} x_j \leq b \end{array} \right.$$



a_1, \dots, a_d は正しくないかもしれない \rightsquigarrow 最適解が現実には実行不可能かも

そこで $\delta|a_j|$ ぶれても実行可能なように条件を変更：

$$a_j \rightsquigarrow [a_j - \delta|a_j|, a_j + \delta|a_j|]$$

正定数

$$\sum_{j=1}^d \tilde{a}_j w_j \leq b, \quad \forall \tilde{a}_j \in [a_j - \delta|a_j|, a_j + \delta|a_j|]$$

期待値の最適化

$$\min_x \mathbb{E}_{\mathbb{P}}[f(\mathbf{x}, \mathbf{Y})]$$

- f : コスト関数
- \mathbf{x} : 決定変数 (ベクトル)
- \mathbf{Y} : 確率変数 (ベクトル)
- \mathbb{P} : 確率分布

【注】 $\min_x \mathbb{E}_{\mathbb{P}}[f(\mathbf{x}, \mathbf{Y})] = -\max_x \mathbb{E}_{\mathbb{P}}[-f(\mathbf{x}, \mathbf{Y})] \quad \rightsquigarrow -f : \text{報酬関数}$

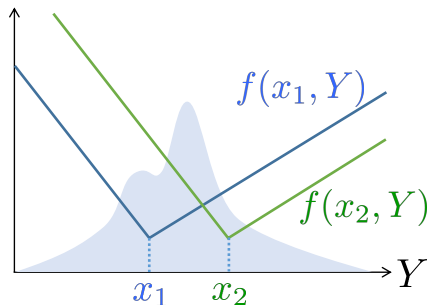
例) 新聞売り子問題

単価 c で仕入れ, 売れば r だけ, 売れなければ q だけ戻ってくる

$$f(x, Y) = cx - \underbrace{r \min\{x, Y\}}_{\text{売上}} - \underbrace{q \max\{x - Y, 0\}}_{\text{残余価値}} + \underbrace{s \max\{Y - x, 0\}}_{\text{機会費用}}$$

ただし $0 \leq q < c < r$, $s \geq 0$

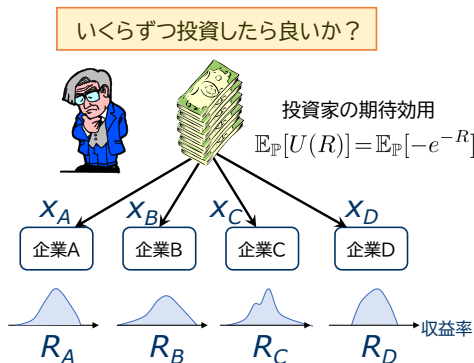
- f : 負の利益
- x : 仕入れ数 ($x \geq 0$)
- Y : 需要



例) ポートフォリオ選択問題

$$f(x, R) := \exp(-R^\top x)$$

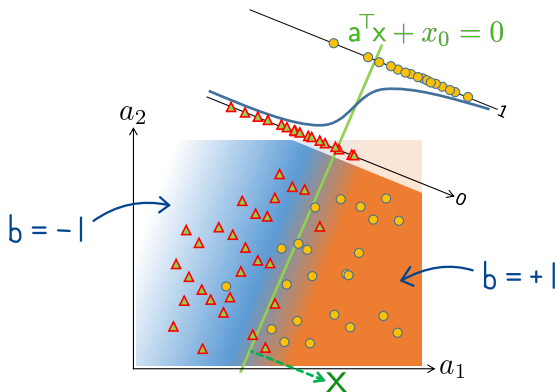
- f : 負の指数型効用
- $x \in \mathbb{R}^d$: ポートフォリオ (投資配分比率) ベクトル
 \leadsto 制約付き (e.g., $1^\top x = 1, x \geq 0$)
- $R \in \mathbb{R}^d$: 収益率



例) ロジスティック回帰

$$f((x, x_0), (b, a)) := \ln(1 + \exp(-b(x^\top a + x_0)))$$

- f : 負の対数尤度の 1 標本分
- $(x, x_0) \in \mathbb{R}^{d+1}$: 線形モデルの係数ベクトルと切片項
- $a \in \mathbb{R}^d, b \in \{\pm 1\}$: 線形モデルの説明変数とバイナリクラスラベル



