数理最適化(主に**連続最適化**)に関する研究

機械学習やデータマイニングから生じる最適化問題をうまく解き、実社会の問題解決に役立てたい

チームの強み:

- A) 非平滑・非凸最適化問題に対する効率的解法
- B) 大規模最適化問題に対するランダム射影法
- C) 不確実性を含んだ問題に対するロバスト最適化法

機械学習やデータマイニング

モデル化

数理最適化問題

$$\begin{aligned} \min. & f(x) \\ \text{s.t.} & g_1(x) \leq 0, \\ & g_2(x) \leq 0, \\ & \dots \end{aligned}$$

解法研究(例):

- 非凸最適化法
- ランダム射影法
- ロバスト最適化法

チームの得意とするところ

A) 非平滑・非凸最適化問題に対する効率的解法

[T. Liu, T.K. Pong, and A. Takeda, *Math. Program.*, 2018]

[T. Liu, T.K. Pong, and A. Takeda, *Comp. Optim. Appl.*, 2019]

以下の非平滑・非凸最適化問題に着目:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x) = f(x) + P_0(x) + \sum_{i=1}^m P_i(A_i x)$$

- F : L -smooth 関数, A_i : 線形写像
- P_i : 近接写像を容易に計算できる固有写像

$m > 0$ かつ一般の線形写像に対して, 既存手法は収束の保証をもたない

Question:

収束の保証をもつアルゴリズムで, P_i の近接写像と ∇f の計算のみにもとづくものをどのように設計するか?

重要な性質: Moreau包絡関数 $e_\lambda P_i(x)$ は difference-of-convex (DC) 関数

$$e_\lambda P_i(x) = \frac{1}{2\lambda} \|x\|^2 - \underbrace{\sup_{y \in \text{dom } P_i} \left\{ \frac{1}{\lambda} \langle x, y \rangle - \frac{1}{2\lambda} \|y\|^2 - P_i(y) \right\}}_{D_{\lambda, P_i}(x)}$$

解法 SDCAM: $\lambda \downarrow 0$ に対して, 以下の問題を $\text{NPG}_{\text{major}}$ (近接写像 P_i の計算に基づく解法) により逐次的に解く

$$F_\lambda(x) = f(x) + P_0(x) + \sum_{i=1}^m e_\lambda P_i(A_i x) = f(x) + \underbrace{\sum_{i=1}^m \frac{1}{2\lambda} \|A_i x\|^2}_{h(x)} + \underbrace{P_0(x)}_{P(x)} - \underbrace{\sum_{i=1}^m D_{\lambda, P_i}(A_i x)}_{g(x)}$$

理論保証:

- SDCAM が生成する列は有界
- ある制約想定のもとで, 集積点が停留点

$$0 \in \nabla f(x^*) + \partial P_0(x^*) + \sum_{i=1}^m A_i^* \partial P_i(A_i x^*)$$

応用:

非凸 fused 正則化問題:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|x - b\|^2 + c_1 \|x\|_1 + c_2 \sum_{i=1}^{n-1} |x_{i+1} - x_i|^{\frac{1}{2}}$$

ただし, b は区分定数スパース信号の(雑音を含む)観測値

Figure 1: Recovery comparison for noisy signal.

B) 大規模最適化問題に対するランダム射影法

[K.K. Vu, P.-L. Poirion, and L. Liberti, *Math. Oper. Res.*, 2018]

$$(P) \begin{cases} \min_x & c \cdot x \\ & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{cases} \quad \text{線形最適化問題の次元を削減したい}$$

$$(P_{T, \theta}) \begin{cases} \min_x & c \cdot x \\ & TAx = Tb \\ & 0 \leq x \leq \theta \end{cases} \quad \begin{array}{l} T \text{ はランダム行列} \\ \text{線形計画問題の制約式をランダムに混ぜる} \end{array}$$

