統計数理研究所 75 周年記念事業（2019）

制約付き非凸スパース最適化問題に対する DC アルゴリズム

DC Algorithm for Constrained Nonconvex Sparse Optimization

数理・推論研究系 田中 未来 (Mirai Tanaka)

1. 制約付き非凸スパース問題

近年, 統計数理のさまざまな分野において Lasso をはじめとするスパース最適化の研究が進められている．本稿では制約領域 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 上における損失関数 $l(\boldsymbol{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ とスパース正則化関数 $r(\boldsymbol{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ の和を最小化する問題

$$\text{最小化} \quad l(\boldsymbol{x}) + r(\boldsymbol{x}) \quad \text{制約条件} \quad \boldsymbol{x} \in S \tag{1.1}$$

に対する効率のよいアルゴリズムを提案した著者らの論文（Tanaka and Takeda, 2018）を紹介する．

以下では l, r, S について以下のような仮定をおく．まず l については連続的微分可能であることと, ある $L \in \mathbb{R}_+$ が存在して $(L/2)\|\boldsymbol{x}\|_2^2 - l(\boldsymbol{x})$ が凸関数となることを仮定する．次に r については連続であることと, ある $\lambda \in \mathbb{R}_+$ が存在して $\phi(\boldsymbol{x}) := \lambda\|\boldsymbol{x}\|_1 - r(\boldsymbol{x})$ が凸関数となることを仮定する．後者の仮定は多くのスパース正則化関数が満たすものである．さらに $l + r$ が下に有界であることと S が空でない凸集合であることを仮定する．以上の仮定をおいたとしても問題（1.1）は符号制約付き回帰, 主成分分析, 標準単体上の最小 2 乗問題, C-SVM の双対問題などを含むさまざまな問題のスパースな解を求める問題に対応する．しかしながら問題（1.1）は制約付き非凸最適化問題であり, 一般に大域的最適解を求めることは難しい．以下では問題（1.1）の停留点を効率よく求める DC アルゴリズムについて述べる．

2. DC アルゴリズムとその各反復で解く子問題

2 つの凸関数 $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ について, これらの差を最小化する問題

$$\text{最小化} \quad g(\boldsymbol{x}) - h(\boldsymbol{x}) \tag{2.1}$$

を DC 最適化問題と呼ぶ．この問題の停留点を求めるために DC アルゴリズム (アルゴリズム 1) がよく用いられる．このアルゴリズムは緩やかな仮定の下で DC 最適化問題の停留点に収束する点列を生成する．

アルゴリズム 1 問題（2.1）に対する DC アルゴリズム

1: 適当な初期点 $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ をとる．
2: **for** $t = 0, 1, \ldots$ (収束するまで)
3: h の劣勾配 $\boldsymbol{s}^{(t)} \in \partial h(\boldsymbol{x}^{(t)})$ を求める．
4: $\boldsymbol{x}^{(t+1)} \in \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{x}}\{g(\boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{s}^{(t)})^\top \boldsymbol{x}\}$ と更新する．

問題（1.1）を DC 最適化の枠組みで解くために, 次のように凸関数 g, h を定める:

$$g(\boldsymbol{x}) = \frac{L}{2}\|\boldsymbol{x}\|_2^2 + \lambda\|\boldsymbol{x}\|_1 + \delta(\boldsymbol{x} \mid S), \qquad h(\boldsymbol{x}) = \frac{L}{2}\|\boldsymbol{x}\|_2^2 - l(\boldsymbol{x}) + \phi(\boldsymbol{x}).$$

ここで $\delta(\boldsymbol{x} \mid S)$ は $\boldsymbol{x} \in S$ のときに 0, そうでないときに $+\infty$ をとる関数である. このように g, h を定めると問題（1.1）を DC 最適化問題（2.1）に帰着できる.

問題（1.1）に対する DC アルゴリズムの各反復では次の子問題を解く:

$$\text{最小化} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{v}\|_2^2 + \gamma\|\boldsymbol{x}\|_1 \quad \text{制約条件} \quad \boldsymbol{x} \in S. \tag{2.2}$$

この子問題を高速に解くことができるとき, DC アルゴリズムは全体として高速なものとなる.

著者らは次の 4 つの場合について子問題 (2.2) の最適解ないしその近似が効率よく計算できることを示した. 1 つ目は S が超直方体 $\{\boldsymbol{x} : \underline{\boldsymbol{x}} \leq \boldsymbol{x} \leq \bar{\boldsymbol{x}}\}$ の場合である. この場合は簡単な解析により子問題 (2.2) の最適解を陽に書き下すことができる. また, S が ℓ_2 ノルム球 $\{\boldsymbol{x} : \|\boldsymbol{x}\|_2^2 \leq 1\}$ の場合についても最適解を陽に書き下すことができる. S が標準単体 $\{\boldsymbol{x} : \mathbf{1}^\top\boldsymbol{x} = 1, \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}\}$ の場合, 子問題（2.2）は $\boldsymbol{v}$ の標準単体への射影の計算となるので, 既存の $O(n)$ 時間アルゴリズムを用いることができる. 著者らが解析した S の中で最も興味深いものは箱型制約に単一線形制約が付加した $\{\boldsymbol{x} : \boldsymbol{a}^\top\boldsymbol{x} = b, \underline{\boldsymbol{x}} \leq \boldsymbol{x} \leq \bar{\boldsymbol{x}}\}$ である. 著者らは対応する子問題に対する 2 分探索に基づく多項式時間アルゴリズムを構築した.

3. 計算機実験

制約付き非凸スパース最適化問題に対する既存の DC アプローチ（Tono et al., 2017）との比較実験の結果の一部として, ある問題例をそれぞれの手法で解いたときの解パスの比較を図 1 に示す. 既存手法はパラメータ λ の値を大きくとっても厳密にスパース解を出力したとは言えないのに対し, 著者らによる提案手法は $\lambda > 2$ で厳密なスパース解を出力した. また, 詳細は割愛するが, 著者らによる提案手法は既存手法や汎用ソルバと比べて高速に優れた解を出力した.

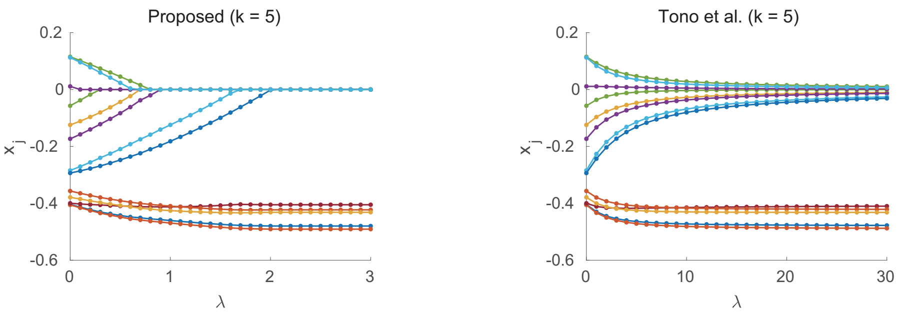

図 1: 解パスの比較 (左: 著者らによる提案手法によるもの, 右: Tono et al.（2017）による既存手法によるもの)

参 考 文 献

Tanaka, M. and Takeda, A. (2018). Efficient iterative algorithm for constrained nonconvex sparse optimization, submitted.

Tono, K., Takeda, A. and Gotoh, J. (2017). Efficient DC algorithm for constrained sparse optimization, arXiv:1701.08498v1.