

非凸最適化とフォッカー・プランク方程式における 拡散過程の時間反転構造の応用

数理情報学専攻 48226231 藤野 遼
指導教員 荻原 哲平 准教授

1 はじめに

本研究では、確率微分方程式で表される拡散過程：

$$dX_t = b(t, X_t) dt + \sigma(t, X_t) dW_t, \quad t \in [0, T] \quad (1)$$

の時間反転構造を非凸最適化アルゴリズムとフォッカー・プランク方程式の数値解法に対して応用する。ここで、 $b : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d, \sigma : [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ であり、 W_t を d 次元のブラウン運動とする。 X_t の時間反転を $X_t^\dagger := X_{T-t}$ とし、 X_t の確率密度関数を $\rho \in C^{1,2}([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ とすれば、

$$dX_t^\dagger = b^\dagger(t, X_t^\dagger) dt + \sigma(T-t, X_t^\dagger) dW_t, \quad (2)$$

$$b^\dagger(t, x) := -b(T-t, x) + \nabla_x \cdot a^\dagger(t, x) \\ + a^\dagger(t, x) \nabla_x \log \rho(T-t, x),$$

$$a^\dagger(t, x) := \sigma(T-t, x) \sigma(T-t, x)^\top$$

が成り立つ [1]。 $\rho(t, x)$ はフォッカー・プランク方程式：

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t, x) = \mathcal{L}^* \rho(t, x) \quad (3)$$

$$\mathcal{L}^* := \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial x_i} b_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} a_{ij}$$

を満たし、 $s(t, x) := \nabla_x \log \rho(t, x)$ をスコア関数と呼ぶ。

2 Reversible Diffusions による非凸最適化

拡散過程 (1) において、係数が時刻 t に依存せず、 X_t が定常分布 $\rho \in C^2(\mathbb{R}^d)$ を持つとする。 ρ は定常なフォッカー・プランク方程式 $\mathcal{L}^* \rho(x) = 0$ を満たす。この偏微分方程式を与えられた b, a に対して解くことは一般に困難であるが、 X_t の時間反転 (2) を考えることで、逆に与えられた確率分布を定常分布として持つような b, a を構成することは容易である。実際、 $F \in C^2(\mathbb{R}^d)$ に対し、

$$b(x) = -a(x) \nabla F(x) + \beta^{-1} \nabla \cdot a(x) \quad (4)$$

とすれば、 $\rho(x) \propto \exp(-\beta F(x))$ (i.e., ギブス分布) となる。このとき、 X_t と X_t^\dagger の確率分布は一致し、 X_t は Reversible Diffusion となる。ここで、 $x_* := \operatorname{argmin}_{x \in \mathbb{R}^d} F(x)$ とすれば、 $\beta \rightarrow \infty$ において $\rho(x) \rightarrow \delta(x - x_*)$ となる。

この確率密度の集中は F が非凸であっても成り立つため、非凸最適化の手法として利用することができる。既存研究 (e.g., [3]) では a を単位行列としたランジュバン動力学による非凸最適化アルゴリズムが提案されているが、本研究では a が状態 x に依存する拡散過程：

$$f_{\lambda, \theta}(x) := \lambda(1 - e^{-\theta x^2}), \quad (5)$$

$$a(x) := (f_{\lambda, \theta}((F(x) - c)^+) + 1) I_d \quad (6)$$

を考える。ここで、 $\lambda, \theta > 0, c > F(x_*)$ である。この拡散過程では、拡散係数が大域的最適解 x_* から離れた領域では増大、一方その近傍では減少することでランジュバン動力学と比較して高速な定常分布への収束が達成されると考えられる。 $\lambda = \beta$ とすることで、提案手法は大域的最適解から十分離れた領域では $\beta = 1$ のランジュバン動力学と同じ大きさの拡散係数となる。