手法の根拠は, Johnson-Lindenstrauss 補題:

n 個の点 $\{x_1, \dots, x_n\} \in \mathbb{R}^d$ を k 次元空間に射影する(ただし, $k = O(\frac{\log(n)}{\epsilon^2})$)

ランダム射影 $T \in \mathbb{R}^{k \times d}$ は

$$(1 - \epsilon) \|x_i - x_j\|_2 \leq \|Tx_i - Tx_j\|_2 \leq (1 + \epsilon) \|x_i - x_j\|_2 \quad (1 \leq i, j \leq n)$$

を高い確率で満たす

測度の集中現象 (Concentration of measure)

n 球体の面積

実験結果:

k	n	δ	ϵ	α	$S_{\text{err}}^{\text{org}}$	$S_{\text{err}}^{\text{prj}}$	CPU ^{org}	CPU ^{prj}
80	320	0.08	0.20	0.02	0	0	1.05	0.56
128	512	0.08	0.20	0.02	0	0	2.72	1.10
216	864	0.08	0.20	0.02	0	0	8.83	2.12
248	992	0.08	0.20	0.02	0	0	12.53	2.53
320	1280	0.08	0.20	0.02	0	0	23.70	3.35
408	1632	0.08	0.20	0.02	0	0	43.80	4.75

C) 不確実性を含んだ最適化問題に対するロバスト最適化法 [A. Miyauchi and A. Takeda, *ICDM2018*]

ネットワーク解析の基本操作である**密グラフ抽出**に着目

実社会の密グラフ:

- SNSの友人・知人グループ
- ウェブグラフの類似ページ
- etc.

ロバスト最密部分グラフ問題

入力: 枝重みが不確実な無向グラフ

出力: **ロバスト比**最大の部分グラフ

- 真の枝重みは不明, 上界と下界が既知
- **最悪の枝重みでの最適値との近さ**

提案アルゴリズム (Algorithm 1)

枝重みをすべて下界に設定し, 最密部分グラフ問題の厳密解法を実行

- 得られるロバスト比の下界を証明
- 理論上最適であることを証明

実験結果 →

- 比較手法よりも高精度
- 大規模グラフにも適用可能

サンプリング・オラクル付きロバスト最密部分グラフ問題

入力: 枝重みが不確実な無向グラフ, **枝重みオラクル**

出力: **ロバスト比**最大の部分グラフ

真の枝重みが**確率的**に手に入ると仮定(実験機器, etc.)

提案アルゴリズム (Algorithm 2)

枝重みオラクルを複数回使用して真の枝重みを推定し, 最密部分グラフ問題の厳密解法を実行

真の枝重みが所与であるときと同等の性能を保証

最密部分グラフ問題

入力: 枝重み付き無向グラフ

出力: 平均(重み付き)次数最大の部分グラフ

- 効率的に解ける(数百万枝のグラフでも解ける)
- 枝重みの情報が厳密に手に入っていることを仮定

実応用では, **不確実な枝重みしか手に入らない**場合が多い

Name	V	E	Random		Algorithm 1		Algorithm 2	
			Ratio	Time(s)	Ratio	Time(s)	Ratio	Time(s)
Karate	34	78	0.99	0.00	1.00	0.00	1.00	0.01
Polbooks	105	441	0.99	0.02	0.98	0.01	1.00	0.06
Adjnoun	112	425	0.91	0.02	0.96	0.02	1.00	0.15
Email	1,133	5,451	0.85	0.82	0.98	0.69	1.00	8.88
Polblogs	1,222	16,714	1.00	1.89	1.00	1.46	1.00	5.33
Wiki-Vote	7,066	100,736	0.96	50.45	0.99	54.27	1.00	201.25
ca-HepPh	11,204	117,619	0.71	32.85	1.00	19.70	1.00	57.05
AS-22July06	22,963	48,436	0.94	2.02	0.99	2.25	1.00	8.40
email-Enron	33,696	180,811	0.95	106.20	1.00	179.63	1.00	374.16
web-Stanford	255,265	1,941,926	1.00	55.27	0.99	47.19	1.00	419.49