集合関数の localizability を用いた局所探索法の近似保証

藤井 海斗

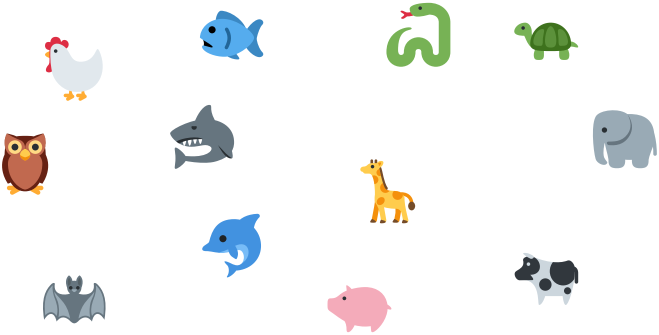
（国立情報学研究所）

IBIS 2020

2020/11/25

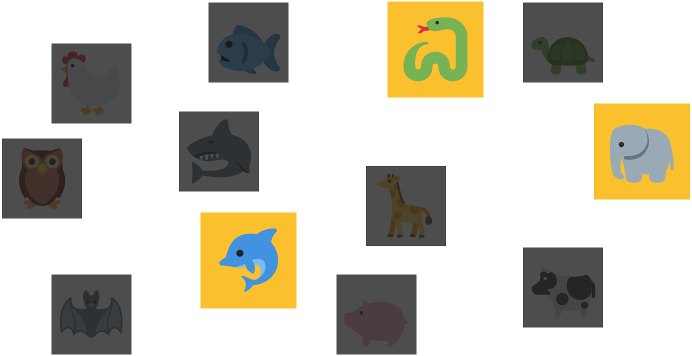
集合関数

それぞれの部分集合に値を割り当てる関数



それぞれの部分集合に値を割り当てる関数

$$f(\{🐬, 🐍, 🐘\}) = 50$$



集合関数

それぞれの部分集合に値を割り当てる関数

$$f(\{🐄, 🦒\}) = 20$$

集合関数最大化

関数値を最大化する部分集合を見つける問題

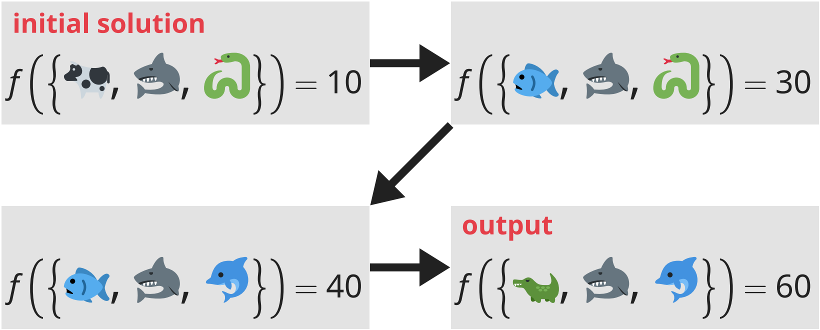
$$\text{Maximize} \quad f(X)$$
$$\text{subject to} \quad X \in \mathcal{I}$$

$f : 2^N \to \mathbb{R}$ 集合関数

N は台集合

局所探索

集合関数最大化などに用いられるアルゴリズム設計法



Q どんな集合関数に対して局所探索がうまくいくのか？

本研究のまとめ

localizability という集合関数の性質を提案

本研究のまとめ

localizability という集合関数の性質を提案

1. 集合関数が localizability を満たすなら
局所探索がよい近似解を出力する

本研究のまとめ

localizability という集合関数の性質を提案

1. 集合関数が localizability を満たすなら
局所探索がよい近似解を出力する

2. スパース最適化の目的関数は localizability を満たす

本研究のまとめ

localizability という集合関数の性質を提案

1. 集合関数が localizability を満たすなら
   局所探索がよい近似解を出力する
2. スパース最適化の目的関数は localizability を満たす
3. スパース最適化に対する局所探索は高速化できる

