

# ブラックボックス型イジングモデルを用いたポートフォリオ最適化

柴田 将<sup>1,2</sup> 今井 春奈<sup>1,2</sup> 高原 玲央<sup>1</sup> 中村 暢達<sup>2</sup>

Sho SHIBATA<sup>1,2</sup> Haruna IMAI<sup>1,2</sup> Reo TAKAHARA<sup>1</sup> Nobutatsu NAKAMURA<sup>2</sup>

**概要**：金融資産のポートフォリオ最適化問題は、選択する金融資産とその配分の組合せが膨大に存在するため、最適解の探索が困難な問題として知られている。本稿で取り扱うインデックス・トラッキング・ポートフォリオの最適化においては、市場の不確定性からモデル化は困難であり、モデル化したとしても、最適化の目的関数に決定変数の除算や対数関数が含まれ、従来の数値最適化技術の適用は困難であった。本稿では、本問題に対する求解手法として Factorization Machine とアニーリングを用いたブラックボックス最適化手法を提案し、その評価結果を報告する。

**キーワード**：アニーリング, Factorization Machine, ブラックボックス最適化, 機械学習, ポートフォリオ最適化

## 1. はじめに

近年、組合せ最適化問題に対して、量子コンピューティング技術の適用が進んでいる<sup>[1][2][3]</sup>。対象とする問題をイジングモデルあるいはこれと等価な QUBO モデル（二次制約なし二値最適化）で表現し、量子アニーリングマシンをはじめとするイジングマシンを用いてその低エネルギー状態を探索することで、高速かつ高精度で解を導出する。

一方で、実社会における組合せ最適化問題は、イジングモデルや QUBO モデルでの表現が難しい場合が多くある。例えば、インデックス・トラッキング・ポートフォリオの最適化では、インデックスからの乖離を表す既定の指標値を最小化することを目的とするが、その指標値の計算は除算や対数関数の和を含む。2 次式以外の計算を含む問題に対しては直接的なイジングモデルの作成は困難であり、近似解法を利用するのが一般的である<sup>[4]</sup>。

このような組合せ最適化問題に対するアプローチの一つとして、北井らによって提案されたブラックボックス最適化手法がある<sup>[5]</sup>。定式化が困難な組合せ最適化問題を機械学習技術の一つである Factorization Machine<sup>[6]</sup>を用いてイジングモデルの作成を近似的におこなう（代理関数）。D-Wave<sup>[7]</sup>の量子アニーリングマシンを用いて、この代理関数の低エネルギー状態を探索することで、組合せ最適化を実現する。この手法では、入出力のみが明らかで具体的な関数形が不明なブラックボックス関数や関数形は判明しているものの定式化が困難な関数に対して、量子アニーリングによる組合せ最適化問題の求解が可能であることを示した。また、代理関数の低エネルギー状態の探索には、任意のイジングマシンを用いることが可能であり、デジタル回路上に実装したイジングマシンを用いた手法も提案されている<sup>[8]</sup>。また、山下ら<sup>[9]</sup>は、この手法とベイズ最適化を用いた従来のブラックボックス最適化手法の比較検証をおこない、提案手法の優位性を示している。

これらの手法では、イジングモデルを Factorization Machine によって自動的に生成する。そのため、本手法に

よって生成されたイジングモデルをブラックボックス型イジングモデルと呼ぶこととする。

本稿では、ブラックボックス型イジングモデルを用いた最適化手法によって、最適なインデックス・トラッキング・ポートフォリオを求める手法を提案する。また、提案手法と従来のブラックボックス最適化技術との比較結果を報告する。

## 2. ポートフォリオ最適化問題

### 2.1 インデックス・トラッキング・ポートフォリオ

ポートフォリオ最適化問題とは、金融資産の金額、期間、リスクなどのさまざまな条件がある中で、株式、債券等の金融資産の組合せ（ポートフォリオ）を求める問題である。本稿で取り扱うインデックス・トラッキング・ポートフォリオはリスクとリターンのバランスがよいポートフォリオの 1 つとして知られる。これは目標とするインデックス（日経平均株価、香港ハンセン指数など）の変動に追従するポートフォリオであり、目標からの乖離度合いを表すトラッキングエラーを最小化することが期待されている。

