2版

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　元 年　 ６ 月 １７ 日現在

機関番号：８２４０１

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：１６Ｋ１６０１１

研究課題名（和文）離散凸解析に基づく機械学習向き汎用離散最適化手法の開発

研究課題名（英文）Discrete Optimization Algorithm for Machine Learning via Discrete Convex Analysis

研究代表者

前原　貴憲（Maehara, Takanori）

国立研究開発法人理化学研究所・革新知能統合研究センター・ユニットリーダー

研究者番号：２０７５１４０７

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　1,900,000円

研究成果の概要（和文）：機械学習において戦略決定・特徴量選択等のために離散最適化問題を解く必要がある．これらの問題によく現れるのが劣モジュラ関数である．劣モジュラ関数は限界効用逓減性とよばれる人間の効用や情報量が自然に満たす性質をもつ関数であり，離散版の凸関数と見なせる関数である．離散凸解析は連続凸関数とのアナロジーを用いて劣モジュラ関数やそれに関連する関数の性質を解析する理論的枠組みである．本研究では離散凸解析の観点から劣モジュラ関数を最適化する機械学習に活用可能なアルゴリズムを提案した．

研究成果の学術的意義や社会的意義
機械学習は近年極めて注目を集めている分野である．深層学習等の予測問題は適当な確率モデルのパラメタ最適化（連続最適化）問題として定式化され，大規模な計算能力の支援のもと確率勾配法などの汎用手法で解かれている．一方で，得られた予測結果から具体的な戦略を定める戦略決定問題や，モデルを圧縮する部分集合選択などは離散最適化問題となるが，これらに対する汎用的な解法は現在のところ存在しない．本研究ではそのような手法の理論基盤を作ることを目的とし，離散凸解析に基づくアルゴリズムを提案した．

研究成果の概要（英文）：Combinatorial optimization problems are required to solve in machine learning applications for, e.g., optimal decision making and feature selection. Submodular functions are a typical class of objective functions appeared in this context. Submodular functions satisfy the diminishing return property, which is a natural property of human utility and information, and are regarded as a discrete analogue of continuous convex functions. Discrete convex analysis is a theoretical framework to analyze the property of submodular functions (and its related class of functions) via the analogy of of convex functions. In this study, we establish a combinatorial optimization algorithm that can be applied to machine-learning problems using the discrete convex analysis.

研究分野：組合せ最適化；機械学習

キーワード：組合せ最適化　離散凸解析　機械学習

１．研究開始当初の背景

機械学習は近年特に注目を集め，成長している分野である．機械学習の多くの問題は**数理最適化問題**で定式化される：深層学習をはじめとする推論問題は適当な確率モデルがもつ連続パラメタを最適化する**連続最適化問題**となり，得られた推論をもとに人間がとるべき戦略を定める最適戦略決定や，推論に関わる変数を削減する微選択の問題は**離散最適化問題**となる．このような形で現れる連続最適化問題に対しては，確率勾配法などの汎用的な最適化手法を大規模な計算機サポートのもとで適用するのが標準的なアプローチとなっている．これらの手法は特定の場合に理論的な保証をもつとともに，実用的には非常にうまくいくことが知られている．一方で，このような形で現れる離散最適化問題に対しては，対応する最適化手法は知られておらずそのような手法は知られていない．機械学習の推論技術が高度化する中，より効果的な離散最適化手法が求められている．

２．研究の目的

本研究では機械学習にあらわれる多くの離散最適化問題に適用可能なアルゴリズムおよび理論的枠組みを提案することを目標とする．特に本研究では機械学習に現れる多くの離散最適化問題は**劣モジュラ関数最適化**問題として定式化できることに注目する．関数 f が劣モジュラであるとは，f が劣モジュラ不等式：任意の X, Y に対して

$$f(X) + f(Y) \geq f(X \cup Y) + f(X \cap Y)$$

を満たすことをいう．劣モジュラ不等式は f の凸性の離散版を表現したものと見ることができる．また，劣モジュラ不等式は以下の**限界効用逓減性**

$$f(X \cup \{e\}) - f(X) \geq f(Y \cup \{e\}) - f(Y), \qquad X \subseteq Y$$

とも同値である．限界効用逓減性は人間の効用関数や情報量が満たす自然な性質であり，凹性のアナロジーと見ることができる．劣モジュラ関数を離散版の凸関数・凹関数とみなし，連続凸関数の理論のアナロジーおよび組合せ的な議論を用いてアルゴリズムおよび理論を確立する分野を離散凸解析という．本研究では離散凸解析的な視点にもとづき，機械学習において現れる離散関数最適化問題に適用可能なアルゴリズムを構築する．