標本平均近似 (SAA) から分布的ロバスト最適化へ

$$\min_x \mathbb{E}_{\mathbb{P}}[f(x, Y)]$$

しばしば $\mathbb{P} =$ 経験分布 \mathbb{P}_n で代用

確率	$\frac{1}{n}$	$\frac{1}{n}$	\dots	$\frac{1}{n}$
取りうる値	Y_1	Y_2	\dots	Y_n

標本平均近似 (Sample Average Approximation: SAA)

$$\min_x \left\{ \mathbb{E}_{\mathbb{P}_n}[f(x, Y)] := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x, Y_i) \right\}$$

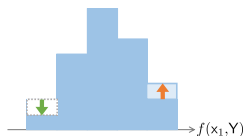
- しかし SAA (の解 $x_n(0)$) の事後性能は事前からの劣化が著しい可能性
- ∴ 経験分布 $\mathbb{P}_n \neq$ 真の確率モデル

標本平均近似 (SAA) から分布的ロバスト最適化へ

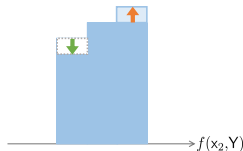
$$\min_x \mathbb{E}_{\mathbb{P}_n} [f(x, Y)]$$

最悪のケースを考えると？

$$\min_x \max_{Q \in \mathcal{Q}} \mathbb{E}_Q [f(x, Y)]$$



$x = x_1$ のときの f の分布



$x = x_2$ のときの f の分布

$\leadsto x_2$ の方が x_1 より好ましい

標本平均近似 (SAA) から分布的ロバスト最適化へ

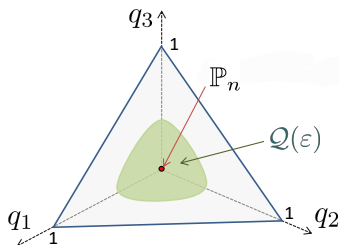
$$\min_x \mathbb{E}_{\mathbb{P}_n}[f(x, Y)]$$

分布的ロバスト最適化 (Distributionally Robust Optimization: DRO)

$$\min_x \max_{Q \in \mathcal{Q}} \mathbb{E}_Q[f(x, Y)]$$

- \mathcal{Q} : 不確実性集合 (凸集合に限定して OK)

$\leadsto \mathcal{Q} = \mathcal{Q}(\varepsilon)$: 大きさのパラメータ $\varepsilon \geq 0$ に依存 ; $\mathcal{Q}(0) = \{\mathbb{P}_n\}$



KL ダイバージェンスに基づく不確実性集合

Kullback-Leibler (KL) ダイバージェンスに基づく不確実性集合

$$\mathcal{Q}(\varepsilon) = \left\{ \mathbf{q} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{1}^\top \mathbf{q} = 1, \mathbf{q} \geq 0, \sum_{i=1}^n q_i \ln \frac{q_i}{p_i} \leq \varepsilon \right\}$$

このとき

$$\max_{\mathbf{Q} \in \mathcal{Q}} \mathbb{E}_{\mathbf{Q}}[f] = \begin{cases} \max_{\mathbf{q}} & \mathbf{f}^\top \mathbf{q} \\ \text{sub.to} & \sum_{i=1}^n q_i \ln \frac{q_i}{p_i} \leq \varepsilon, & \leftarrow \lambda \geq 0 \\ & \mathbf{1}^\top \mathbf{q} = 1, & \leftarrow \eta \\ & (q_i > 0, \quad i = 1, \dots, n) \end{cases}$$

双対性を使うと

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{Q} \in \mathcal{Q}} \mathbb{E}_{\mathbf{Q}}[f] &= \min_{\lambda > 0, \eta} \left\{ \varepsilon \lambda + \eta + \lambda \sum_{i=1}^n p_i \exp\left(\frac{f_i - \eta}{\lambda} - 1\right) \right\} \\ &\approx \mathbb{E}_{\mathbf{P}_n}[f] + \sqrt{2\varepsilon \mathbb{V}_{\mathbf{P}_n}[f]} + o(\sqrt{\varepsilon}) \end{aligned}$$