本研究では、上記の拡散過程のオイラー・丸山近似によるアルゴリズムを提案する。 $Z_k \sim \mathcal{N}(0, I_d)$ に対し、ステップサイズ η の離散化：

$$\hat{X}_{k+1} = \hat{X}_k - \eta(a(\hat{X}_k) \nabla F(\hat{X}_k) - \beta^{-1} \nabla \cdot a(\hat{X}_k)) \\ + \sqrt{2\beta^{-1} \eta a(\hat{X}_k)} Z_k, \quad k = 0, 1, \dots \quad (7)$$

を考える。 η を大きくすることでこの離散化された拡散過程の定常分布への収束を高速化することができるが、それによって連続の拡散過程との離散化誤差が増大することとなる。 β が十分大きい場合、提案手法はステップサイズを $f_{\lambda, \theta}$ 倍にすることに対応しており、離散化アルゴリズムの「時間の進み方」を動的に変更することができる。本論文ではその収束速度と離散化誤差のトレード・オフを相対エントロピーを用いて理論的に解析し、提案手法は離散化誤差を抑えながら収束速度を改善することを示した。

数値実験では、提案手法を $\beta = 10^4$ として、Rastrigin 関数 $F(x) = 5d + \sum_{j=1}^d (x_j - 2)^2 + \sum_{j=1}^d \cos(2\pi(x_j - 2))$, $d = 2$ に対して適用した (図 1)。提案手法は $\beta = 1$ のランジュバン動力学と同じ収束速度を達成しながら、 $\beta = 10^4$ のランジュバン動力学と比較してより正確に最適解を推定している。

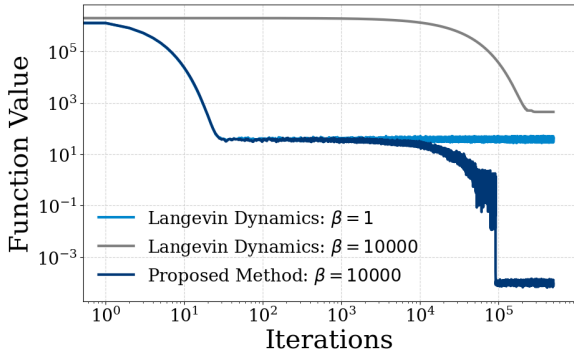


図 1. 提案手法とランジュバン方程式を用いたアルゴリズムの比較. $M = 10^2$ 本のサンプルパス $(x_j^i)_{1 \leq i \leq M, j \geq 0}$ を生成し, 各 j において最適値を $\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M F(x_j^i)$ によって推定した.

3 フォッカー・プランク方程式の数値解法

与えられた拡散過程 (1) に対して, スコア関数 $s(t, x)$ を数値的に求める問題を考える. これはフォッカー・プランク方程式 (3) を解き, その対数微分を計算することに対応するが, 一般に困難な数値解析の問題となる. (2) より, s は X_t^\dagger のドリフト係数 b^\dagger の中に現れるが, X_t^\dagger のサンプルパスからの離散観測 $(Y_j^i)_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m}$ は X_t に対してオイラー・丸山近似を適用し, その時間軸を反転させることで生成できる. 従って, s を求める問題は拡散過程のドリフト係数をその離散観測から推定する問題へと言い換えることができる [4]. 本研究では $\psi \in C^1([0, T] \times \mathbb{R}^d \times \Theta)$ をニューラル・ネットワークとして, 拡散過程の統計モデル:

$$dY_t = \psi(t, X_t, \vartheta) dt + \sigma(T - t, X_t) dW_t \quad (8)$$

を考える. 損失関数として, 疑似尤度関数:

$$L_{m,n}(\vartheta) := \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \Gamma_j^i(\vartheta)^\top a^\dagger(t_{j-1}, Y_{t_{j-1}}^i)^{-1} \Gamma_j^i(\vartheta) \Delta t_j$$

$$\Gamma_j^i(\vartheta) := Y_{t_j}^i - Y_{t_{j-1}}^i - \psi(t_{j-1}, Y_{t_{j-1}}^i, \vartheta) \Delta t_j$$

