グラフニューラルネットワークを用いた高次元関数の分割による最適化手法の提案

Computer Systems Laboratory

コース：一般コース　学籍番号:2121057 氏名:清　恵人
コンピュータシステム研究室　　指導教員:中野　秀洋　教授

1研究背景と研究目的

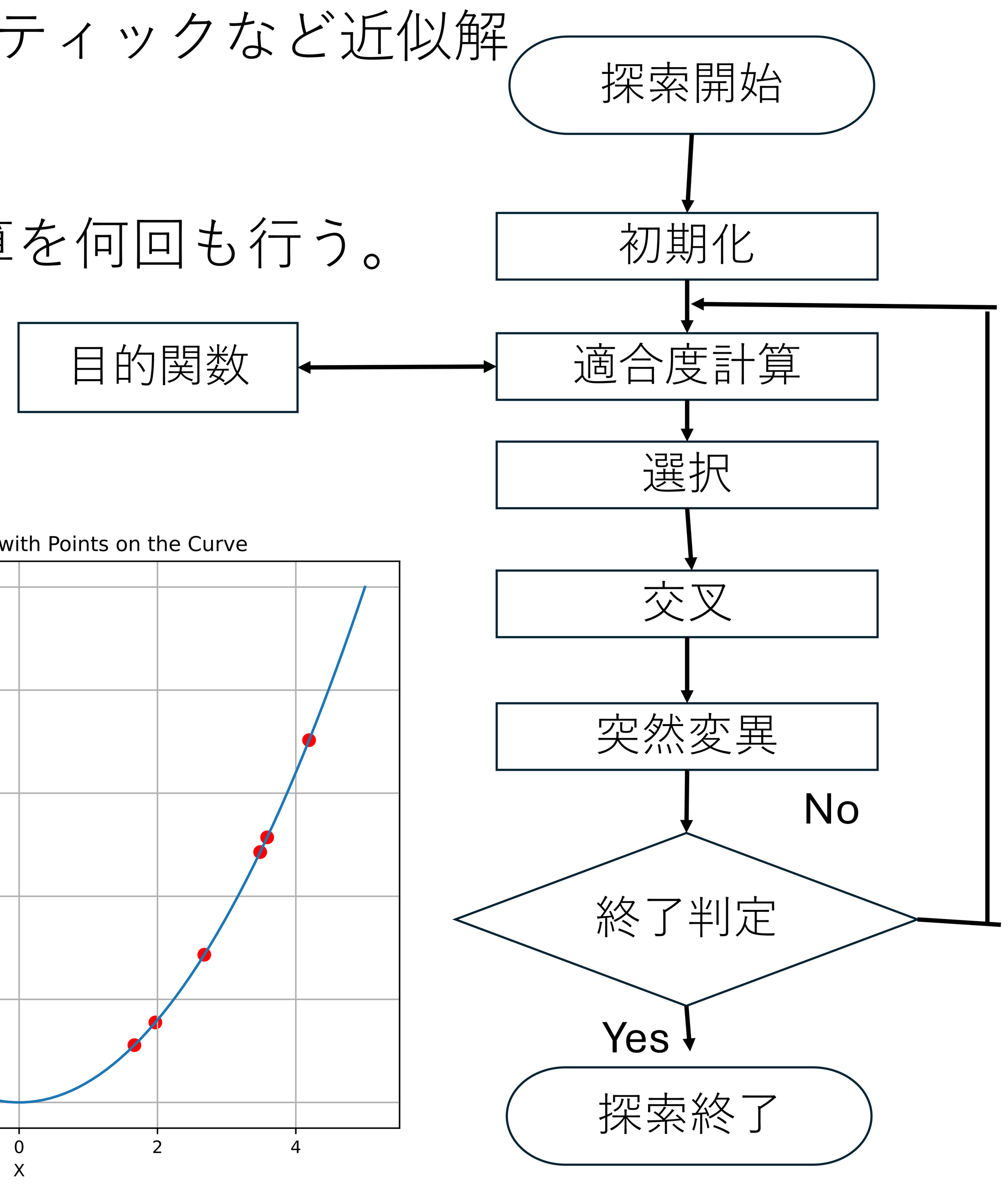
1.1研究背景

・実世界にはあらゆる最適化
