

集合関数の localizability を用いた 局所探索法の近似保証

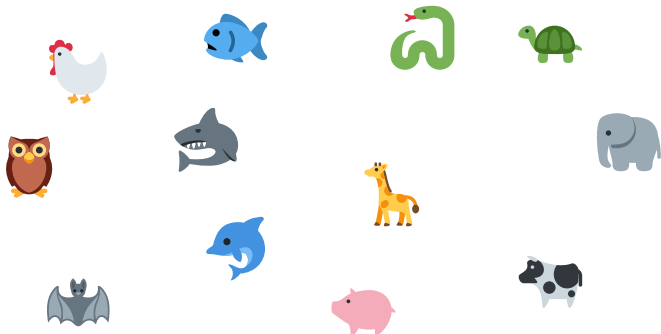
藤井 海斗

(国立情報学研究所)

IBIS 2020

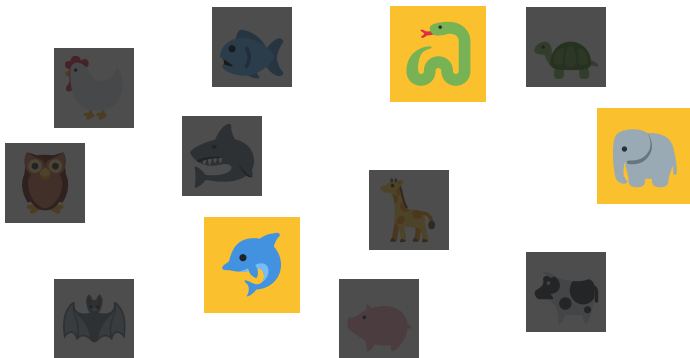
2020/11/25

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

$$f(\{\text{🐟}, \text{🐍}, \text{🐘}\}) = 50$$



それぞれの部分集合に値を割り当てる関数

$$f(\{\text{🐮}, \text{🦒}\}) = 20$$



関数値を最大化する部分集合を見つける問題

Maximize $f(X)$

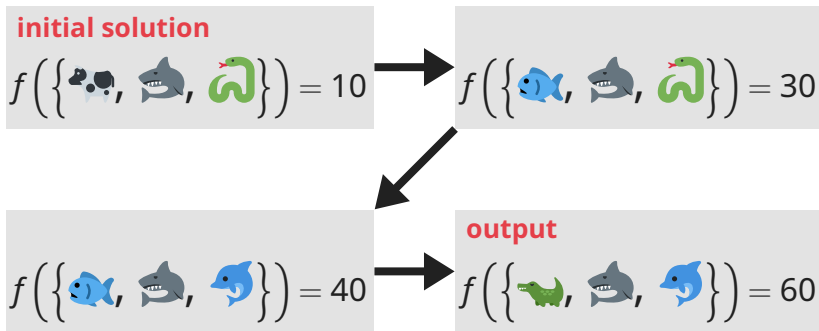
subject to $X \in \mathcal{I}$

$f : 2^N \rightarrow \mathbb{R}$ 集合関数

N は台集合

$$f \left(\left\{ \begin{array}{cccc} \text{bat} & \text{owl} & \text{snake} & \text{turtle} \\ \text{owl} & \text{fish} & \text{snake} & \text{turtle} \\ \text{bat} & \text{shark} & \text{giraffe} & \text{elephant} \\ \text{bat} & \text{dolphin} & \text{giraffe} & \text{elephant} \end{array} \right\} \right) = 50$$

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？

localizability という集合関数の性質を提案

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

localizability という集合関数の性質を提案

- 1 集合関数が localizability を満たすならば
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