標準偏差

KL ダイバージェンスに基づく DRO

$$\min_x \max_{\mathbb{Q} \in \mathcal{Q}(\varepsilon)} \mathbb{E}_{\mathbb{Q}}[f(x, \mathbf{Y})] = \min_{x, \lambda > 0, \eta} \left\{ \varepsilon \lambda + \eta + \lambda \sum_{i=1}^n p_i \exp \left(\frac{f(x, \mathbf{Y}_i) - \eta}{\lambda} - 1 \right) \right\}$$

新聞売り子問題の DRO

$$\begin{aligned} \min_{\lambda > 0, \eta, x, f} \quad & \varepsilon \lambda + \eta + \lambda \sum_{i=1}^n p_i \exp \left(\frac{f_i - \eta}{\lambda} - 1 \right) \\ \text{sub.to} \quad & f_i \geq cx - rY_i, \quad f_i \geq (c - r)x, \quad i = 1, \dots, n, \\ & x \geq 0, \quad (\lambda > 0). \end{aligned}$$

ポートフォリオ選択問題の DRO

$$\begin{aligned} \min_{\lambda, \eta, \mathbf{x}} \quad & \varepsilon \lambda + \eta + \lambda \sum_{i=1}^n p_i \exp \left(\frac{\exp(-\mathbf{R}_i^\top \mathbf{x}) - \eta}{\lambda} - 1 \right) \\ \text{sub.to} \quad & \mathbf{1}^\top \mathbf{x} = 1, \quad \mathbf{x} \geq 0, \quad (\lambda > 0). \end{aligned}$$

ロジスティック回帰の DRO

$$\begin{aligned} \min_{\lambda, \eta, \mathbf{x}, x_0} \quad & \varepsilon \lambda + \eta + \lambda \exp \left(-\frac{\eta}{\lambda} - 1 \right) \sum_{i=1}^n p_i \left(1 + \exp \left(-b_i (\mathbf{a}_i^\top \mathbf{x} + x_0) \right) \right) \\ \text{sub.to} \quad & (\lambda > 0). \end{aligned}$$

RNUOPT 用コードで書くと (新聞売り子問題の DRO の例)

$$\begin{aligned} \min_{\lambda > 0, \eta, x, f} \quad & \varepsilon \lambda + \eta + \lambda \sum_{i=1}^n p_i \exp\left(\frac{f_i - \eta}{\lambda} - 1\right) \\ \text{sub.to} \quad & f_i \geq cx - rY_i, \quad f_i \geq (c - r)x, \quad (i = 1, \dots, n) \\ & x \geq 0, \quad (\lambda > 0) \end{aligned}$$

```
nvKL <- function(DmndData,r,c,eps) {  
  Sample <- Set()  
  t <- Element(set=Sample)  
  Dmnd <- Parameter(index=t,DmndData)  
  
  x <- Variable()  
  lambda <- Variable()  
  eta <- Variable()  
  loss <- Variable(index=t)  
  s <- Expression(index=t)  
  s[t] ~ (loss[t]-eta)/lambda - 1  
  
  drokl <- Objective(type=minimize)  
  drokl ~ eps*lambda + eta + lambda * (Sum(exp(s[t]),t))/length(DmndData)  
  
  loss[t] >= c*x-r*Dmnd[t]  
  loss[t] >= (c-r)*x  
  x >= 0  
  lambda >= 0  
}
```

① 数理最適化とソルバー

② 分散的ロバスト最適化 (DRO)

③ データ駆動型の DRO

パラメータ ε のチューニング

$$(\text{DRO}(\varepsilon)) \quad \min_{x, \lambda > 0, \eta} \left\{ \varepsilon \lambda + \eta + \lambda \sum_{i=1}^n p_i \exp \left(\frac{f(x, Y_i) - \eta}{\lambda} - 1 \right) \right\}$$