簡単な設定：要素数制約

要素数 s 以下の最適な部分集合を探す問題

$$\begin{aligned} &\text{Maximize} \quad f(X) \\ &\text{subject to} \quad |X| \leq s \end{aligned}$$

簡単な設定：要素数制約

要素数 s 以下の最適な部分集合を探す問題

$$\text{Maximize} \quad f(X)$$

$$\text{subject to} \quad |X| \le s$$

f の単調性を仮定

i.e. $A \subseteq B \;\Rightarrow\; f(A) \le f(B)$

簡単な設定：要素数制約

要素数 s 以下の最適な部分集合を探す問題

Maximize $f(X)$

subject to $|X| \leq s$

f の単調性を仮定

i.e. $A \subseteq B \Rightarrow f(A) \leq f(B)$

アルゴリズムが α 近似（$\alpha \in [0, 1]$）

$\overset{\triangle}{\Leftrightarrow} \quad f(X) \geq \alpha f(X^*)$,

ただし、X はアルゴリズムの出力、X^* は最適解

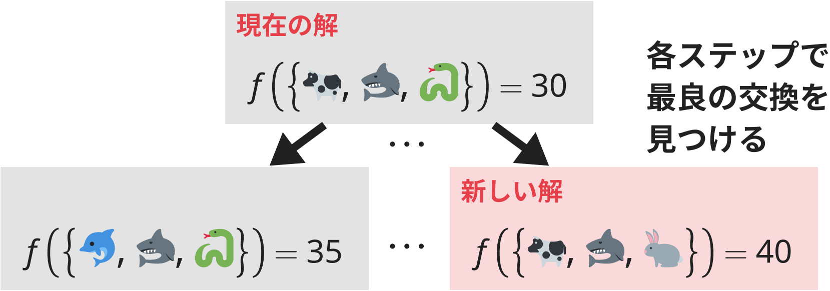
要素数制約のための局所探索

X を任意の極大な実行可能解とする

For $i = 1, \cdots, T$:

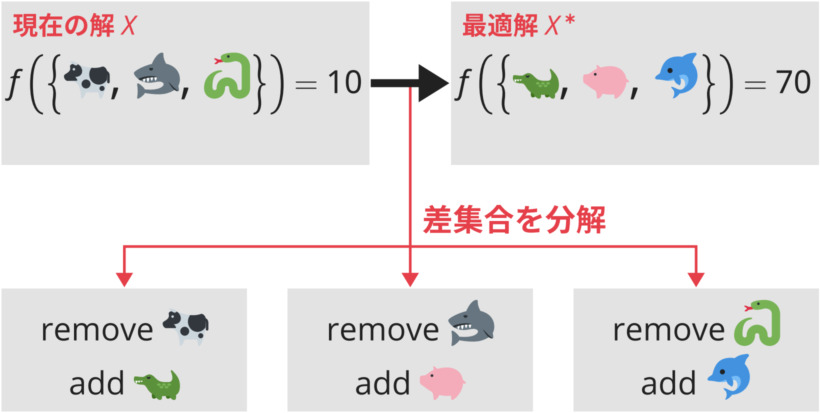
　各 $a \in N \setminus X,\ b \in X$ について $f(X \setminus \{b\} \cup \{a\})$ を計算

　この値を最大化する a と b で X を更新



各ステップで最良の交換を見つける

Localizability (simple version)



f is (α, β)-localizable

$$\overset{\triangle}{\Longleftrightarrow} \quad \sum_{\{i,j\}\in\mathcal{P}} \{f(X \triangle \{i,j\}) - f(X)\} \geq \alpha f(X^*) - \beta f(X)$$

$(\forall X, X^* \subseteq N$ of size at most $s)$

要素数制約に対する近似保証

Theorem

目的関数が (α, β)-localizable なら

局所探索法は $\dfrac{\alpha}{\beta}\left(1 - \exp\left(-\dfrac{\beta T}{s}\right)\right)$ 近似

