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

平成 29 年　6 月 23 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2013～2016

課題番号：25330025

研究課題名（和文）凸計画問題に対する近接座標勾配法の計算量解析と設計指針の体系化

研究課題名（英文）Study on iteration complexities of proximal coordinate descent methods for the convex optimizaiton

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）　3,800,000円

研究成果の概要（和文）：統計，信号処理，機械学習などに現れる大規模な凸最適化問題に対して，近接勾配法や座標降下法などを一般化した近接座標勾配法を提案した．さらにその手法の収束性の解析をした．特に，大域的収束，一次収束するための条件を与えるとともに，最悪の場合での反復回数の見積もりを与えた．さらに，L1-L2問題や金融工学に現れる実問題に対して適用し，効率よくそれらの問題の最適解が得られることを確認した．

研究成果の概要（英文）：We have proposed the proximal coordinate gradient method for large-scale convex optimization arisen in statics, signal processing, machine learning, and so on. The proposed method is a generalization of a variety of optimization methods, such as the proximal gradient method, the Newton method, and the coordinate descent method. We have investigated convergence properties of the proposed method. In particular we have given sufficient condition under which the proposed method converges globally and linearly. Moreover we have presented its worst iteration complexity. We have applied it to some applications such as the L1-L2 optimization and the portfolio selection problem, and found that the proposed method can find a reasonable solution efficiently.

研究分野：数理最適化

キーワード：凸最適化　近接勾配法　座標降下法

１．研究開始当初の背景

凸最適化問題は以下のように記述される問題である.

$$\begin{array}{ll}\text{Minimize} & f(x)\\ \text{Subject to} & x \in S\end{array}$$

ここで，f は凸関数，S は凸集合である．凸最適化問題は，統計，信号処理，機械学習，金融工学など，様々な分野に現れる重要な問題である．また，エネルギー最適化，交通流均衡の解析にも利用されている．これらの応用問題では変数の数(ベクトル x の次元)が数万にも及ぶことがある．本研究ではそのような大規模な問題を考える.

中小規模の凸最適化問題に対しては，内点法など，ニュートン法に基づく手法が有効である．しかし，上記のような大規模な応用問題に対しては，毎回線形方程式を解かなければならないニュートン法は適用できない．そのため，統計や信号処理などの分野では，線形方程式を解く必要がない最急降下法やそれを発展させた近接勾配法が活発に研究されていた．また，機械学習などにあらわれる特別な制約を持つ凸最適化問題(サポートベクターマシンなど)に対しては，各反復で変数の一部のみを更新する座標勾配法が有効であることが報告されていた．研究開始当初では，このような勾配型の手法はそれぞれ独立に開発・研究されており，統一的な枠組みで考察されていなかった.

一方，凸最適化問題の解法を評価する基準には様々なものがある．古典的な評価基準には，大域的収束や局所的な収束率(１次収束など)があるが，これらの評価基準では，総合的な計算時間を評価できなかった．そこで，解が求まるまでに必要となる計算量の解析が，研究開始のころから，注目を集めていた．しかしながらこれらの解析は個々の手法において個別になされており，統一的には行われていなかった．また，近接勾配法などは，応用問題ごとに，特別な解法が設計されており，理論的に大域的収束を保証するためには特別な知識を必要としていた．そのため，応用範囲が広く，大域的収束するための条件が確認しやすい解法が求められていた.

２．研究の目的

本研究の目的は，(1) 大規模凸最適化問題に対する一般化された勾配法(近接座標勾配法)を提案し，(2)その理論的な収束性，特に大域的収束性，１次収束際，最悪の反復回数を解析し，(3)その解析に基づいた個々の勾配法の設計指針を構築することである．近年，エネルギーの最適化，ビッグデータ解析，金融工学など，様々な分野で大規模凸計画問題を解くことが求められている．それぞれの分野では，個々の問題特性に応じて勾配法が設計され，その計算量の解析がなされている．本研究では，それらの勾配法を統一的に記述できる近接座標勾配法を提案し，その計算量の解析を行う．さらに，その解析結果と(解の要求精度，関数の事前情報などの)個々の問題特性に基づいて，統一に記述された近接座標勾配法をその応用問題に特化して実装し，その有効性を確かめる．また，近接座標勾配法を，オンライン最適化や非凸な最適化問題においても拡張することを考える.

