

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 6 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2012

課題番号：22700007

研究課題名（和文） 離散凸性に基づいたアルゴリズム設計とその応用

研究課題名（英文） Theory of algorithms based on discrete convexity and its applications

研究代表者

永野 清仁 (NAGANO KIYOHITO)

東京大学・生産技術研究所・特任助教

研究者番号：20515176

研究成果の概要（和文）：

劣モジュラ関数は離散変数の世界における凸関数と自然にみなすことができる。オペレーションズ・リサーチや機械学習を含む様々な分野において現れる多くの離散最適化問題ならびに連続最適化問題は劣モジュラ最適化問題として定式化される。本研究では、いくつかの劣モジュラ最適化問題に関する構造の解明や理論と実際の両方の意味で効率的に最適解、あるいは最適解に近い近似解を見つけるアルゴリズムの設計を行った。

研究成果の概要（英文）：

A submodular function is a natural discrete analogue of a convex function. A number of discrete and continuous optimization problems in various fields, including operations research and machine learning, can be reduced to submodular optimization problems. In our research, we showed some structure properties and gave efficient algorithms for several submodular optimization problems.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2011年度	900,000	270,000	1,170,000
2012年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総計	3,000,000	900,000	3,900,000

研究分野：情報学基礎

科研費の分科・細目：組み合わせ最適化

キーワード：数理計画，離散凸解析，機械学習

1. 研究開始当初の背景

たくさんの候補の中から最もよいものを見つけることを『最適化』とよぶ。最適化は

現実の問題において数多く現れ、効率的に最適解を見つける方法（アルゴリズム）の設計が重要となる。連続変数を扱う連続最適化においては凸関数の最小化は扱いやすく、効率

的に最適解が計算可能であることが知られている。離散的な対象を扱う離散最適化（または組合せ最適化）においては離散世界における凸最適化といえる、劣モジュラ最適化やその拡張である離散凸解析の理論研究が2000年以降国際的に急速に発達してきていた。そして、このような離散凸最適化手法の様々な分野への応用研究については重要な研究領域であることは認識されつつあったものの、まだまだ多くの課題が残っている未開拓な領域であった。

2. 研究の目的

オペレーションズ・リサーチや機械学習、データマイニングなどの分野において、最適化の理論は大規模なデータを扱うために必要不可欠である。連続変数を扱う連続最適化においては「凸性」が問題の扱いやすさを示唆する基本概念となっている。離散的な対象を扱う、離散最適化の分野において、この凸性と対応する概念が、「劣モジュラ性」である。また、劣モジュラ関数は凸性の文脈のみで重要というわけではなく、グラフ・ネットワークの基本概念など応用数学の分野における様々な概念の抽象化になっている。

本研究では、離散世界における凸最適化といえる、劣モジュラ最適化やその拡張である離散凸解析を中心とした離散凸最適化手法について、その理論的發展とその応用研究に取り組んだ。

3. 研究の方法

離散世界の凸性に対応する劣モジュラ性などの離散凸性に関する最適化の応用研究は近年活発に研究されつつある。抽象的な劣モジュラ関数は、問題をモデル化する上では記述力が高い。しかしその一方で、一般の劣モジュラ関数の関係する離散最適化問題は多項式時間のアルゴリズムは実用上効率が悪い。これはアルゴリズムの計算量が高次の多項式であるためである。

本研究では、理論研究として劣モジュラ最適化に関する理論的な深化・発展に取り組んだ。そして、劣モジュラ最適化問題に対し、劣モジュラ関数の一般理論を用いつつも、個々の問題の構造を利用したアルゴリズムを設計することによって、大規模なデータに対しても適用可能となるようなアルゴリズムの開発に取り組んだ。

4. 研究成果

離散凸最適化手法についてその理論研究とともに、分野横断的な応用研究としてネットワークにおける密構造などを抽出可能なアルゴリズムの開発 (Nagano et al., ICML 2011, 図1上) や、新しい規準に基づいたネットワークなどのデータを最適に分類する手法 (Nagano et al., NIPS 2010, 図1下) を含むアルゴリズム開発を行った。これらの研究成果について述べる。

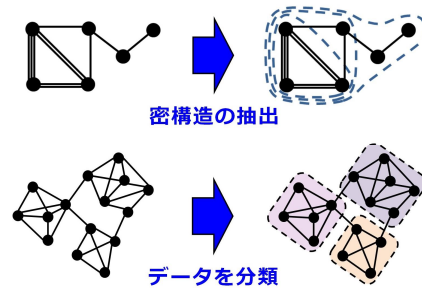


図1 離散凸最適化の応用研究

(1) 劣モジュラ最適化の代表的な応用例としてクラスタリングがある。データ点集合 $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$ が与えられたとき、それらを k 個のクラスタ (同種なデータの集まり) に分けるようなデータ分類の作業をクラスタリングとよぶ。