例）工学設計・ロボット制御・Neural Architecture Search など

1.1.1 最適化

・対象を限定せず近似解を求める
→メタヒューリスティックなど近似解

・目的関数の計算を何回も行う。



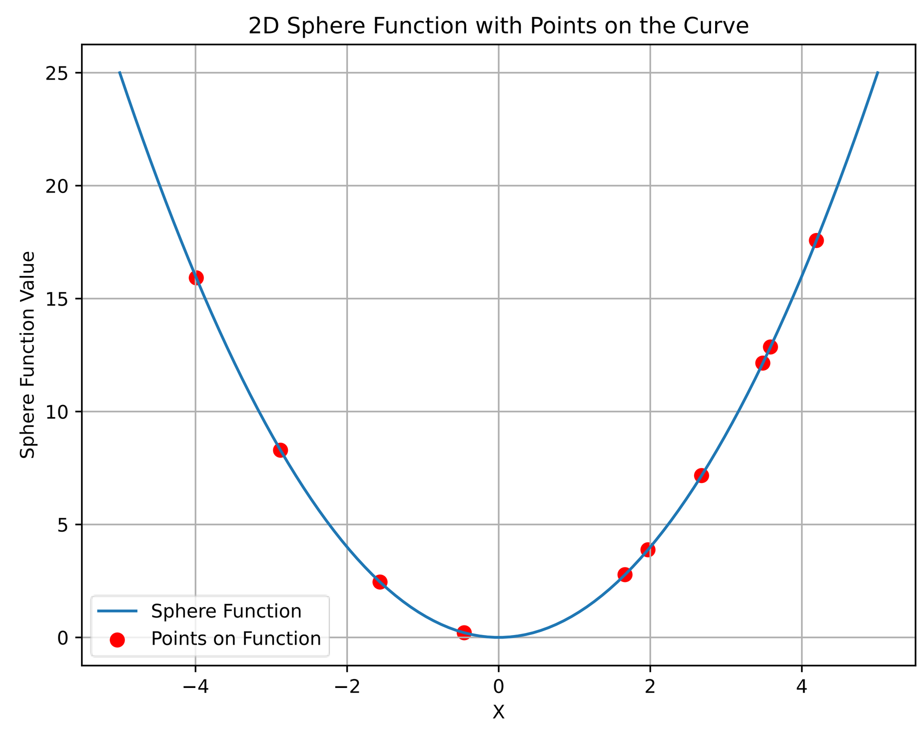


図1:Sphere function

図2:最適化のアルゴリズム

1.1.2 Surrogate model

・適応度の計算が困難→代理モデルの生成[1]