３．研究の方法

本研究は理論研究である．紙とペンによる理論解析と，計算機を用いた計算機実験にて遂行する．

４．研究成果

(1) 離散 DC 計画に関する理論

連続最適化において，**DC 計画**は２つの凸関数の差（difference of convex functions）を最適化する数理計画問題のことをいう．この問題は非常に高い表現力をもつかわりに一般には（近似解を求めることすら）計算困難な問題である．一方，実用的には **DC アルゴリズム**と呼ばれる実用上高速なアルゴリズムが知られており，解きやすいクラスだと認識されている．DC アルゴリズムは機械学習における連続最適化でも用いられている．実際，EM アルゴリズムは DC アルゴリズムの特殊ケースである．報告者は本研究の前年に離散版の DC アルゴリズムの理論を確立した [Maehara and Murota, 2015]．しかしこの理論では扱える関数のクラスに制約があり，より広いクラスの問題へと適用するよう，研究を行った．

本研究で得られた成果 [6] では，離散関数 $f(X) := g(X) - h(X)$ を連続緩和を経由して最適化する理論を確立した．この理論では f を最小化する場合，g が多面体的凸関数へ，h が任意の凸関数へと拡張し（**lin-vex extension**），連続の DC アルゴリズムを適用することでヒューリスティクス解を得る．lin-vex extension について連続緩和の局所最適解は自動的に整数格子点になるため，特に連続解を離散解に丸める手続きは不要である．この手法を具体的な離散最適化問題へと適用し，その有効性を確認した．

本課題についてはいくつか未解決問題が残っている．具体的には離散関数 f のみが与えられたときにどのように g，h へと分解するかや，各 g，h の連続拡張として何を取るべきかなどについて理論的な解は与えられていない．これは引き続き研究を継続していく．

(2) 束上の最適化理論

機械学習における離散最適化問題の代表格は，データのもつ特徴量から効果的な部分集合選択を選び出す**部分集合選択問題**である．これを一般化した問題として，データの特徴量をうまく表現する低次元部分空間を求める問題，すなわち**部分空間選択問題**がある．最も基本的な部分空間選択問題は主成分分析であり，これは貪欲法によって効果的に最適解を求めることができる．また，辞書選択問題も部分空間選択問題の一種であり，貪欲法によって（問題依存の）近似解を得ることができる．

報告者は部分空間選択問題について，どのような目的関数・制約であれば効果的に最適化できるかに注目して研究を行い，[4] の成果を得た．ベクトル空間の部分空間全体は**束**（特にモジュラ束）と呼ばれる代数構造をなす．我々は束における劣モジュラ関数の拡張概念を確立することに成功した．劣モジュラ関数の束への素朴な拡張は [Topkis, 1976] などで既に知られていたが，この定義では主成分分析の目的関数が劣モジュラにならないという問題があった．我々は限界効用逓減性に基づいて劣モジュラ関数を拡張することで，新しい関数クラス **directional DR submodular function** を得た．このクラスは主成分分析の目的関数を含み，かつそれ以外にも様々な機械学習に現れる部分空間選択問題を表現できるものとなっている．

報告者はこの研究の後続研究を進めている段階であり，既に複数の興味深い結果を得ている．これらは 2019 年中に論文誌・査読付き国際会議へと投稿される見込みである．

(3) **クエリ可能最適化の理論**

機械学習に現れる離散最適化問題の多くは，問題を記述するパラメタに不確実性をもつ．たとえば臓器交換の問題は最大マッチング問題として定式化されるが，どの枝が実際に利用できるか（どのペアで臓器が交換できるか）は検査しないとわからないことであり，最適化する際には不確実パラメタとして扱わなければならない．この問題（マッチング問題）に対して [Blum et al., 2015] は**クエリ可能最適化**とよばれる新しい最適化問題を提案した．これは不確実性をもつパラメタに対して**クエリ**を発行することで不確実性を解消できるというものであり，全要素にクエリをして得られる解（全知的最適解）と比較して遜色ない解を少数のクエリで得ようとするものである．

