P38

6.3 スケーリング

より大きな問題へのスケーリングは困難である。あるサイズまでのインスタンス、例えば50ノードまでのTSPで学習したモデルを、より大きなインスタンス、例えば100ノード、500ノードなどのTSPで評価した場合、セクション4.3で述べたように、汎化の点で課題が存在する。実際、MLを用いてTSPに取り組み、より大きなインスタンスを解こうとする論文の全ては、サイズが訓練中に見たサイズをはるかに超えて大きくなるにつれて性能が低下することを見ている(Vinyals et al., 2015; Bello et al., 2017; Khalil et al.,2017a; Kool and Welling, 2018)。この問題に取り組むために、より大きなインスタンスで学習しようとするかもしれないが、これは計算量と汎化の問題になるかもしれない。非常に単純なMLモデルやデータ分布に関する強い仮定を除いて、計算複雑度や標本複雑度、すなわち学習が必要とする観測回数を知ることは不可能である。

6.4 データ生成

データ（例えば最適化問題のインスタンス）の収集はサブタスクである。Larsenら(2018)は、「過去のデータからのサンプリングは、そのようなデータに反映された振る舞いを模倣しようとする場合に適切である」と主張する。言い換えれば、最適化問題のインスタンスを観察する外部プロセスが与えられた場合、最適化に必要な何らかのポリシーを訓練するためにデータを収集し、そのポリシーがこのアプリケーションの将来のインスタンスで一般化することを期待することができる。実用的な例としては、冒頭で使用したモントリオールの宅配会社の例のように、自社の活動に関連した最適化問題に頻繁に遭遇するビジネスが挙げられる。

それ以外の場合、すなわち、過去のデータがあるような特定のアプリケーションを対象としていない場合、どのようにして、まだ知らない問題に対して積極的にポリシーを学習することができるでしょうか？セクション4.3で部分的に説明したように、我々はまず、どのようなインスタンスの系列を汎化したいかを定義する必要がある。例えば、ユークリッドTSP問題に対する切断面選択ポリシーを学習することにするかもしれない。それでも、実際のアプリケーションの本質を捉えた問題を生成するのは複雑な作業であることに変わりはない。さらに、CO問題は高次元で、高度に構造化されており、可視化するのが厄介である。グラフを生成するという唯一の運動が、すでに複雑なものである！それにもかかわらず、この話題はいくつかの関心を集めている。Smith-MilesとBowly(2015)は、アルゴリズムに置ける信頼性は「テストインスタンスをいかに注意深く選択するかに依存する」と主張するが、しかし、新しいアルゴリズムが「よく研究されたインスタンスの集合で以前のアプローチを上回ることを示すことによって優れている」と主張されることがあまりにも多いことに注意する。著者らは、インスタンス特徴空間を定義し、それを（主成分分析のような次元削減技術を用いて）2次元で可視化し、進化的アルゴリズムを用いて、あらかじめ定義された部分空間に向けてインスタンス生成を駆動する、という構成の問題インスタンス生成法を提案している。著者らは、縮小されたインスタンス空間において、簡単なインスタンスと難しいインスタンスが容易に分離できれば、この方法は成功であると主張する。この方法論は、グラフに基づく問題には有益に適用されるが、他のタイプの問題に適用するためには、進化プリミティブを再定義する必要がある。これに対して、Malitskyら（2016）は、同じ確率分布から問題インスタンスを生成する方法を提案している。著者らは、新しいインスタンスを探索するために、破壊と修復のプリミティブを用いた大規模な近傍探索を用いる。新しいインスタンスがターゲットとなるインスタンスと同じクラスタに属するかどうかを分類するために、いくつかのインスタンス特徴が計算される。

データをどのように表現するかを決めるのも簡単な作業ではないが、学習に劇的な影響を与える可能性がある。例えば、B&Bノード、あるいはB&Bツリー全体をどのように適切に表現するか。これらの表現は、学習に十分な表現力を持つと同時に、過剰な計算をすることなく頻繁に使用できる簡潔さが必要である。

7 結論

我々は、部分的に学習された組合せ最適化アルゴリズムを構築するために、機械学習がどのように利用できるかを調査し、強調した。我々は、学習された方針が、専門家によって提供された元の方針（この場合は組合せ最適化アルゴリズム）よりも計算速度が著しく速い場合、模倣学習だけでも価値があることを示唆した。逆に、報酬信号で訓練されたモデルは、十分な訓練と教師付き初期化が与えられれば、現在のポリシーを上回る可能性がある。未知の問題に対して汎化するポリシーを訓練することは困難であり、これが、ポリシーが問題の構造を十分に利用し、より良い結果を与えることができるように、学習が十分に小さい分布上で起こるべきだと考える理由である。我々は、組合せ最適化に対するエンドツーエンドの機械学習アプローチは、機械学習を現在の組合せ最適化アルゴリズムと組み合わせて使用することで、既に利用可能な理論的保証と最先端のアルゴリズムから利益を得ることで改善できると考えている。

性能インセンティブ以外にも、Lombardi and Milano (2018)のように離散最適化のモデリングツールとして機械学習を利用することや、Bonami et al. (2018); Khalil et al. (2017a)のようにアルゴリズムに関する直感や知識を抽出することにも関心が集まっている。 本稿で取り上げたアプローチのほとんどは、少なくとも汎用（商用）ソルバーでの利用という点では、まだ展開の手探りレベルにあるが、これは組合せ最適化アルゴリズムの新しい時代の始まりに過ぎないと強く信じている。

謝辞

Emma Frejinger、Simon Lacoste-Julien、JasonJo、Laurent Charlin、Matteo Fischetti、R´emi Leblond、Michela Milano、S´ebastien Lachapelle、Eric Larsen、Pierre Bonami、Martina Fischetti、EliasKhalil、Bistra Dilkina、Sebastian Pokutta、Marco L¨ubbecke、Andrea Tramontani、Dimitris Bertsimas、そしてCERCチーム全員に感謝する。