

令和 4 年 6 月 2 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2021

課題番号：17K00032

研究課題名（和文）主双対スパース最適化モデルの構築とその効率的な解法の開発

研究課題名（英文）Developments of primal and dual sparse optimization models and their efficient solution methods

研究代表者

山下 信雄（Yamashita, Nobuo）

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：30293898

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、データ解析、機械学習、金融工学などであられる大規模な最適化問題に対して、主変数および双対変数が疎となる主双対スパースモデルを考え、それに対する効率のよい解法を開発し、いくつかの応用問題に対して適用した。主に二つの主双対スパースモデルを考案し、乗数法およびimplicit programming法に基づく解法を提案した。さらに、この研究で得た知見を、多目的最適化、Levenberg-Marquardt法、多値サポートベクターマシンなどに応用した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

データ解析、機械学習、金融工学などであられる数理最適化問題は年々大規模化している。これまでは、精度の高い解を求めることを諦めて、現実的な時間内で妥当な解を求めていた。本研究では、スパース性を利用して、必要な性質を保存したまま問題規模の縮小が可能であることを示している。この結果は、高精度の解が必要となる応用において大きな意義がある。

研究成果の概要（英文）：In this study, we consider primal-dual sparse optimization models that have sparse primal and dual solutions for large-scale optimization problems in data analysis, machine learning, and financial engineering. We develop efficient solution methods for them. We presented two-type of formulations of the primal-dual sparse models, and proposed solution methods based on the method of multipliers and the implicit programming approach. Furthermore, we applied our findings in this study to multi-objective optimization, the Levenberg-Marquardt method, and multi-valued support vector machines.

研究分野：数理最適化

キーワード：スパース最適化 双対問題

1. 研究開始当初の背景

統計，機械学習，金融工学などでは以下のような数理最適化問題がよくあらわれる．

$$\min \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \theta(x; d^t) + r(x)$$

この問題の決定変数は $x \in R^n$ である． d^t をデータ， T をデータ数， θ をデータへの適合度を表す損失関数， r を正則化関数とすると，機械学習によく現れる問題となる．例えば， $d^t = (a^t, b^t) \in R^{n+1}$ とし， $\theta(x; d^t) = (x \cdot a^t + b^t)^2$ とすれば，データ解析において最も基本的な最小二乗問題となる．

データ解析に現れる問題(1)には，二つの大規模性：データの特徴数 n とデータ数 T がある．データ数 T や特徴数 n が大きくなると，内点法など，ニュートン法に基づく最適化手法が適用できない．一方で最適化モデルによっては，最適解のほとんどの成分が 0 となる(疎になる)ものがあり，その性質を利用した解法が数多く提案されている．主なモデルは以下の二つである．
主スパースモデル：主変数が疎になるモデル(特徴数 n が大きいとき)

特徴数が多いとき，なるべく少ない特徴で推定できれば汎化能力が高まることが知られている．正則化関数 r として L1 正則化(Lasso)や group lasso を採用すると，疎な最適解が得られる．解法の観点からは，0 となる変数は無視することができるため，特徴数が多いときでも効率的に最適解を求めることができる．

双対スパースモデル：双対変数が疎となるモデル(データ数 T が大きいとき)

データには誤差が含まれるので，ほぼ適合できているデータを無視した次の最適化モデルを考える．

$$\min \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \max \{ \theta(x; d^t) - \varepsilon, 0 \} + r(x)$$

このモデルでは $\theta(x; d^t) \leq \varepsilon$ となる，つまりよく適合しているデータ d^t は無視することができる．この考えに従ったモデルの一つがサポートベクターマシン(SVM)である．SVM では r は 2 次関数となり，主変数に疎性を持たせているわけではない．この問題の双対問題の決定変数は主問題のデータに対応しており，その数は T となる．うまく適合している，つまり $\theta(x; d^t) < \varepsilon$ となっているデータに対応する双対変数は 0 となる．つまりこのモデルでは双対変数が疎になる．

これらの既存の 2 モデルは，解法の観点からではなく，応用上の観点から提案されたものであり， T と n どちらか一方の大規模性には対応できるが，両方の大規模性には対応できていなかった．

2. 研究の目的

本研究の目的は，大規模な最適化問題に対して(1) 主問題と双対問題のそれぞれが疎な解(0 が多い解)をもつ数理最適化モデルを構築し，(2)そのモデルの特性を利用した効率のよい解法を開発，さらに(3)それらをビッグデータの解析などに応用することである．信号処理，機械学習，金融工学などの様々な分野に現れる多量なデータを含む大規模な最適化問題では，データの特徴数の疎性(主変数の疎性)，必須のデータ数の疎性(双対変数の疎性)に着目したモデルをおよび解法が構築されている．本研究では，この 2 つの疎性を含むモデルを構築し，ビッグデータを効率的に処理できる最適化手法を開発する．さらに，それらのモデル・手法を実問題に適用し，その有効性を確認する．