３．研究の方法

従来の最急降下法，ニュートン法，近接勾配法，座標降下法などを包含する，次の近接座標勾配法を考える.

$$\begin{aligned} x^{k+1} = \operatorname{argmin}\{&\nabla f(x^k)^T x + P(x)\\ &+ B_{\psi_k}(x, x^k) \mid x_j = x_j^{\,k},\ j \notin J_k\}\end{aligned}$$

ここで，f は目的関数，P は実行可能集合の表示関数(実行可能解であれば０，それ以外であれば∞となる関数)あるいは正則化項を表す．さらに，B_{ψ_k} は凸関数 ψ_k によって構成された Bregman 関数であり，集合 J_k は反復 k において更新する変数の添字集合である．また，argmin は右辺の最小化問題(以下，部分問題とよぶ)の解を表す．集合 J_k がすべての変数を含み，凸関数 ψ_k が k によらず一定のとき，近接勾配法となる．一方，凸関数 ψ_k が２次関数のとき，座標勾配法となる．線形計画問題に対する単体法もこの枠組みに入るアルゴリズムである．このように，上記の手法は，大規模な凸計画問題に対して，近年，盛んに研究されている近接勾配法と座標勾配法を統一的にあらわしている．近接座標勾配法の収束性を理論的に解明すれば，既存の近接勾配法や座標勾配法だけでなく，それらを融合させたような新しい手法においても同様の収束性を持つことがいえる.

研究代表者は，本研究課題を開始する以前に，特別な問題に対する座標勾配法の１次収束性を示している．また，制約がない微分可能な凸計画問題に対して，Bregman 関数が２次関数である近接座標勾配法(正則化ニュートン法)の計算量解析を行っている．それらの収束理論を一般化することによって，近接座標勾配法の１次収束するための条件を調べる．さらに，計算量解析を行い，より高速に収束するための必要となる Bregman 関数および変更添字集合 J_k の条件を調べる．具体的には以下のことを実施する.

(1) 高速化手法の開発

凸最適化問題に対する近接勾配法や座標勾配法に対しては，Nesterov らによって計算量が著しく減少する高速化手法が提案されている．この手法を，近接座標勾配法に対しても一般化することを考える.

(2) 近接座標勾配法の拡張
従来の近接勾配法や座標勾配法は凸最適化問題に対して研究されている．一方，クラスタリングに現れる混合ガウス分布の最尤推定問題などは，凸最適化問題とはならない．しかしながら，部分問題は凸な問題となることが多い．そのような問題に対して，近接座標勾配法を拡張する．特に，EM アルゴリズム(座標降下法の一種)の一般化を考える．また，大規模なデータ解析においては，すべてのデータを一度に処理するバッチ型手法よりも，データを逐次的に処理するオンライン型手法の方が効率がよいことがある．そこで，そのような応用を見据えて，オンライン型の近接座標勾配法を考える．

(3) 個々の応用問題に対する近接座標勾配法の実装
本研究の提案手法である近接座標勾配法を，機械学習，金融工学，統計，エネルギー最適化などの現れる大規模な凸計画問題に対して実装する．個々の問題は，それぞれ性質(制約の数，目的関数の構造・微分可能性，要求される解の精度)が異なっており，それらの性質に応じて，適切な Bregman 関数，更新添字集合 J_k を選択する．また，実装で最も重要となるのは，近接座標勾配法の部分問題の解き方である．それまでに得られている収束理論と数値実験結果に基づいて，個々の応用問題に対して，最適な部分問題の解法を考案する．

４．研究成果

上記の研究目的に対して，各年度において以下のような研究成果が得られた．

(1) 平成 25 年度
① 近接座標勾配法の １次収束するための条件を与えた．この近接座標勾配法は上記の Bregman 関数を用いたものであり，座標降下法や inexact な座標勾配法を特別な場合として含む一般的なものである．提案手法が，既存の最急降下法や座標勾配法と同等のエラーバウンド性の仮定のもとで１次収束することを示した．この結果は，それまでに知られていた座標降下法が１次収束する条件を緩めるものである．
② 順番に変数を更新するサイクリック型のブロック座標勾配法の計算量解析(最悪の反復回数の見積もり)を与えた． それまでに，サイクリック型のブロック座法勾配法に対しては，その計算量がO(N/e)となることが知られていた．ここで，N はブロックの数(あるいは変数の数)であり，e は求めたい最適解の精度である．これに対して，新しい解析方法を導入することによって，O(sqrt(N)/e)となることを示した．
③ 疎なデータ(0 となる要素が多いデータ)をもつ大規模データ解析に近接勾配法を応用した．そのようなデータの例としてはテキストデータが挙げられる．データ数が多い問題に対しては，すべてのデータを一括で処理するバッチ型の最適化手法よりも，データごとに書類するオンライン最適化手法のほうが効率がよい．そこで，オンライン型の近接勾配法を考え，データの疎性を利用した高速なアルゴリズムを開発した．さらにその計算量が従来のオンライン近接勾配法と同じになることを示した．提案手法をテキストマイニングに適用し， その有効性を確認した．
④ ③のオンライン近接勾配法を金融工学における資産配分問題に応用した．金融工学におけるユニバーサルポートフォリオは単純なオンライン勾配法と同等であることに着目し，正則化項などを加えたオンライン近接勾配法に一般化できることを示した．その結果，従来のユニバーサルポートフォリオで扱えなかったリスク指標を用いたポートフォリオを構築できるようになった．さらに， オンライン近接勾配法の解析手法を援用することにより，提案手法によって構築されたポートフォリオの性質を明らかにした．