・図２目的関数→Surrogate modelの近似解

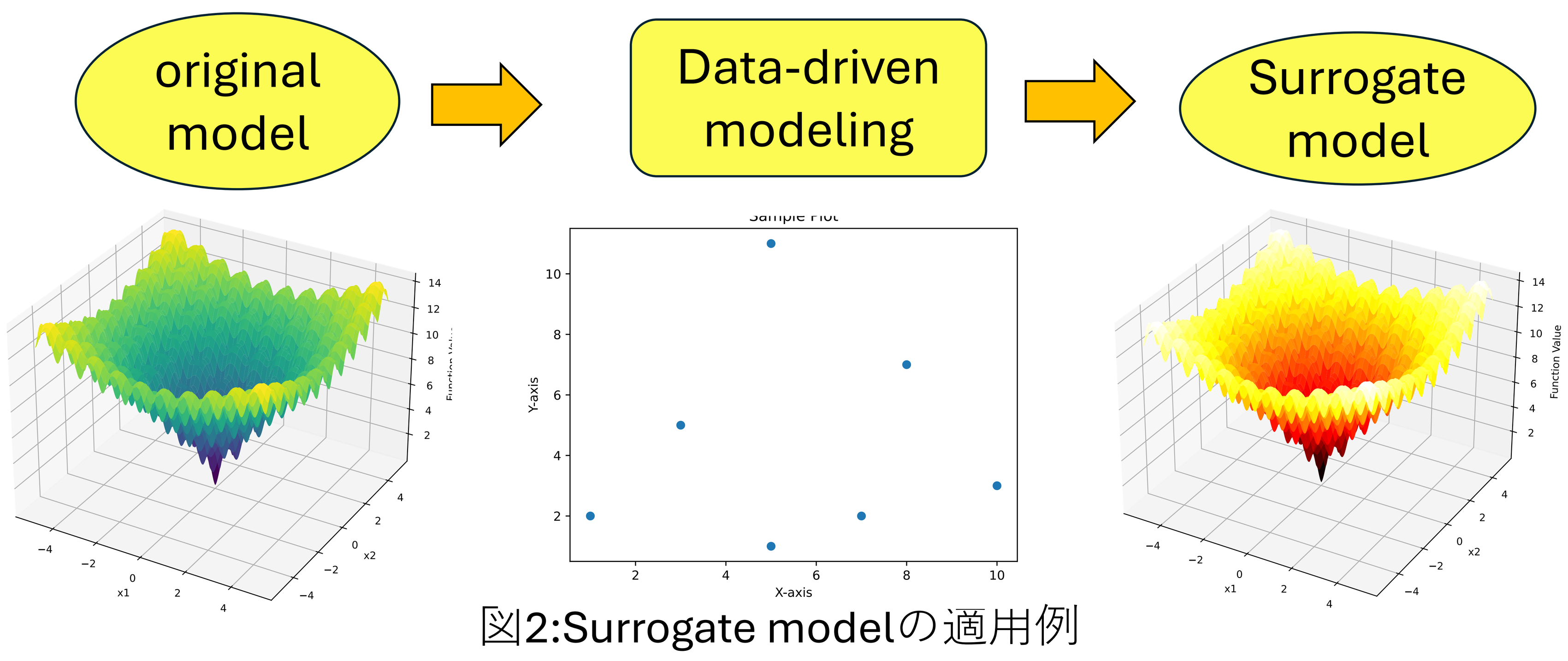


図2:Surrogate modelの適用例

1.1.3　従来研究の問題点

・目的関数は高次元
・低次元への分割→変数間の依存関係が重要

分割なし	分割あり
1.14e+08	5.42e+08

1.2研究目的

・グラフニューラルネットワークを用いて高次元関数を低次元ごとに分割して探索することでより効率的に探索