T 反復回数、s 実行可能解の要素数の最大値

要素数制約に対する近似保証

Theorem

目的関数が (α, β)-localizable なら

局所探索法は $\frac{\alpha}{\beta}\left(1 - \exp\left(-\frac{\beta T}{s}\right)\right)$ 近似

T 反復回数、s 実行可能解の要素数の最大値

よく現れる関数に対する近似保証

	(α, β)	近似比
線形関数	$(1, 1)$	$(1 - \exp(-T/s))$
劣モジュラ関数	$(1, 2)$	$\frac{1}{2}(1 - \exp(-T/s))$

一般的な設定：構造的な制約

Maximize $f(X)$

subject to $X \in \mathcal{I}$

$\mathcal{I} \subseteq 2^N$ は

実行可能な部分集合の族

さまざまな制約のクラス

p 交換システム $\not\subseteq$ $\not\supseteq$ p マトロイド交叉

$\cup\!|$

マトロイド

$\supseteq$ $\cup\!|$

要素数制約

$\mathcal{I} = \{X \subseteq N \mid |X| \leq s\}$

マトロイド

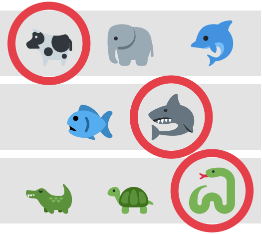
N finite set, $\mathcal{I} \subseteq 2^N$ s.t. $\emptyset \in \mathcal{I}$ and $A \subseteq B \in \mathcal{I} \Rightarrow A \in \mathcal{I}$

$\mathcal{M} = (N, \mathcal{I})$ is a **matroid**

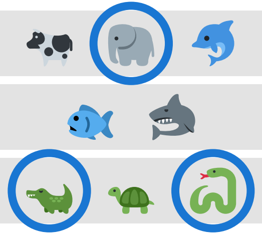
$\Updownarrow$ **def**

$\forall A, B \in \mathcal{I},\ |A| < |B| \Rightarrow \exists i \in B \setminus A,\ A \cup \{i\} \in \mathcal{I}$

例：分割マトロイド



独立



非独立

マトロイド

N finite set, $\mathcal{I} \subseteq 2^N$ s.t. $\emptyset \in \mathcal{I}$ and $A \subseteq B \in \mathcal{I} \Rightarrow A \in \mathcal{I}$

$\mathcal{M} = (N, \mathcal{I})$ is a **matroid**

$\Updownarrow$ **def**

$\forall A, B \in \mathcal{I},\ |A| < |B| \Rightarrow \exists i \in B \setminus A,\ A \cup \{i\} \in \mathcal{I}$

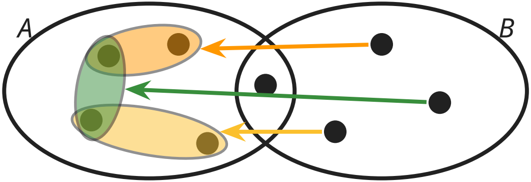
$(N, \mathcal{I})$ is a ***p*-matroid intersection**

$\Updownarrow$ **def**

$\exists (N, \mathcal{I}_1), \cdots, (N, \mathcal{I}_p)$ matroids s.t. $\mathcal{I} = \bigcap_{i=1}^{p} \mathcal{I}_i$

N finite set, $\mathcal{I} \subseteq 2^N$ s.t. $\emptyset \in \mathcal{I}$ and $A \subseteq B \in \mathcal{I} \Rightarrow A \in \mathcal{I}$

$(N, \mathcal{I})$ is a ***p*-exchange system**



⇕ **def**

$\forall A, B \in \mathcal{I}$

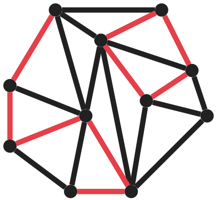
$\exists \phi : B \setminus A \to 2^{A \setminus B}$ s.t.