を用いる. ここで, $\Delta t_j = t_j - t_{j-1}$ である. 推定された $\hat{\vartheta}$ を用いて, スコア関数を $a^\dagger(t, x)^{-1}(\psi(t, x, \hat{\vartheta}) + b(T - t, x) - \nabla_x \cdot a^\dagger(t, x))$ によって計算することができる. この損失関数はスコア関数を X_t のサンプルパスから直接 $\hat{s}(t, x, \vartheta)$ によって推定するスコア・マッチングの損失関数:

$$\mathcal{J}_{\text{DSM}}(\vartheta) := \frac{1}{\Delta t_j} \mathbb{E} \left[\sum_{j=1}^m \mathcal{V}_j^\top a(t_{j-1}, X_{t_{j-1}})^{-1} \mathcal{V}_j \right]$$

$$\mathcal{V}_j := X_{t_j} - X_{t_{j-1}} - b(t_{j-1}, X_{t_{j-1}}) \Delta t_j + a(t_{j-1}, X_{t_{j-1}}) \hat{s}(t_j, X_{t_j}, \vartheta) \Delta t_j$$

と類似している [2]. しかしながら, スコア・マッチングでは $\nabla_x \cdot a^\dagger(t, x)$ の項が現れず, 拡散係数が状態 x に依存する場合には異なる損失関数となる.

本論文では, 適切な条件の下で提案手法による ϑ の推定が一致性を持つことを示した.

数値実験では, 拡散過程

$$X_t = -\frac{1}{2} X_t dt + \left(1 + \frac{5}{X_t^2 + 1}\right) dW_t$$

に対して提案手法を適用し, スコア・マッチングの損失関数を利用した場合と比較した (図 2). $T = 10$ とし, $N = 10^3$ 本のサンプルパスとそのそれぞれからの $M = 10^3$ 個の離散観測から ψ と \hat{s} を推定した. 提案手法はスコア・マッチングと比較してより正確な推定結果を与えており, 理論解析と整合的な結果が得られた.

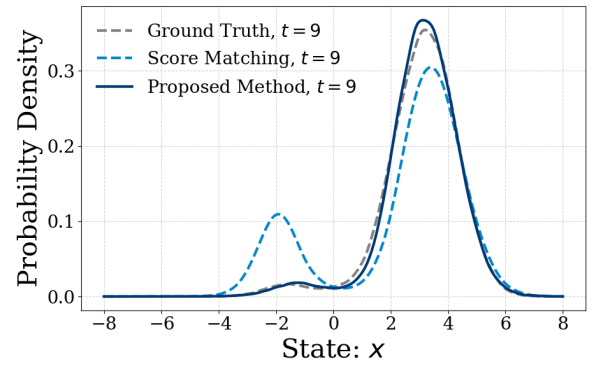


図 2. 提案手法とスコア・マッチングを用いたアルゴリズムの比較. 推定されたドリフト係数を使って 10^5 本のサンプルパスを生成し, $t = 9$ における確率密度関数をカーネル密度推定によって図示した.

参考文献

- [1] U. G. Haussmann and K. E. Pardoux. The reversal of diffusions. *The Annals of Probability*, 14:1188–1205, 1986.
- [2] Y. Song, J. Sohl-dickstein, D. P. Kingma, A. Kumar, S. Ermon, and B. Poole. Score-based generative modeling through stochastic differential equations. In *ICLR*, 2021.
- [3] P. Xu, J. Chen, D. Zou, and Q. Gu. Global convergence of langevin dynamics based algorithms for nonconvex optimization. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 31, 2018.
- [4] N. Yoshida. Estimation for diffusion processes from discrete observation. *Journal of Multivariate Analysis*, 41:220–242, 1992.