### 2.2 トラッキングエラー

ある時点  $t$  におけるインデックスの価格を  $I_t$  とする。 $p_{m,t}$  を  $t$  における銘柄  $m$  の株価、 $r_m$  をその配分とすると、ポートフォリオの価格  $P_t$  は下記の式で表すことができる：

$$P_t = \sum_{m \in M} p_{m,t} r_m \quad (1)$$

ここで、 $M$  はインデックスを構成する全銘柄の集合である。このとき、インデックス、ポートフォリオそれぞれの Log Return  $R_{I,t}$ 、 $R_{p,t}$  は下記の通り定義される。

$$R_{I,t} = \log \left( \frac{I_t}{I_{t-1}} \right) \quad (2)$$

1 NEC ソリューションイノベータ株式会社, NEC Solution Innovators, Ltd.

2 日本電気株式会社, NEC Corporation

$$R_{p,t} = \log\left(\frac{P_t}{P_{t-1}}\right) \quad (3)$$

$T$  をインデックス、株価データ測定時点の集合とすると、トラッキングエラー  $\varepsilon$  はインデックスとポートフォリオの Log Return の差の標準偏差として定義される。

$$\varepsilon = \sqrt{\text{Variance}\left[\{R_{i,t} - R_{p,t}\}_{t \in T}\right]} \quad (4)$$

インデックスは株式市場の平均的な動きを表す指標であるため、原理的にはインデックスを構成する全株式をポートフォリオに組み込むことで、トラッキングエラーのない理想的なポートフォリオを実現できると考えられる。しかし、ポートフォリオを構成する株式の種類が多い場合、その運用には莫大なコストを必要とする。そのため、ポートフォリオに組み込む株式の種類数（カーディナリティ）を制限する。本稿ではカーディナリティの上限は所与として、最適なインデックス・トラッキング・ポートフォリオを探索する手法を示す。

### 3. ブラックボックス型イジングモデルによる最適化

#### 3.1 Factorization Machine

Factorization Machine (FM) は、サポートベクターマシンと Factorization モデルを用いた機械学習技術の一つである [6]。FM のモデル方程式は以下で表される。

$$y(\mathbf{x}; \mathbf{c}, \mathbf{w}, \mathbf{v}) = c + \sum_{i=1}^N w_i x_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^K v_{i,k} v_{j,k} x_i x_j \quad (5)$$

ここで  $\mathbf{x}$  は説明変数ベクトルを表し、 $c \in \mathbb{R}$ 、 $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^N$ 、 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N \times K}$  は学習によって決定するモデルパラメータを表す。整数  $K$  はハイパーパラメータであり、モデルの表現力の調整に用いる。

FM のモデル方程式は説明変数の 2 次式であるため、説明変数がバイナリ変数であるという前提条件下では、イジングモデルあるいは QUBO とみなすことができる。したがって、イジングマシンを用いて FM のモデル方程式の低エネルギー解のサンプリングが可能である。このように、本アルゴリズムで使用するイジングモデルは、機械学習技術により暗黙的に生成されるため、本稿ではこれをブラックボックス型イジングモデルと呼ぶ。

#### 3.2 最適化手法

本節で、本研究で利用する最適化手法について説明する。本手法では、以下の 3 つの Step を 1 つのサイクルとして反復する。

- Step 1. ブラックボックス型イジングモデルの生成
- Step 2. 低エネルギー解のサンプリング
- Step 3. サンプルの評価

Step1 では、訓練データを用いて FM の学習をおこない、ブラックボックス型イジングモデルを生成する。ここで訓練データとは、説明変数とブラックボックス関数の計算値

(目的変数) のペアからなるデータである。ただし、説明変数がバイナリ変数ではない場合、事前にバイナリ変数にエンコードする必要がある。また、初回の学習時はイジングマシンを用いて生成したサンプルが存在しないため、事前にいくつかのサンプルを生成して FM を学習するか、あるいは FM のモデル方程式のパラメータ ( $\mathbf{c}, \mathbf{w}, \mathbf{v}$ ) を暫定的に設定する。