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

要素数 s 以下の最適な部分集合を探す問題

Maximize $f(X)$

subject to $|X| \leq s$

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

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 ($\alpha \in [0, 1]$)

$$\triangleq \Leftrightarrow f(X) \geq \alpha f(X^*),$$

ただし、 X はアルゴリズムの出力、 X^* は最適解

X を任意の極大な実行可能解とする

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

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

現在の解

$$f(\{\text{🐼}, \text{🦈}, \text{🐍}\}) = 30$$

各ステップで
最良の交換を
見つける

$$f(\{\text{🐟}, \text{🦈}, \text{🐍}\}) = 35$$

新しい解

$$f(\{\text{🐼}, \text{🦈}, \text{🐰}\}) = 40$$



現在の解 X



$$f\left(\left\{\text{cow}, \text{shark}, \text{snake}\right\}\right) = 10$$

最適解 X^*

$$f\left(\left\{\text{crocodile}, \text{pig}, \text{dolphin}\right\}\right) = 70$$

差集合を分解

remove 
add 

remove 
add 

remove 
add 

f is (α, β) -localizable

\Leftrightarrow

$$\sum_{\{i,j\} \in \mathcal{P}}$$

$$\{f(X \Delta \{i,j\}) - f(X)\} \geq \alpha f(X^*) - \beta f(X)$$

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

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

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	$(1, 2)$	$\frac{1}{2}(1 - \exp(-T/s))$

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

$\not\subseteq$

p マトロイド交叉

$\not\supseteq$

\cup

マトロイド

\cup

\cup

要素数制約

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

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**

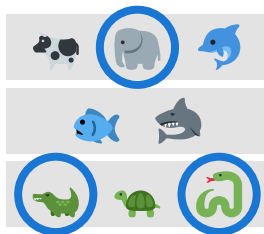
↕ def

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

例：分割マトロイド



独立



非独立

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**

↕ 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**

↕ def

$\exists (N, \mathcal{I}_1), \dots, (N, \mathcal{I}_p)$ 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 $A \subseteq B \in \mathcal{I} \Rightarrow A \in \mathcal{I}$

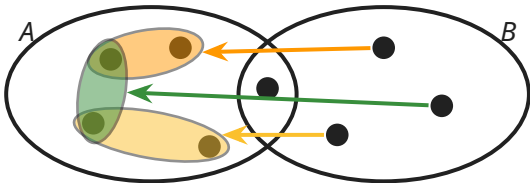
(N, \mathcal{I}) is a **p -exchange system**

↕ def

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

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

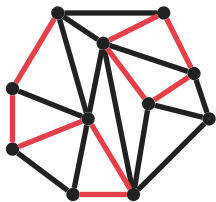
- For all $B' \subseteq B \setminus A$, $(A \setminus (\bigcup_{v \in B'} \phi(v))) \cup B' \in \mathcal{I}$
- $|\phi(v)| \leq p$ ($\forall v \in B \setminus A$)
- Each $v' \in A \setminus B$ appears at most p sets of $(\phi(v))_{v \in B \setminus A}$



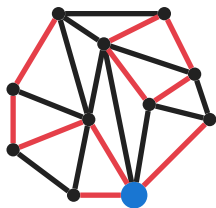
N finite set, $\mathcal{I} \subseteq 2^N$ s.t. $\emptyset \in \mathcal{I}$ and $A \subseteq B \in \mathcal{I} \Rightarrow A \in \mathcal{I}$

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

例： b マッチング

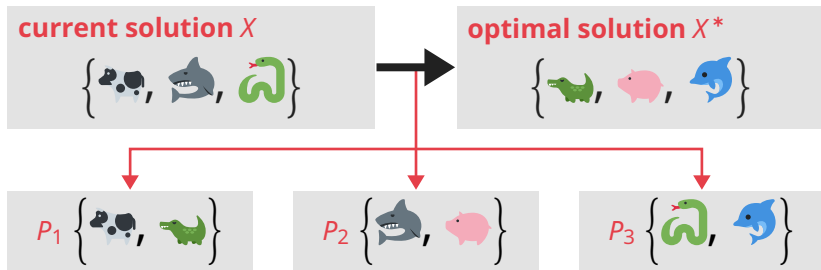


2 マッチング



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



\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

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

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

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

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

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

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

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)

連続最適化問題のスパースな解を見つける問題

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

Notation

- $u: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 微分可能な連続関数 with $u(\mathbf{0}) \geq 0$
- $N \triangleq \{1, \dots, n\}$
- $\text{supp}(\mathbf{w}) \triangleq \{i \in N \mid \mathbf{w}_i \neq 0\}$ 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