報告者はこの枠組みについて「どのような離散構造であれば効率的なクエリ戦略が存在するか」という点に興味をもち研究を行い [2, 5] の成果を得た．これらの研究ではマッチング問題を一般化した**詰込み型整数計画問題**を考え，効率的なクエリ戦略が存在する十分条件を明らかにした．我々の条件は線型計画緩和問題の双対問題の多面体的構造に基づく新しいものであり，既知の様々な制約条件がこの性質を満たすことを明らかにした．

[3] では [2, 5] とは異なるクエリモデル（確率検査モデル）について，目的関数が劣モジュラかつクエリを行うためにコストがかかる，というモデルを扱い，効用とコストの差を最適化するための理論を提案した．

クエリ可能最適化は現在極めて高い注目を集めているトピックであり，報告者はこの課題に集中して継続研究を行うため，2019 年度より科研費を受領している．引き続き良い成果が得られることが期待できる．

(4) **その他の成果**

上にまとめた物以外にも本研究を通じて様々な成果が得られた．[1] は，十分高い確率で制約条件を満たすような解を探す**チャンス制約付き劣モジュラ関数最大化問題**を扱った．チャンス制約付き最適化問題はリスクを加味した問題であり，機械学習との相性も良いものである．[8] は経済学的な問題を扱っており，各プレイヤーの効用が曲率が定数の劣モジュラ関数で与えられたときに収益を最大にするような**価格付け**を求める問題を扱っている．[7] は**影響最大化問題**とよばれるデータマイニングで広く扱われている離散最適化問題の目的関数（劣モジュラ関数）を二分決定図と呼ばれるデータ構造を用いて効果的に評価する手法を提案した．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計　８件）

以下すべて国際誌・査読有り

[1] Junjie Chen; and Takanori Maehara. Chance-Constrained Submodular Knapsack Problem. In Proceedings of the 25th International Computing and Combinatorics Conference (COCOON 2019), Xian, China, July 29 - 31, 2019, 2019, to appear.

[2] Takanori Maehara; and Yutaro Yamaguchi. Stochastic packing integer programs with few queries. Mathematical Programming, Series A,1-34. March 15 2019.

[3] Ben Chugg; and Takanori Maehara. Submodular Stochastic Probing with Prices. In Proceedings of the 6th International Conference on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT'19), Paris, France, April 23-25, 2019, 2019, to appear.

[4] So Nakashima; and Takanori Maehara. Subspace Selection via DR-Submodular Maximization on Lattices. In Proceedings of the 33rd AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI'19), Honolulu, Hawaii, USA, January 27 - February 1, 2019, 2019.

[5] Takanori Maehara; and Yutaro Yamaguchi. Stochastic Packing Integer Programs with Few Queries. In Proceedings of the Twenty-Ninth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms (SODA'18), New Orleans, LA, USA, January 7-10, 2018, pages 293-310, 2018.

[6] Takanori Maehara; Naoki Marumo; and Kazuo Murota. Continuous relaxation for discrete DC programming. Mathematical Programming Series B, 169(1): 199-219. April 15 2018.

[7] Takanori Maehara; Hirofumi Suzuki; and Masakazu Ishihata. Exact computation of influence spread by binary decision diagrams. In Proceedings of the 26th International Conference on World Wide Web (WWW'17), Perth, Australia, April 3 - 7, 2017, pages 947-956, 2017.

[8] Takanori Maehara; Yasushi Kawase; Hanna Sumita; Katsuya Tono; and Ken-ichi Kawarabayashi. Optimal Pricing for Submodular Valuations with Bounded Curvature. In Proceedings of the 31st AAAI Conference on Artificial Intelligence, February 4-9, 2017, San Francisco, California, USA., pages 622-628, 2017.

〔学会発表〕（計　0　件）

〔図書〕（計　0　件）

〔産業財産権〕
○出願状況（計　0　件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年：
国内外の別：

○取得状況（計　　件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

６．研究組織

(1)研究分担者
研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：
研究者番号（8 桁）：

(2)研究協力者
研究協力者氏名：
ローマ字氏名：

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。