Step2 では、イジングマシンを用いてブラックボックス型イジングモデルの低エネルギー解を  $N_s$  件サンプリングする。これによりブラックボックス関数の最適解近傍の説明変数を獲得する。説明変数間に制約条件が存在する場合、制約条件を罰則項として加えたイジングモデルを作成し、サンプリングするようにしても良い。

Step3 では、Step2 で獲得した説明変数に対するブラックボックス関数値 (目的変数) を計算する。これにより得られた説明変数と目的変数のペアを FM の訓練データに追加する。

以上 3 つの段階からなるサイクルを、FM の学習が収束するか、指定した反復回数に達するまで反復する。反復の過程で得られたサンプルの中でブラックボックス関数値が最小のものを最終的な出力とする。

### 4. 提案手法

#### 4.1 定式化

本節では、本手法において用いる制約条件の定式化について説明する。カーディナリティに上限のあるポートフォリオ最適化における制約条件は下記の 2 つである。

1. 全銘柄の構成比率の合計が 1 であること
2. カーディナリティ上限以下の銘柄で構成すること

まず、ポートフォリオを構成する株式銘柄  $m$  の構成比率  $r_m$  を、Log Encoding により以下のように離散化する。

$$r_m = \sum_{i=0}^{N_b-1} \frac{2^i b_{m,i}}{2^{N_b} - 1} \quad (6)$$

ここで  $b_{m,i}$  は 0 または 1 を取り得るバイナリ変数、 $N_b$  は自然数であり、構成比率の粒度を調整するパラメータである。上記の定義より  $0 \leq r_m \leq 1$  を満たす。これを用いて 1 つ目の制約条件は下記式で表すことができる。

$$C_1 = \left( \sum_{m \in M} r_m - 1 \right)^2 \quad (7)$$

続いて、2 つ目の制約条件は、バイナリ変数  $s_m$  およびカーディナリティ上限  $k$  を用いて以下式で表される。

$$C_2 = \sum_{m \in M} \sum_{i=0}^{N_b-1} (1 - s_m) b_{m,i} + \left( \sum_{m \in M} s_m - k \right)^2 \quad (8)$$

第 1 項は  $r_m > 0$  かつ  $s_m = 0$  となることを禁止する制約であり、第 2 項は、変数  $s_m$  のうち  $k$  個だけが 1 になることを表す。これらを用いることで、カーディナリティ上限の制約が設定される。

サンプリングの目的関数は、変数  $b_{m,i}$  と  $s_m$  を説明変数、式 (4) を用いて計算したトラッキングエラー  $\varepsilon$  を目的変数として学習した FM のモデル方程式 (5) を用いる。最終的なイジングモデルは式 (5), (7), (8) を用いて下記のように表される。

$$H = \alpha y(\mathbf{b}, \mathbf{s}; \mathbf{c}, \mathbf{w}, \mathbf{v}) + \beta C_1 + \gamma C_2 \quad (9)$$

ここで  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  は各項の重みを表す正の実数である。

上記を用いたブラックボックス最適化の手順は次の通りである。まず、式 (6) を満たす適当な初期データ  $r_m$  を生成し、式 (1) ~ (4) を用いてトラッキングエラー  $\varepsilon$  を計算する。式 (6) および (8) を用いて、 $r_m$  より変数  $b_{m,i}$  と  $s_m$  を逆算する (エンコーディング)。こうして得られたサンプル ( $b_{m,i}, s_m, \varepsilon$ ) を訓練データとして FM を学習する。

次に、式 (9) の低エネルギー解をイジングマシンで求め、目的関数を最小化すると推測される ( $b'_{m,i}, s'_m$ ) を得る。

最後に、式 (6) に  $b_{m,i} = b'_{m,i}$  を代入し  $r'_m$  を求め、さらにこれを用いて式 (1) ~ (4) よりトラッキングエラー  $\varepsilon'$  を計算する。こうして得られた ( $b'_{m,i}, s'_m, \varepsilon'$ ) を FM の訓練データに追加する。