(2) 平成 26 年度
① データ解析においては，与えられたデータから，潜在変数をもつ確率モデルのパラメータを最尤推定する問題がしばしば現れる．たとえば，ガウス分布を用いたクラスタリングはそのような問題として定式化できる．このような問題では，期待値計算と最大化を繰り返しおこなう EM アルゴリズムがよく用いられる．その EM アルゴリズムは，ある特別な関数に対して，座標降下法を実施しているとみなすことができる．そのような観点から，最尤推定問題の単純なモデルに正則化や制約条件を加えたより現実的なモデルに対しても，EM アルゴリズムを拡張した近接座標勾配法によって解くことができることを示した．さらに，混合ガウス分布の推定問題において，L1 正則化項や分散共分散行列においてある種の制約条件を加えた場合でも，効率よく解けるアルゴリズムを提案した．さらに数値実験によって，従来の正則化や制約がないモデルと比較して，少ないデータ数でも精度のよい推定が

できることを確認した．

② データ解析における重要な問題のひとつである回帰に対して，サポートベクタ回帰，ガウス回帰などよく利用されるの多くの既存モデルを包含する回帰モデルを提案した．さらにその一般化されたモデルの Fenchel 双対問題に対して，高速化近接勾配法を提案し，数値実験によってモデルの妥当性と，提案手法の高速性を確認した．

(3) 平成 27 年度

① 線形等式制約つきの凸最適化問題に対して，近接座標勾配法を適用する際の，効率的なブロック J_k の構成法の開発した． 前年度までに開発してきた近接座標勾配法は制約なしの凸最適化問題にしか適用できなかった．制約がある問題に対しては，各反復で更新する変数の組を適切に選ばなければ，大域的収束を保証することができない．既存のブロック選択法は，計算量が変数の数の二乗に比例し，大規模な問題では適用することができなかった．そこで， 線形な等式制約があるときに，ブロックの候補を予め列挙し，各反復ではそのブロックの候補集合からブロックを選ぶことを考えた．こうすることによって，各反復では，変数の数の線形時間で適切なブロックを選ぶことができる．さらに，大域的収束を理論的に保証するための列挙基準を提案し，数値実験によって実際に大域的収束することを確認した．しかしながら，この基準では制約条件の情報しか用いていないため， そのまま適用すると，収束が遅くなることもあった．

② 機械学習におけるハイパーパラメータのチューニングに，近接勾配法の一種となる手法を適用した．サポートベクターマシンなど機械学習の多くの数理モデルにおいては，データに直接起因しないモデル特有のパラメータ(ハイパーパラメータ)をもつ．ハイパーパラメータを，最適化するモデルパラメータと同時に最適化を行うと，過学習が起き，予測精度が悪化してしまうことがある．そこで，モデルパラメータとハイパーパラメータの最適化を独立して行う非協力ゲームモデルを考えた．そのモデルは，等価な変分不等式問題として定式化できる．その変分不等式モデルに対して，近接勾配法を適用した．数値実験の結果，少ないデータにおいても過学習せずに，ハイパーパラメータがチューニングできることを確認した．

(4) 平成 28 年度．

① オンライン勾配法の高速化として，分散減少確率勾配法を考え，その効率のよい実装方法を与えた．特に，テキストマイニングなどに現れるスパースなデータに対して，そのスパース性を利用した効率の良い勾配の計算方法を提案した．