我々の研究では外れ値への対策としてクラスタサイズのバランスを考慮に入れたクラスタリング問題に対し、その問題を劣モジュラ関数を用いた分数計画問題として定式化した。さらにこの問題に対する近似アルゴリズムを提案し、計算機実験的によい結果が得られることを示した。本結果は河原吉伸氏 (阪大)、岡本吉央氏 (電通大) との共同研究であり、学術雑誌 Pattern Recognition Letters に2011年に出版された。

また、クラスタリングにおいて分割数 k はあらかじめ決定していない場合も多い。我々の研究では劣モジュラ関数を用いて記述されるクラスタリング問題に対し、最適な分割数 k の決定と最適な分割の決定を同時に行う問題を扱い、この問題に対するアルゴリズムを設計した。本成果は河原吉伸氏 (阪大)、岩田覚氏 (東大) との共同研究であり、機械学習の世界最高レベルの国際会議 NIPS 2010 に採択された。

(2) 人間関係やインターネット、道路網など、世の中の様々な現象は抽象的にネットワークとして扱うことができる。ネットワークにおいて密集した部分構造を検出する問題は、人間関係におけるコミュニティ検出やタン

パク質問の相互作用の検出など多くの応用を持つ。

我々の研究ではネットワークの密な部分構造を見つける問題を含む一般的な離散最適化問題である、サイズ制約付き劣モジュラ関数最小化問題を扱った。この問題は離散最適化領域ばかりでなく、機械学習の分野においても重要な問題である。この問題に対し、我々は効率的かつ厳密なアルゴリズムを提案した。本成果は河原吉伸氏（阪大）、合原一幸氏（東大）との共同研究であり、機械学習の世界最高レベルの国際会議 ICML2011 に採択された。

(3) 劣モジュラ関数によって定まる制約下での凸関数の最適化問題は、最適化理論においても、多岐にわたる応用分野においても重要な研究対象である。この問題に対しては理論的にはオペレーションズ・リサーチの分野で古くから研究されており (Fujishige 1980)、同時に近年の機械学習関連分野でも重要性が認識されつつある問題である。例えば我々研究(2)においては、ネットワークにおける密な構造を見つける問題に対し劣モジュラ制約下の凸最適化が有用なアプローチであることを示した。さらに、現在の機械学習において標準的なテクニックである構造的なスパース正則化の文脈においても、劣モジュラ制約下の凸最適化が重要な役割を果たしていることが示されている (Bach 2010, Bach 2011)。

劣モジュラ制約下の凸最適化問題に対し、我々は数学的な構造定理を与え、いくつかの興味深い問題の等価性について示した。加えて、実用上効率的かつシンプルなアルゴリズムを提案した。本成果は合原一幸氏（東京大学）との共同研究であり、Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics に 2012 年 10 月に採択された。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3 件)

① Kiyohito Nagano and Kazuyuki Aihara, “Equivalence of convex minimization problems over base polytopes,” 査読有, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 29 (2012), pp. 519-534.
DOI: 10.1007/s13160-012-0083-z

② 永野清仁 “基礎技術としての劣モジュラ最適化,” 査読無, オペレーションズ・リサーチ, 56 (2011), pp. 27-32.

③ Yoshinobu Kawahara, Kiyohito Nagano, and Yoshio Okamoto, “Submodular fractional programming for balanced clustering,” 査読有, Pattern Recognition Letters, 32 (2011), pp. 235-243.
DOI: 10.1016/j.patrec.2010.08.008

[学会発表] (計 6 件)

① Kiyohito Nagano, Yoshinobu Kawahara, Kazuyuki Aihara, “Size-constrained submodular minimization through minimum norm base,” 21st International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2012), 2012年8月23日, ドイツ ベルリン ベルリン工科大学.

② Kiyohito Nagano, “Exact Approaches to Constrained Submodular Minimization Problems,” ジョージア工科大学 ワークショップ “Modern Aspects of Submodularity,” 招待講演, 2012年3月21日, アメリカ合衆国 ジョージア州 アトランタ ジョージア工科大学.

③ Kiyohito Nagano, “Submodular optimization in clustering problems,” 19th Triennial Conference of the International Federation of Operational Research Societies (IFORS2011), 2011年7月11日, オーストラリア メルボルン.

④ Kiyohito Nagano, Yoshinobu Kawahara, Kazuyuki Aihara, “Size-constrained submodular minimization through minimum norm base,” 28th International Conference on Machine Learning (ICML 2011), 2011年6月30日, アメリカ合衆国 ワシントン州 ベルビュー.

⑤ Kiyohito Nagano, Yoshinobu Kawahara, Satoru Iwata, “Minimum Average Cost Clustering,” 24th Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS2010), 2010年12月7日, カナダ ブリティッシュコロンビア州 バンクーバー.

⑥ Kiyohito Nagano: “Submodular Optimization Based on Combinatorial Convex Structures,” SIAM Conference on Discrete Mathematics, 2010年6月17日, アメリカ合衆国テキサス州 オースティン.

[その他]

ホームページ等

<http://www.sat.t.u-tokyo.ac.jp/~nagano/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

永野 清仁 (Nagano Kiyohito)

東京大学・生産技術研究所・特任助教

研究者番号：20515176