Maximize $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ $u(\mathbf{w})$

subject to

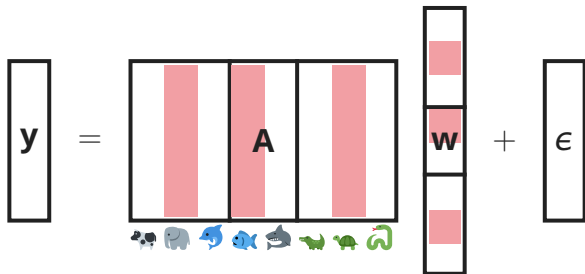
$\text{supp}(\mathbf{w}) \in \mathcal{I}$

構造的な制約

Notation

- $u: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 微分可能な連続関数 with $u(\mathbf{0}) \geq 0$
- $N \triangleq \{1, \dots, n\}$
- $\text{supp}(\mathbf{w}) \triangleq \{i \in N \mid \mathbf{w}_i \neq 0\}$ 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

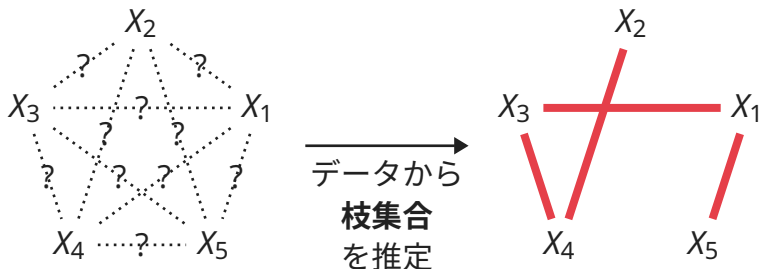


$$\begin{aligned} &\text{Maximize} && U_{R^2}(\mathbf{w}) \triangleq 1 - \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{w}\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \\ &\text{subject to} && \text{supp}(\mathbf{w}) \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

データ $\{\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^m\} \sim p(\mathbf{x}|\mathbf{w})$ 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 $\text{supp}(\mathbf{w})$ を推定



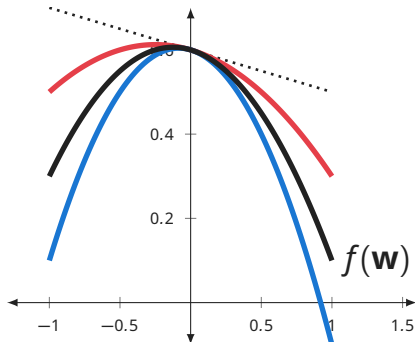
各点の次数の制約は 2 交換システム制約

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

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

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

↓ $f_u(X) \triangleq \max_{\mathbf{w}: \text{supp}(\mathbf{w}) \subseteq X} u(\mathbf{w})$ を定義

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

$|P| \leq t$ 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

制約	局所探索法	貪欲法
要素数制約	$\frac{m_{2s}^2}{M_{s,2}^2} (1 - \epsilon_1(T))$	$1 - \exp\left(-\frac{m_{2s}}{M_{s,1}}\right) \dagger$
マトロイド	$\frac{m_{2s}^2}{M_{s,2}^2} (1 - \epsilon_1(T))$	$\frac{1}{\left(1 + \frac{M_{s,1}}{m_s}\right)^2} \ddagger$
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 $T \rightarrow \infty$ のとき 0 に収束

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

‡ [Chen–Feldman–Karbasi’18]

$\operatorname{argmax}_{a \in N \setminus X, b \in X} f_u(X \setminus \{a\} \cup \{b\})$ 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

$\operatorname{argmax}_{a \in N \setminus X, b \in X} f_u(X \setminus \{a\} \cup \{b\})$ 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

semi-oblivious

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

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

削除する要素を高速に決定

$\operatorname{argmax}_{a \in N \setminus X, b \in X} f_u(X \setminus \{a\} \cup \{b\})$ 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

semi-oblivious

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

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

削除する要素を高速に決定

non-oblivious

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

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