1.2.1 Graph Neural Network

グラフ構造をニューラルネットワーク[2]
画像認識・自然言語処理・社会モデルなどに応用

2研究の進捗

2.1提案手法

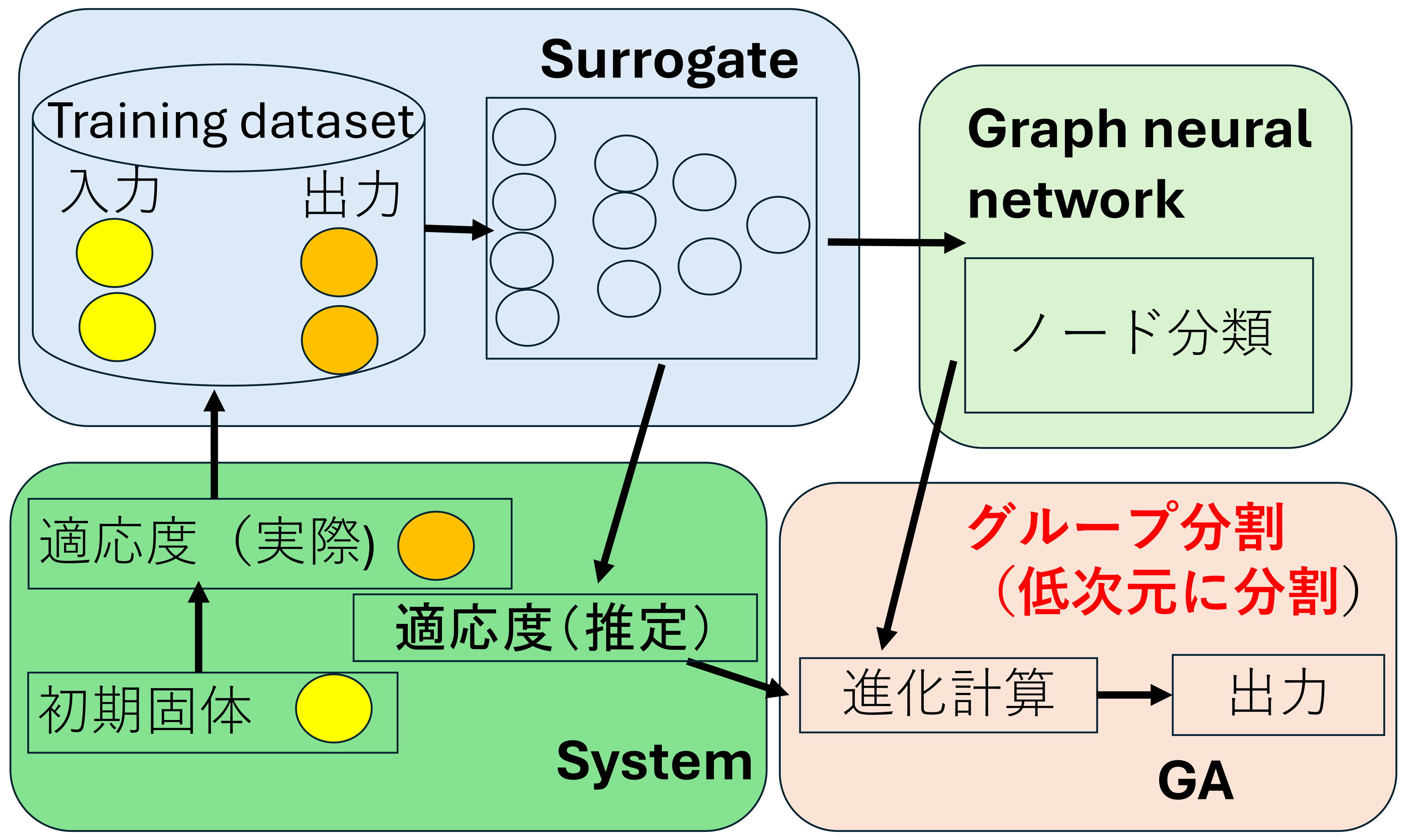


図4:提案手法の全体モデル

2.2研究の進捗

2.2.1実験環境

Rosenbrock(50次元)+Dixon(50次元)+Rosenbrock(50次元)