- $\varepsilon > 0$ を固定して $(\text{DRO}(\varepsilon))$ をソルバーに投げればその最適解 $x_n(\varepsilon)$ を得る
 - ではどの ε (の最適解) を用いるべきか?
 - 実現するコスト $\mathbb{E}_{\mathbb{P}}[f(x_n(\varepsilon), Y)]$ が小さくなるように?
 - そもそも真の分布 \mathbb{P} がわからない (手元にあるのは \mathbb{P}_n のみ)
- 再標本法で \mathbb{P} (or \mathbb{P}_n に対する感度) をシミュレートする

ブートストラップ法

確率	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	\rightsquigarrow	<table border="1"> <tbody> <tr> <td>Y_4</td> <td>Y_2</td> <td>Y_1</td> <td>Y_2</td> <td>$\rightsquigarrow x_4^{(1)}(\varepsilon)$</td> </tr> <tr> <td>$Y_1$</td> <td>$Y_4$</td> <td>$Y_4$</td> <td>$Y_2$</td> <td>$\rightsquigarrow x_4^{(2)}(\varepsilon)$</td> </tr> <tr> <td>$Y_2$</td> <td>$Y_3$</td> <td>$Y_1$</td> <td>$Y_1$</td> <td>$\rightsquigarrow x_4^{(3)}(\varepsilon)$</td> </tr> <tr> <td>$\vdots$</td> <td>$\vdots$</td> <td>$\vdots$</td> <td>$\vdots$</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Y_2</td> <td>Y_3</td> <td>Y_2</td> <td>Y_2</td> <td>$\rightsquigarrow x_4^{(B)}(\varepsilon)$</td> </tr> </tbody> </table>	Y_4	Y_2	Y_1	Y_2	$\rightsquigarrow x_4^{(1)}(\varepsilon)$	Y_1	Y_4	Y_4	Y_2	$\rightsquigarrow x_4^{(2)}(\varepsilon)$	Y_2	Y_3	Y_1	Y_1	$\rightsquigarrow x_4^{(3)}(\varepsilon)$	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots		Y_2	Y_3	Y_2	Y_2	$\rightsquigarrow x_4^{(B)}(\varepsilon)$
Y_4	Y_2	Y_1	Y_2	$\rightsquigarrow x_4^{(1)}(\varepsilon)$																											
Y_1	Y_4	Y_4	Y_2	$\rightsquigarrow x_4^{(2)}(\varepsilon)$																											
Y_2	Y_3	Y_1	Y_1	$\rightsquigarrow x_4^{(3)}(\varepsilon)$																											
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots																												
Y_2	Y_3	Y_2	Y_2	$\rightsquigarrow x_4^{(B)}(\varepsilon)$																											
取りうる値	Y_1	Y_2	Y_3	Y_4																											

これを ε の K 個の候補 $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_K$ について繰り返す $\rightsquigarrow K \times B$ 回の最適化計算

Rnupt でブートストラップ

$$\min_x \max_Q \left\{ \mathbb{E}_Q [f(x, Y)] - \frac{1}{\delta} \text{KL}(Q | \mathbb{P}_n) \right\}$$

$\epsilon \rightarrow \delta$

```
N<-nrow(xdata)

for (itr in 1:B) {
  bs.idx<-sample(1:N,N,replace=TRUE)
  x<-xdata[bs.idx,]
  y<-ydata[bs.idx]
  rownames(x) <- c(1:N)

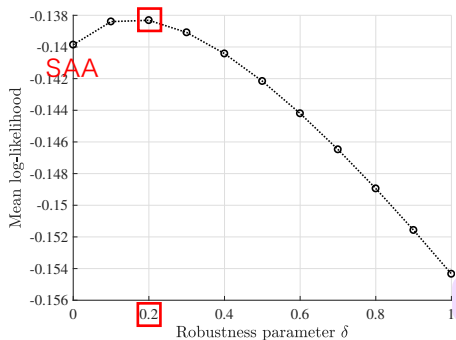
  for (delta in delta.set){

    sys<-System(rob_logreg,x,y,delta)
    sol<-solve(sys,trace=F)

    w0opt<-as.array(current(sys,w0))
    wopt<-as.array(current(sys,w))
    wopt<-wopt[names(xdata)]
  }
}
```