## 4.2 一括最適化と多段最適化

本提案手法は、与えられた銘柄  $M$  より最大  $k$  個の銘柄を選出してポートフォリオを構成する。本章では、このアプローチの多段化について述べる。図 3 に多段化のフローを示す。

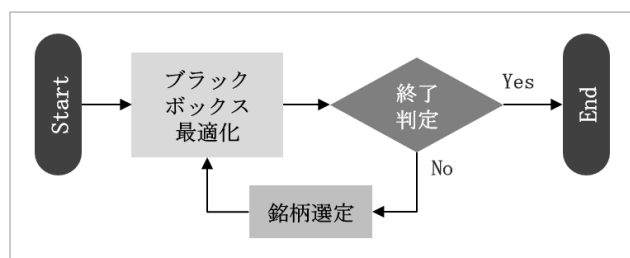


図 1 多段最適化のフロー

ブラックボックス最適化部では、第 3 章で説明したブラックボックス最適化をおこない、所定の数のサンプルを得る。終了判定部では、終了条件を設けて、処理を終了するかを判定する。例えば、十分に良いサンプルが得られた場合や所定の回数の多段最適化が完了した場合などである。銘柄選定部では、得られたサンプルをもとに、ポートフォリオから除外する銘柄を選定する。例えば、トラッキングエラーの高いサンプルに頻繁に含まれる銘柄を除外する。これらの処理を繰り返すことで、次の 2 点の効果が期待できる。

1 点目は最適化問題の規模の低減による高速化、高精度化である。一部の銘柄を除外することで決定変数の数が減り、探索空間が狭まるため、より良い解を見つけやすくなる。加えて、規模の低下に伴い、ブラックボックス最適化の 1 サイクルあたりの計算時間が短くなる。単位時間あたりの探索回数が増加することで、同じ計算時間で処理した場合であっても、探索空間の中で比較的広範囲の探索が可能となる。

2 点目は多段化による FM の学習の停滞の抑制である。本手法では、ブラックボックス最適化のサイクル毎に一定

件数 ( $N_s$ ) の訓練データが追加される。最適化の初期段階ではそれまでに蓄積された訓練データが少ないため、サンプリングによる訓練データ数の増加率が大きい。サイクルが進むにつれて増加率は単調減少する。したがって、サイクルが進むほど相対的に訓練データの変化が小さくなり、FM の学習結果の変化も小さくなる。結果として最適化が停滞すると考えられる。多段化をおこなった場合、各段階で説明変数が異なるため、FM の訓練データが大きく変わるため、上記のような学習の停滞を抑制することも期待できる。

本稿では、上記のような多段的なアプローチを多段最適化と呼び、単一のブラックボックス最適化によるアプローチを一括最適化と呼ぶこととする。

## 5. 評価

### 5.1 評価方法

本稿では OR-Library<sup>[10]</sup> に掲載されている香港証券取引所の週次のインデックス、株式データを用いて評価をおこなう。本データは、291 週間分の週次のインデックスの価格  $I_t$  および 31 銘柄の株価  $p_{m,t}$  を含むデータである。このうち、前半の 145 週分は学習用のデータとして最適化によるポートフォリオの構成比率の決定に用い、後半の 146 週分を評価用のデータセットとし、これを用いてトラッキングエラーの評価をおこなう。カーディナリティの上限値  $k$  は 10 とし、31 銘柄より最大 10 銘柄を選ぶ最適化問題とする。

最適化手法として、4 章で述べた提案手法に加え、既存のベイズ最適化をベースとしたブラックボックス最適化のパフォーマンスの比較評価をおこなった。ベイズ最適化については、ハイパーパラメータ最適化のフレームワークである Optuna<sup>[11]</sup> を利用した。