② 相関係数を最大化する問題に対して効率的に解くことができる座標降下法を構築した．さらに，金融工学への応用として，以下のようなポートフォリオ最適化を考えた．まず，ポートフォリオの構成と，そのポートフォリオの将来価値と相関の強い経済指標の構成(線形和)を同時に求める問題を相関係数の最大化問題として定式化した．さらに，それを座標降下法によって解くことができることを示した．実際のデータを用いて，その有効性を確認した．

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 8 件）

① Xiaoqin Hua and Nobuo Yamashita, Block coordinate proximal gradient methods with variable Bregman functions for nonsmooth separable optimization, Mathematical Programming, 査読有，160 巻，2016，1-32.
DOI:10.1007/s10107-015-0969-z

② Takayuki Okuno, Shunsuke Hayashi, Nobuo Yamashita and Kensuke Gomoto, An exchange method with refined subproblems for convex semi-infinite programming problems, Optimization Methods and Software，査読有，31 巻，1305-1324, 2016.
DOI:10.1080/10556788.2015.1124432

③ Xiaoqin Hua and Nobuo Yamashita, Iteration complexity of a block coordinate gradient descent method for convex optimization, SIAM Journal on Optimization, 査読有, 25 巻, 2015, 1298-1313.
DOI: 10.1137/140964795

④ Yuya Yamakawa and Nobuo Yamashita, Differentiable merit function for shifted perturbed Karush-Kuhn-Tucker conditions of nonlinear semidefinite programming, Pacific Journal of Optimization，査読有， 11 巻，2015,

549-556.
http://www.ybook.co.jp/online2/oppjo/vol11/p557.html

⑤ Yuya Yamakawa and Nobuo Yamashita, A block coordinate descent method for maximum likelihood estimation problems of mixture distributions, Pacific Journal of Optimization, 査読有, 11巻, 2015, 669-686.
http://www.ybook.co.jp/online2/oppjo/vol11/p669.html

⑥ Yuya Yamakawa and Nobuo Yamashita, A two-step primal-dual interior point method for nonlinear semidefinite programming problems and its superliner convergence, Journal of the Operations Research Society of Japan, 査読有, 57巻, 2014, 105-127.
http://www.orsj.or.jp/~archive/pdf/e_mag/Vol.57_03_04_105.pdf

⑦ Yu-Hong Dai and Nobuo Yamashita, Analysis of sparse quasi-Newton updates with positive definite matrix completion, Journal of the Operations Research Society of China, 査読有, 2巻, 2014, 39-56.
DOI:10.1007/s40305-014-0039-x

⑧ Xiaoqin Hua and Nobuo Yamashita, An inexact coordinate descent method for the weighted L_1-regularized convex optimization problem, Pacific Journal of Optimization, 査読有, 9巻, 2013, 565-594.
http://www.ybook.co.jp/online2/pjov9.html

〔学会発表〕(計 7 件)

① 飯塚 拓矢, 福田 エレン 秀美, 山下 信雄, 非線形 SOCP に対する安定化逐次二次計画法とその超一次収束性について, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2016年度秋季研究発表会, 2016年9月16日.

② 嶋口 未来, 山下 信雄, カーネル回帰のハイパーパラメータ調整に対する変分不等式アプローチ, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2016 年度秋季研究発表会, 2016 年 9 月 16 日.

③ 引間 友也, 山下 信雄, L1 正則化問題に対する有効制約法, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2016 年秋季研究発表会, 2016 年 9 月 16 日.

④ Siti Nor H. B. Hassan, Tomohiro Niimi and Nobuo Yamashita, A method of multipliers with alternating constraints for nonlinear optimization problems, The Fifth International Conference on Continuous Optimization, August 11, 2016.

⑤ Shota Yamanaka and Nobuo Yamashita, Duality of a generalized absolute value optimization problem, The Fifth International Conference on Continuous Optimization, August 9, 2016.

⑥ 濱 功樹, 杉本 真二, 山下 信雄, 大規模な無制約最小化問題に対する正則化 L-BFGS 法, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2015 年秋季研究発表会, 2015 年 9 月 11 日.

⑦ 鋒 幸洋, 山下 信雄, 成分ごとに遅延評価を行う Forward Backward Splitting 法のリグレット解析, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2015 年春季研究発表会, 2015 年 9 月 1 日.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況(計 0 件)

○取得状況(計 0 件)

〔その他〕
ホームページ等
http://www-optima.amp.i.kyoto-u.ac.jp/~nobuo

6. 研究組織

(1)研究代表者
山下 信雄(YAMASHITA, Nobuo)
京都大学・大学院情報学研究科・教授
研究者番号:30293898

(4)研究協力者
DAI, Yu-Hong
中国科学院・教授