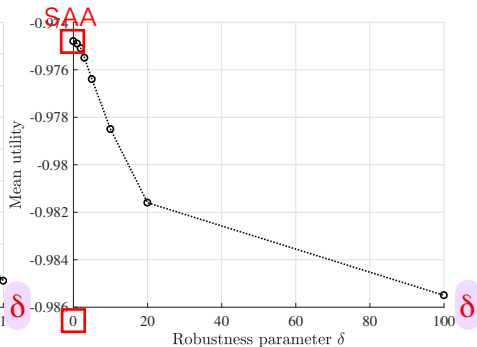
ブートストラップの平均に基づく δ の選択

対数尤度
= $-f$ の平均



(i) ロジスティック回帰の DRO の例

期待効用
= $-f$ の平均



(ii) ポートフォリオ選択の例

注意：縦軸が $-\mathbb{E}[f]$ ，つまり「大きいほど良い」になっています

DRO の事後パフォーマンスの分析 (Gotoh, Kim, Lim, 2021+)

$$x_n(\delta) := \arg \min_x \max_Q \left\{ \mathbb{E}_Q [f(x, Y)] - \frac{1}{\delta} \text{KL}(Q|\mathbb{P}_n) \right\}$$

$\approx \underbrace{\mathbb{E}_{\mathbb{P}_n} [f(x, Y)] + \frac{\delta}{2} \mathbb{V}_{\mathbb{P}_n} [f(x, Y)] + o(\delta)}_{\text{分散}}$

cf. $\min_x \max_Q \left\{ \mathbb{E}_Q [f(x, Y)] \mid \text{KL}(Q|\mathbb{P}_n) \leq \varepsilon \right\}$

$\approx \min_x \mathbb{E}_{\mathbb{P}_n} [f(x, Y)] + \sqrt{2\varepsilon} \sqrt{\mathbb{V}_{\mathbb{P}_n} [f(x, Y)]} + o(\sqrt{\varepsilon})$

標準偏差

事前の問題 (*In-sample problem*):

- $Y_1, \dots, Y_n \sim \mathbb{P}$: 独立に同一な分布 \mathbb{P} から得られた n 標本
- $$\rightsquigarrow \begin{cases} x_n(0) \equiv \text{SAA} \\ x_n(\delta) \equiv \text{DRO} \quad \text{for } \delta > 0 \end{cases}$$

事後パフォーマンス (*Out-of-sample performance*):

- $Y_{n+1} \sim \mathbb{P}$: Y_1, \dots, Y_n とは独立に \mathbb{P} の新しい標本

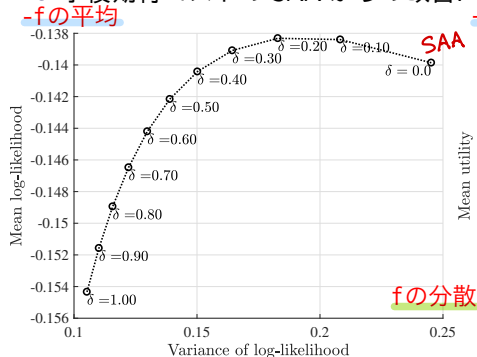
$$\rightsquigarrow \begin{cases} f(x_n(0), Y_{n+1}) : \text{SAA の事後コスト} \\ f(x_n(\delta), Y_{n+1}) : \text{DRO の事後コスト} \quad \text{for } \delta > 0 \end{cases}$$

ロバスト平均・分散フロンティア

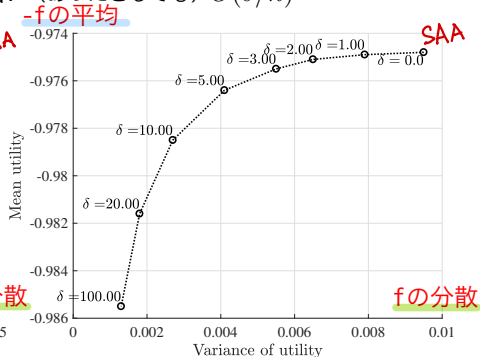
$$\left\{ (\mathbb{E}_{\mathbb{P}}[f(x_n(\delta), Y_{n+1})], \mathbb{V}_{\mathbb{P}}[f(x_n(\delta), Y_{n+1})]) : \delta \geq 0 \right\}$$