- For all $B' \subseteq B \setminus A$, $(A \setminus (\bigcup_{v \in B'} \phi(v))) \cup B' \in \mathcal{I}$
- $|\phi(v)| \leq p$ $(\forall v \in B \setminus A)$
- Each $v' \in A \setminus B$ appears at most p sets of $(\phi(v))_{v \in B \setminus A}$

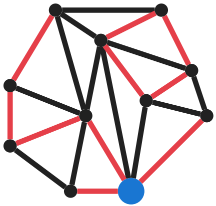
N finite set, $\mathcal{I} \subseteq 2^N$ s.t. $\emptyset \in \mathcal{I}$ and $A \subseteq B \in \mathcal{I} \Rightarrow A \in \mathcal{I}$

$(N, \mathcal{I})$ is a ***p*-exchange system**

例：b マッチング



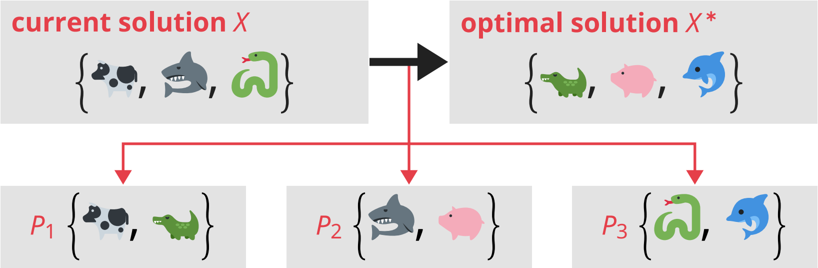
2 マッチング



2 マッチングでない

$\mathcal{I} = \{X \subseteq E \mid \forall v \in V,\ \deg_v(X) \leq b\}$ は 2 交換システム

Localizability (general version)



$\mathcal{P}$ a multiset of 2^N s.t. $\begin{cases} \text{each of } X^* \setminus X \text{ appears } k \text{ times} \\ \text{each of } X \setminus X^* \text{ appears } \ell \text{ times} \end{cases}$

f is $(\alpha, \beta_1, \beta_2)$-localizable

$$\overset{\Delta}{\Leftrightarrow} \quad \sum_{P \in \mathcal{P}} \{f(X \triangle P) - f(X)\} \geq \alpha k\, f(X^*) - (\beta_1 \ell + \beta_2 k)\, f(X)$$

$(\forall X, X^* \subseteq N$ of size at most $s)$

近似保証

Theorem

目的関数が $(\alpha, \beta_1, \beta_2)$-localizable なら

マトロイド 局所探索法は

$$\frac{\alpha}{\beta_1 + \beta_2}\left(1 - \exp\left(-\frac{(\beta_1 + \beta_2)T}{s}\right)\right)$$ 近似

p-MI/p-ES パラメタ $q \in \mathbb{Z}_{>0}$ の局所探索法は

$$\frac{\alpha\left(1 - \exp\left(\frac{(\beta_1(p-1+1/q)+\beta_2)T}{s}\right)\right)}{\beta_1(p-1+1/q)+\beta_2}$$ 近似

q は選べるパラメタ

（各ステップで $n^{O(q)}$ 個の集合を確認しなければならない）

スパース最適化

連続最適化問題のスパースな解を見つける問題

$$\begin{array}{ll} \text{Maximize}_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^n} & u(\mathbf{w}) \\ \text{subject to} & \mathrm{supp}(\mathbf{w}) \in \mathcal{I} \end{array}$$

Notation

- $u\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$　微分可能な連続関数 with $u(\mathbf{0}) \geq 0$
- $N \triangleq \{1, \cdots, n\}$
- $\mathrm{supp}(\mathbf{w}) \triangleq \{i \in N \mid \mathbf{w}_i \neq 0\}$　非ゼロのインデックス