提案手法では Vector Annealing<sup>[12]</sup> をイジングマシンとして用いた。また、前章までで述べた各種パラメータは次の通りである。各サイクルにおけるサンプリング件数  $N_s = 20$ 、銘柄の構成比率の粒度パラメータ  $N_b = 10$  とする。したがって、決定変数は 341 変数となる。目的関数重み  $\alpha = \alpha_c$ 、制約式重み  $\beta$ ,  $\gamma$  はそれぞれ下記とし、目的関数重みのみサイクルごとに更新する。

$$\alpha_{c+1} = \begin{cases} 10^{-3} & \\ 2.0 \alpha_c & \text{if } A_c \geq 0.8 \\ 0.5 \alpha_c & \text{if } A_c < 0.5 \\ 1.0 \alpha_c & \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

$$\beta = 10^3, \gamma = 10^2$$

ここで  $c (\geq 1)$  はサイクル数、 $A_c$  はサイクル  $c$  で得られた  $N_s$  件のサンプルのうち、制約条件を満たした割合である。制約条件をよく満たす状況下では目的関数の重みを高め、制約条件を満たしにくい状況下では重みを低くするため、各サイクルにおいてなるべく制約を満たすサンプルが得られるように調整される。これにより、効率的に FM の訓練データを得ることが可能になると考えられる。

多段最適化は、5 段階に分けての最適化とした。各段階において考慮する銘柄の数を 31, 25, 20, 15, 10 と徐々に減らし、探索範囲を狭めて最適化をおこなった。銘柄選定部では、各段階の最良のサンプルに含まれる銘柄に加え、

各段階の上位 30 件のサンプルによく含まれる銘柄を選定した。また、各段階のサイクル数は 1~4 段階目は 200 回とし、5 段階目は総処理時間が 1 時間に達するまでとした。

## 5.2 評価結果

各種ブラックボックス最適化手法の最適化の推移を図 3 に示す。縦軸は学習データのトラッキングエラー、横軸は処理時間を表す。提案手法はそれぞれ 10 回試行、ベイズ最適化は 5 回試行し、トラッキングエラーの累積最小値の平均値の推移をプロットした。また、薄く塗りつぶした領域は、平均値±標準偏差の範囲を表す。

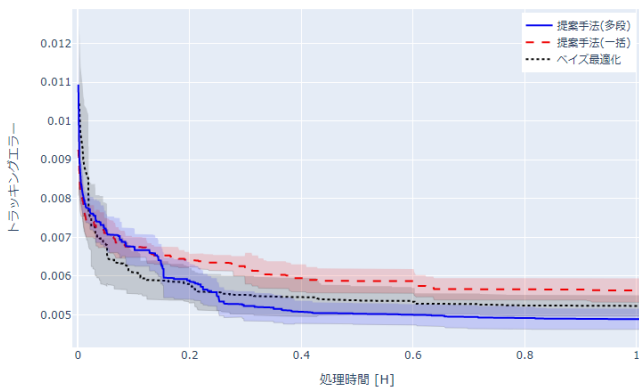


図 2 学習におけるトラッキングエラーの推移

一括最適化と多段最適化は、処理時間 0.15H 程度まではほぼ同じ挙動を示し、それ以降では後者のトラッキングエラーが大きく下がっている。これは、この時点で多段最適化の第 2 段階に入り、入力となる銘柄の数が削減されたことで、効率的な探索が可能になったことに起因すると考えられる。また、ベイズ最適化と提案手法を比較した場合、一括最適化はベイズ最適化と比較して、全体的にトラッキングエラーの値が高い結果となった。多段最適化は、探索の初期の段階ではベイズ最適化よりも高いトラッキングエラーで推移するものの、それ以降は関係性が逆転し、よりトラッキングエラーの小さいポートフォリオを求めている。

表 1 に手法ごとに計算時間 1.0H 時点で得られた最良解のポートフォリオを用いて、評価データのトラッキングエラーの平均値と標準偏差を算出した結果を示す。おおむね学習データと同等のトラッキングエラーを示しており、多段最適化が最も良い値となった。

表 1 評価データのトラッキングエラー

手法	Avg. ± stdev. ( $\times 10^{-3}$ )
提案手法 (一括)	5.63 ± 0.32
提案手法 (多段)	4.89 ± 0.28
ベイズ最適化	5.22 ± 0.32