δ が小さい $+f$ が x について狭義凸のとき

- 事後分散の減少効果が支配的: $O(\delta)$
- そのトレードオフとしての事後期待コストの増加は小さい: $O(\delta^2)$ ($< O(\delta)$)
- 事後期待コストの SAA からの改善: (あったとしても) $O(\delta/n)$



(i) ロジスティック回帰の DRO の例



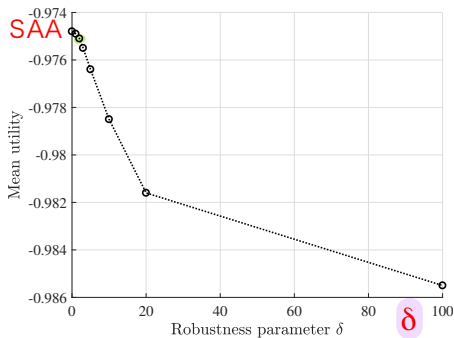
(ii) ポートフォリオ選択の例

注意: 縦軸が $-\mathbb{E}[f]$ になっています

DRO においてはばらつきを抑える視点が重要

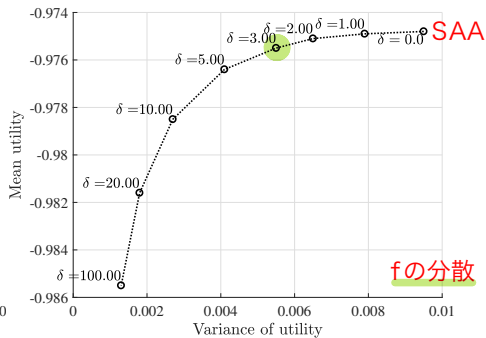
ポートフォリオ選択の例

期待効用
= $-f$ の平均



(i) 平均のみに着目した場合

期待効用
= $-f$ の平均

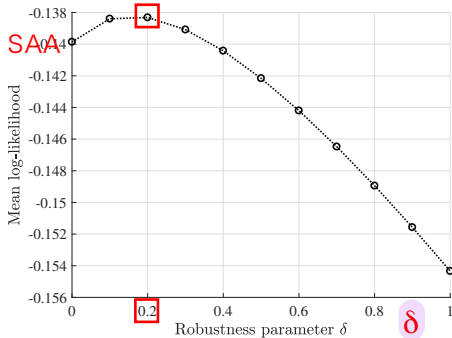


(ii) 平均・分散に着目した場合

DRO においてはばらつきを抑える視点が重要

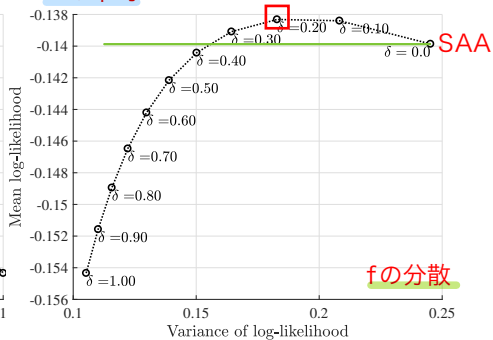
ロジスティック回帰の例

対数尤度
= $-f$ の平均



(i) 平均のみに着目した場合

対数尤度
= $-f$ の平均



(ii) 平均・分散に着目した場合

まとめ

- DRO において分布に対する不確実性に対処するため最悪の分布に基づくことの意味
 - ≈ コスト f (or 報酬) 分布の広がりを抑える
- たとえば, 不確実性のサイズパラメータ ϵ/δ が小さいとき,
KL ダイバージェンス \leftrightarrow ばらつきは標準偏差/分散
 - ※ 異なるダイバージェンスや不確実性集合に対しては異なるばらつきの尺度 (Gotoh, Kim, Lim, 2020, arXiv)
- 事後的にも平均を改善させる効果よりは, ばらつきを減少させる効果の方が大きい (ペナルティー版の分析)
- 再標本法などと組み合わせたデータ駆動型の最適化
- ↪ R などの各種データ解析パッケージ/ライブラリとソルバーを組み合わせた利用法が有効

Based on

- Gotoh, Kim, Lim, *Calibration of Distributionally Robust Empirical Optimization Models*, to appear in *Operations Research*, 2021+