連続最適化問題のスパースな解を見つける問題

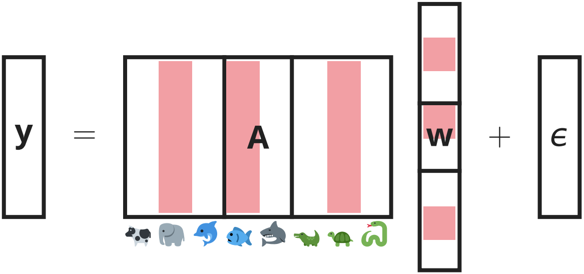
$$\begin{aligned} &\text{Maximize}_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^n} && u(\mathbf{w}) \\ &\text{subject to} && \mathrm{supp}(\mathbf{w}) \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

構造的な制約

Notation

- $u\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$　微分可能な連続関数 with $u(\mathbf{0}) \geq 0$
- $N \triangleq \{1, \cdots, n\}$
- $\mathrm{supp}(\mathbf{w}) \triangleq \{i \in N \mid \mathbf{w}_i \neq 0\}$　非ゼロのインデックス

各分割から一つずつ特徴を選ぶ問題などを含む



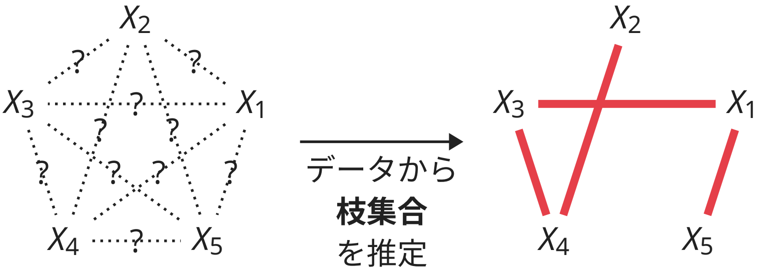
$$
\begin{aligned}
&\text{Maximize} \quad && u_{R^2}(\mathbf{w}) \triangleq 1 - \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{w}\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \\
&\text{subject to} \quad && \operatorname{supp}(\mathbf{w}) \in \mathcal{I}
\end{aligned}
$$

グラフィカルモデルの構造推定

データ $\{\mathbf{x}^1, \cdots, \mathbf{x}^m\} \sim p(\mathbf{x}|\mathbf{w})$ から

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{w}) \propto \exp\left(\sum_{(u,v)\in E} w_{uv}x_u x_v + \sum_{u\in V} w_u x_u\right)$$

スパースなイジングモデルの supp($\mathbf{w}$) を推定



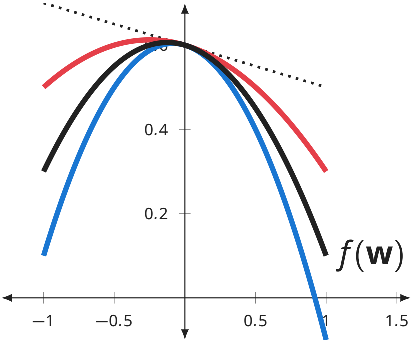
各点の次数の制約は 2 交換システム制約

u は Ω において制限強凹

$$\Leftrightarrow \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega,\ u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x}) - \langle \nabla u(\mathbf{x}), \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle \leq -\frac{m_\Omega}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2$$

u は Ω において制限平滑

$$\Leftrightarrow \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega,\ u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x}) - \langle \nabla u(\mathbf{x}), \mathbf{y} - \mathbf{x} \rangle \geq -\frac{M_\Omega}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|_2^2$$



$\Omega_s = \{\mathbf{x}, \mathbf{y} \mid \|\mathbf{x}\|_0 \leq s,\ \|\mathbf{y}\|_0 \leq s, \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_0 \leq s\}$ における制限強凹定数を m_s

$\Omega_{s,t} = \{\mathbf{x}, \mathbf{y} \mid \|\mathbf{x}\|_0 \leq s,\ \|\mathbf{y}\|_0 \leq s, \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_0 \leq t\}$ における制限平滑定数を $M_{s,t}$ とする