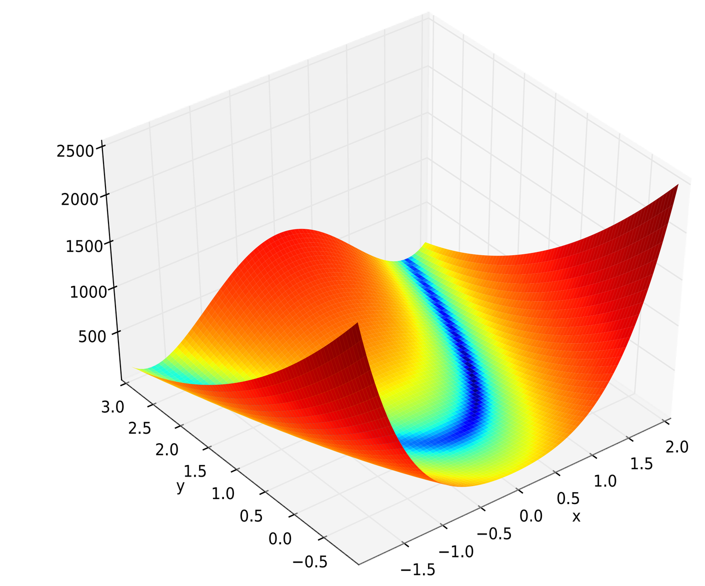


図5:Rosenbrock

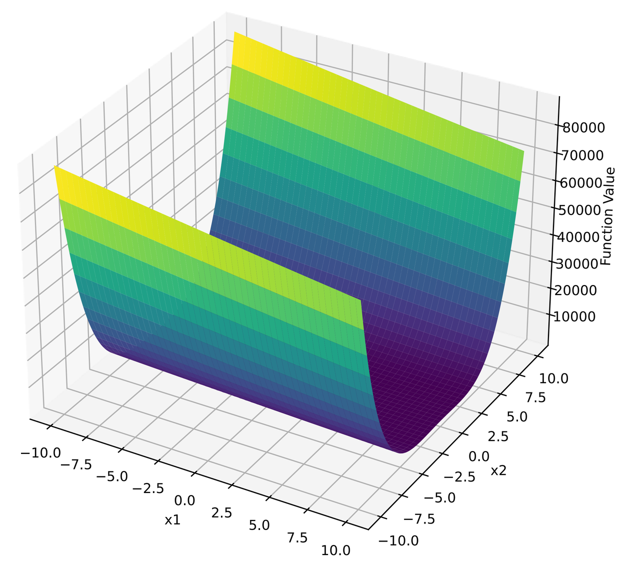


図6:Dixon Function

$$f(x) = \sum_{i=1}^{d} \left[100\left(x_{\{i+1\}} - x_i^2\right)^2 + (x_i - 1)^2 \right] \quad (1)$$

・x_{i+1}とx_iが乗算される
・次の変数に依存関係がある

$$f(x) = \sum_{i=1}^{d-1} (x_1 - 1)^2 + \sum_{i=2}^{d} i\left(2x_i^2 - x_{i-1}\right)^2 \quad (2)$$

・x_{i-1}とx_iに依存関係がある

2.2.2実験結果

表1:実験結果

分割なし	分割あり
2.19e+09	1.63e+09

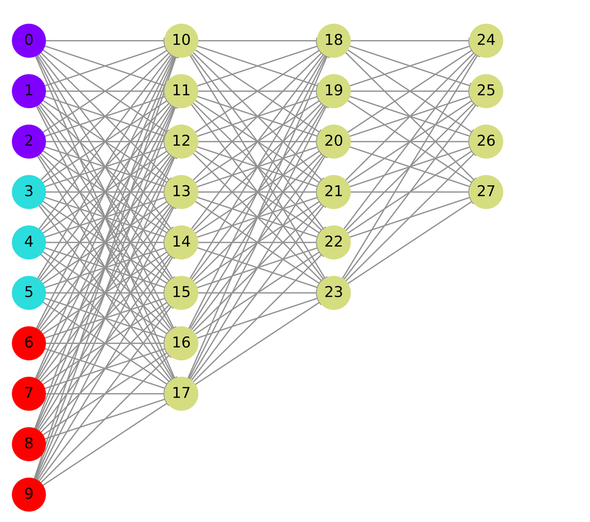
・分割したほうが性能がいい
・分割の精度→80%

2.3 研究計画

・グラフニューラルネットワークの教師なしクラスタリング

通常のクラスタリングでは困難（ノードの位置）
Auto Encoderを用いたクラスタリング
→グラフニューラルネットワークの精度向上

・目的関数の複雑化
最先端の手法との比較



3参考文献

[1]Kocijan, J., Stefan, I.J., Hvala, N., Zlata, P.M., d.o.o., B.M., Kocijan, J., Perne, M., Mlakar, P., Graˇsiˇc, B., Marija, ·., Boˇznar, Z., Kocijan, J., & d.o.o, M.Z. Surrogate modelling for the forecast of Seveso-type atmospheric pollutant dispersion.
[2] Wu, Z., Pan, S., Chen, F., Long, G., Zhang, C.Philip, S. Y. (2020). A comprehensive survey on graph neural networks. IEEE transactions on neural networks and learning systems, 32(1), 4-24.