3. 研究の方法

研究目的を達成するために、研究を次の3段階にわけて実行する。

第1段階：主双対スパースモデルの構築とその性質の解明

第2段階：主双対スパースモデルの効率的な解法の開発

第3段階：主双対スパースモデルの応用

まず、主双対スパースモデルを構築しその理論的な性質を解明する。特に、スパース性を有しないモデルの解との比較を行う。次に、そのスパース性を有効に活用した解法を開発し、その収束性を解明する。最後に、機械学習、統計、信号処理など、個々の応用問題に対して、主双対スパースモデルを適用し、その妥当性を調べる。

4. 研究成果

(1) 主双対スパースモデルの構築とその性質の解明

主双対スパースモデルとして、以下の二つのモデルを提案した。

$$\min \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T \max \{ \theta(x, d^i) - \varepsilon, 0 \}^p + \tau \|x\|_1$$

$$\min \sum_{i=1}^m \theta(x, \bar{d}^i)$$

$$\text{s.t. } x \in \operatorname{argmin} \left\{ \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T \max \{ \theta(x, d^i) - \varepsilon, 0 \}^p + \tau \|x\|_1 \right\}$$

上のモデルは、計画当初から想定してモデルである。下のモデルはハイパーパラメータチューニングなどを想定した2段階最適化モデルである。これらのモデルに対して、数値実験を通して、主変数の疎性と双対変数の疎性、汎化性の関係を調べた。

また、L1ノルムを含む一般的な正則化関数をもつゲージ最適化問題を考え、その双対問題を提案した。さらに、双対問題の性質および主問題と双対問題の関係を調べた。本研究では、まず、ノルム空間上で定義された問題とその双対問題において強双対性が成り立つ条件を与えた。その結果、従来よりも複雑な不確実性集合をもつロバスト最適化問題を数値的に扱えるようになった。また、一般の凸関数で構成された最適化問題においても、ゲージ最適化問題に等価に変換できることを示した。さらに、その事実を利用することによって、ラグランジュ双対やフェンシエル双対とは異なる方法で、双対問題が構成できることを示した。

(2) 主双対モデルの効率的な解法の開発

上記の(1)で提案した二つのモデルに対して、効率のよい解法を提案した。

上のモデルに対しては、max関数に対して微分可能な関数で近似し、その近似モデルに対して乗数法に基づいたアルゴリズムを提案し、その大域的収束性を示した。提案アルゴリズムは主変数と双対変数のスパース性を考慮することによって、大規模な問題に対しても適用可能である。

下のモデルに対しても、まず、微分可能な関数に近似したモデルを考え、最適性の条件を利用することによって、効率よく近似解を求めることができるアルゴリズムを提案した。

(3) 主双対スパースモデルの応用

本研究の応用として、多目的最適化、非線形方程式、多値のサポートベクトルマシンを考え、それらについて以下の研究成果を得た。

・多目的最適化の主スパースモデルに対して、近接勾配法を開発し、その収束性および計算量を解明した。多目的最適化問題は目的関数を複数持つ最適化問題であり、複数の目的のトレードオ

フの関係を考慮したパレート最適解とよばれる解を求める．単目的な最適化の手法である近接勾配法を多目的最適化に拡張した．その結果，スパースなパレート最適解を求めることを可能になった．さらにその手法が大域的収束し，さらに単目的の最適化と同様の計算量でパレート解が求まることを示した．

さらに L1 正則化を含む多目的最適化問題に対するメリット関数の性質を解明した．特に，双対性を利用した効率的なメリット関数の評価方法を考案した．このメリット関数を用いて，多目的最適化問題に対する近接勾配法の計算量を解析した．

・非線形方程式や最小二乗問題の一般的な解法のひとつである Levenberg-Marquard 法(LM法) に対して，それを一般化したアルゴリズムを考案した．LM法では各反復で制約なしの凸2次計画問題となる部分問題を解く．この部分問題の解は一般にはスパースにならない．そこで，主双対スパースモデルも含む広いクラスの部分問題を利用したLM法の一般化を提案し，その収束性を示した．部分問題が主双対スパースモデルとなるとき，その解がスパースになる．その結果，問題によっては各反復の計算量が大幅に削減できることを数値実験によって確認した．

・サポートベクトルマシンやサポートベクトル回帰問題を多値の場合に拡張し，その双対問題を導出した．さらに，サポートベクトルの数の見積もりを与えた．また，主双対変数のスパース性を利用したアルゴリズムを開発した．