スパース最適化 → 集合関数最大化

supp($\mathbf{w}$) を選択する問題を集合関数最大化とみなす

$$\text{Maximize}_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^n} \quad u(\mathbf{w}) \quad \text{subject to} \quad \text{supp}(\mathbf{w}) \in \mathcal{I}$$

↓ $f_u(X) \stackrel{\triangle}{=} \max_{\mathbf{w}:\, \text{supp}(\mathbf{w})\subseteq X} u(\mathbf{w})$ を定義

$$\begin{aligned} &\text{Maximize}_{X\subseteq N} && f_u(X) \\ &\text{subject to} && X \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

$|P| \le t$ を満たす各交換 $P \in \mathcal{P}$

f_u is $\left(\frac{m_{2s}}{M_{s,t}}, \frac{M_{s,t}}{m_{2s}}, 0\right)$-localizable with size s and exchange size t

スパース最適化に対する近似保証

制約	局所探索法	貪欲法
要素数制約	$\frac{m_{2s}^2}{M_{s,2}^2}(1-\epsilon_1(T))$	$1-\exp\left(-\frac{m_{2s}}{M_{s,1}}\right)$ †
マトロイド	$\frac{m_{2s}^2}{M_{s,2}^2}(1-\epsilon_1(T))$	$\frac{1}{(1+\frac{M_{s,1}}{m_s})^2}$ ‡
p-MI/p-ES	$\frac{1}{p-1+1/q}\frac{m_{2s}^2}{M_{s,2}^2}(1-\epsilon_2(T))$	N/A

$\epsilon_1(T)$ と $\epsilon_2(T)$ は $T \to \infty$ のとき 0 に収束

† [Elenberg–Khanna–Dimakis–Negahban’18]

‡ [Chen–Feldman–Karbasi’18]

高速化

$\operatorname*{argmax}_{a \in N \setminus X, b \in X} f_u(X \setminus \{a\} \cup \{b\})$ の計算には時間がかかる

➡ **f_u の値を近似的に計算することで高速化**

高速化

$\underset{a \in N \setminus X, b \in X}{\operatorname{argmax}} f_u(X \setminus \{a\} \cup \{b\})$ の計算には時間がかかる

➡ f_u **の値を近似的に計算することで高速化**

$\mathbf{w}^{(X)} \in \underset{\mathbf{w}:\, \mathrm{supp}(\mathbf{w}) \subseteq X}{\operatorname{argmax}} u(\mathbf{w})$

semi-oblivious

$\underset{a \in N \setminus X}{\operatorname{argmax}} f_u(X \setminus \{b\} \cup \{a\})$, where $b \in \underset{b \in X}{\operatorname{argmin}} (\mathbf{w}^{(X)})_b^2$

削除する要素を高速に決定

高速化

$\underset{a \in N \setminus X, b \in X}{\mathrm{argmax}}\ f_u(X \setminus \{a\} \cup \{b\})$ の計算には時間がかかる

➡ f_u **の値を近似的に計算することで高速化**

$\mathbf{w}^{(X)} \in \underset{\mathbf{w}:\ \mathrm{supp}(\mathbf{w}) \subseteq X}{\mathrm{argmax}}\ u(\mathbf{w})$

semi-oblivious

$$\underset{a \in N \setminus X}{\mathrm{argmax}}\, f_u(X \setminus \{b\} \cup \{a\}), \text{ where } b \in \underset{b \in X}{\mathrm{argmin}} (\mathbf{w}^{(X)})_b^2$$

削除する要素を高速に決定

non-oblivious

$$\underset{a \in N \setminus X, b \in X}{\mathrm{argmax}} \left\{ \frac{1}{2M_{s,2}} \left(\nabla u(\mathbf{w}^{(X)})\right)_a^2 - \frac{M_{s,2}}{2} \left(\mathbf{w}^{(X)}\right)_b^2 \right\}$$

本研究のまとめ

localizability という集合関数の性質を提案

1. 集合関数が localizability を満たすなら
   局所探索がよい近似解を出力する
2. スパース最適化の目的関数は localizability を満たす
3. スパース最適化に対する局所探索は高速化できる