多段最適化では、探索範囲を段階的に絞り込むため、各試行の各段階において選定される銘柄が異なる可能性がある。これにより結果のばらつきが生じ得るが、標準偏差は他の手法よりも小さく、安定して解を求めている。

いる。これは多段最適化の各段階において、十分に解空間の広範囲を探索できていることによるものと考えられる。

## 6. おわりに

本稿では、ブラックボックス型イジングモデルを用いた最適化によってインデックス・トラッキング・ポートフォリオを生成する手法を提示した。また、本方式を多段化することにより、従来技術よりも優れた結果を示す結果が得られることを示した。

今後の課題は次の 3 点が挙げられる。1 点目は定式化手法のバリエーションである。本稿で取り扱った定式化手法では構成比率の離散化を Log Encoding によっておこなったが、One-Hot Encoding や Unary Encoding などの手法に置き換えることが可能である。これにより性能に違いが生じる可能性がある。2 点目は、問題の大規模化である。今回利用したデータは比較的小規模な 31 銘柄のデータであり、決定変数は 341 変数である。より大きな問題を取り扱うためには、処理速度の高速化、収束までのサイクル数の削減が必要になると推測される。3 点目は、既存手法との比較である。今回は Optuna によるベイズ最適化ベースのブラックボックス最適化を用いたが、Optuna を用いる方法でも多段化は可能と考えられる。今後より精緻な比較検証をしていく予定である。

### 参考文献

- [1] Florian Neukart, Gabriele Compostella, Christian Seidel, David von Dollen, Sheir Yarkoni, Bob Parney “Traffic Flow Optimization Using a Quantum Annealer” Front. ICT, Vol.4, (2017)
- [2] NEC と NEC フィールドエンジニア、量子コンピューティング技術を活用した保守部品の配送計画立案システムを本格導入 [https://jpn.nec.com/press/202209/20220909\\_03.html](https://jpn.nec.com/press/202209/20220909_03.html)
- [3] NEC プラットフォームズ 4 事業所に量子コンピューティング技術を活用した ICT 機器の生産計画立案システムを本格導入 [https://jpn.nec.com/press/202301/20230120\\_02.html](https://jpn.nec.com/press/202301/20230120_02.html)
- [4] Dexiang Wu, Roy H. Kwon, Giorgio Costa, “A constrained cluster-based approach for tracking the S&P 500 index”, International Journal of Production Economics, Vol.193, 222-243 (2017).
- [5] Koki Kitai, Jiang Guo, Shenghong Ju, Shu Tanaka, Koji Tsuda, Junichiro Shiomi, and Ryo Tamura, “Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines”, Phys. Rev. Research 2, 013319 (2020).
- [6] Steffen Rendle, “Factorization Machines”, 2010 IEEE International Conference on Data Mining, Australia, 995–1000 (2010).
- [7] M. W. Johnson, M. H. Amin, S. Gildert, T. Lanting, F. Hamze, N. Dickson, R. Harris, A. J. Berkley, J. Johansson, and P. Bunyk, “Quantum annealing with manufactured spins”, Nature 473, 194 (2011).
- [8] 関優也, 田村亮, 田中宗, “Factorization Machine とイジングマシンを利用した整数変数最適化”, IPSJ SIG Technical Report, Vol.2022-QS-5 No.1 (2022).
- [9] 山下将司, 関優也, 松森唯益, 滝雅人, 門脇正史, 田中宗, “イジングマシンを用いたブラックボックス多目的最適化の性能検証”, IPSJ SIG Technical Report, Vol.2022-QS-5 No.21 (2022).
- [10] J E Beasley, OR-Library, <http://people.brunel.ac.uk/~mastjjb/jeb/orlib/indtrackinfo.html>
- [11] Takuya Akiba, Shotaro Sano, Toshihiko Yanase, Takeru Ohta, Masanori Koyama. Optuna: A Next-generation Hyperparameter Optimization Framework. In KDD, 2623–2631 (2019)
- [12] NEC Vector Annealing サービス, <https://jpn.nec.com/nec-vector-annealing-service/index.html>