上記の研究のいくつかはすでに論文誌で発表している．そうでないものも，学会発表および論文投稿をする予定である．

上記の研究の多くは，正則化関数として，L1 正則化や group lasso など凸な関数を対象にしていた．本研究期間中には，非凸な正則化関数である $r(x) = \sum |x_i|^q$ ， $q \in (0,1)$ に関する研究の発展があった．今後は，このような非凸な正則化関数をもつ主双対スパースモデルの開発が必要になるであろう．

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 4件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Gu Yan, Yamashita Nobuo	4. 巻 -
2. 論文標題 A proximal ADMM with the Broyden family for convex optimization problems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Industrial & Management Optimization	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3934/jimo.2020091	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Gu Yan, Yamashita Nobuo	4. 巻 40
2. 論文標題 An alternating direction method of multipliers with the BFGS update for structured convex quadratic optimization	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computational and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s40314-021-01467-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kanako Miya, Ellen Fukuda and Nobuo Yamashita	4. 巻 75
2. 論文標題 Nonmonotone line searches for unconstrained multiobjective optimization problems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Global Optimization	6. 最初と最後の頁 63-90
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10898-019-00802-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 山下信雄	4. 巻 64
2. 論文標題 一次法としてみた座標降下法，乗数法，交互方向乗数法	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 オペレーションズ・リサーチ	6. 最初と最後の頁 335-343
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 山下信雄	4. 巻 64
2. 論文標題 連続最適化問題に対する陽に書ける双対問題とその活用事例	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 システム制御情報	6. 最初と最後の頁 104-110
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tanabe Hiroki, Fukuda Ellen H., Yamashita Nobuo	4. 巻 72
2. 論文標題 Proximal gradient methods for multiobjective optimization and their applications	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computational Optimization and Applications	6. 最初と最後の頁 339 ~ 361
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10589-018-0043-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計16件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 堀 篤史
2. 発表標題 確率変分不等式問題に対する分布的ロバスト期待残差最小化モデル
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田辺 広樹
2. 発表標題 多目的最適化問題に対する加速付き近接勾配法
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田辺 広樹, 福田 エレン 秀美, 山下 信雄
2. 発表標題 多目的最適化問題に対する様々なメリット関数とL ₁ 正則化項を含んだ多目的最適化問題に対するメリット関数の効率的な計算方法
3. 学会等名 オペレーションズリサーチ学会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yan Gu and Nobuo Yamahsihta
2. 発表標題 An alternating direction method of multipliers with the BFGS update for structured convex quadratic optimization
3. 学会等名 The Sixth International Conference on Continuous Optimization (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hardik Tankaria and Nobuo Yamashita
2. 発表標題 Non-monotone regularized limited memory BFGS method with line search for unconstrained optimization
3. 学会等名 The Sixth International Conference on Continuous Optimization (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroki Tanabe, Ellen Fukuda and Nobuo Yamashita
2. 発表標題 Multiobjective proximal gradient methods and application to robust multiobjective optimization
3. 学会等名 17th Workshop on Advances in Continuous Optimization (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroki Tanabe, Ellen Fukuda and Nobuo Yamashita
2. 発表標題 Merit functions for nonlinear multiobjective optimization and convergence rates analysis of proximal gradient methods
3. 学会等名 30th European Conference on Operational Research (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 E. H. Fukuda, I. Isonishi and N. Yamashita
2. 発表標題 Solving nonlinear conic programming problems with a new DC approach
3. 学会等名 23rd International Symposium on Mathematical Programming (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田辺 広樹, 福田 エレン 秀美, 山下 信雄
2. 発表標題 多目的最適化問題に対するメリット関数とそれを用いた様々な解析
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2019年春季研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Tanabe, E. H. Fukuda and N. Yamashita
2. 発表標題 A proximal gradient method for multiobjective optimization and application to robust multiobjective optimization
3. 学会等名 Society of Instrument and Control Engineers Annual Conference 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 加茂 寛也, 山下 信雄
2. 発表標題 正斉次最適化問題の一般化とその双対問題
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2018年秋季研究発表会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 引間 友也, 山下 信雄
2. 発表標題 基底追跡ノイズ除去に対する有効制約法
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 関西支部 若手研究発表会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 三田 佳那子, 福田 エレン 秀美, 山下 信雄
2. 発表標題 多目的最適化問題に対する非単調直線探索を用いた降下法とその大域的収束性
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2017年秋季研究発表会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 磯西 市路, 福田 エレン 秀美, 山下 信雄
2. 発表標題 非線形錐計画問題に対する新しいIDC法とその収束性
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2017年秋季研究発表会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 引間 友也, 山下 信雄
2. 発表標題 微分不可能な損失関数をもつL1正則化問題に対する有効制約法
3. 学会等名 第61回システム制御情報学会研究発表講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shota Yamanaka, Nobuo Yamashita
2. 発表標題 Sub-homogeneous optimization problems and its applications
3. 学会等名 SIAM Conference on Optimization 2017
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関