劣モジュラ関数最大化問題に対する効率的な分枝カット法

05000831　大阪大学・理研AIP　*植松直哉　UEMATSU Naoya
01014954　大阪大学・理研AIP　梅谷俊治　UMETANI Shunji
九州大学・理研AIP　河原吉伸　KAWAHARA Yoshinobu

1. 研究の背景と目的

計算機科学の問題では，関数の値を最大にするような部分集合を全体集合から選択するという問題が存在する．そのような問題の関数のいくつかは、劣モジュラ性を持つということが知られている．劣モジュラ関数最大化問題は，センサ配置問題，影響最大化，特徴選択問題など，多くの社会問題に現れる．劣モジュラ関数[2]は集合関数における凸性にあたる離散構造であり，$f(S \cup \{i\}) - f(S) \geq f(T \cup \{i\}) - f(T)$を満たす．ここで，$N = \{1, \ldots, n\}$, $S \subseteq T \subseteq N$, $i \in N \setminus T$ である．つまり，包含関係にある２つの集合SとTに関して，包含される集合Sへ新しい要素iを加えた際の増分が，包含する集合Tの場合のそれより大きくなる．劣モジュラ関数は，解の大きさとともに目的関数値の増加が穏やかになる性質を持っており，限界効用逓減の法則を表す関数としても知られる．任意の$S \subseteq T (\subseteq N)$に対して，集合関数が$f(S) \leq f(T)$ を満たすとき，関数fは，単調非減少であると言う．本稿では，$f : N \to \mathbb{R}$を劣モジュラ関数とした場合，位数制約下での単調非減少劣モジュラ関数最大化について議論する．

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & f(S) \\ \text{subject to} & |S| \leq k,\ S \subseteq N. \end{array} \tag{1}$$

ここで，$k \leq n$ は正の整数である. この劣モジュラ最大化問題は，NP困難と知られている．

Nemhauser とWolsey [3]は，貪欲法が最悪の場合でも最適解の$(1 - 1/e)(\approx 0.63)$ 倍の値を持つ近似解を得られることを示した． Minoux [4] の貪欲法の計算を効率化した手法も知られている．劣モジュラ関数最大化の多くの応用事例において貪欲法は短時間で良い近似解を与えるが，時間をかけて最適解やより良い近似解を求めたい事例(例えば，特徴選択問題やセンサ配置問題)も少なくない．

2. 既存の厳密解法

2.1. A*探索法

近年，Chen等 [1]が単調非減少の劣モジュラ関数最大化問題に対して，最適解を見つけるA*探索法を提案した．彼らの手法は変数固定の一種であり，計算量$O(n)$で各節点における最適値の上界を求める．SakaueとIshihata [5]は，ナップサック制約下での非単調減少の劣モジュラ関数最大化問題に対して，各節点において貪欲法と同じ計算量かけることにより，そのA*探索アルゴリズムを改良した．その2つの手法は，各節点における最適値の上界を短時間で求めることが可能な一方，その上界が良くないことが多いため，探索木の節点を効果的に刈り込むことができない．そのため，最適解を得るまでに膨大な数の節点を走査する必要が生じることも少なくない．

2.2. 制約生成法

NemhauserとWolsey [3]は，問題(1)を膨大な制約式を含む以下の整数計画問題(2)に定式化した．

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & z \\ \text{subject to} & z \leq f(S) + \displaystyle\sum_{i \in N \setminus S} f(\{i\} \mid S)\, y_i,\ S \in F, \\ & \displaystyle\sum_{i \in N} y_i \leq k, \\ & y_i \in \{0, 1\},\ i \in N, \end{array} \tag{2}$$

ここで，$f(T \mid S) = f(T \cup S) - f(S)$, Fは位数制約$|S| \leq k$を満たす全ての実行可能解からなる集合である．整数計画問題(2)は$\binom{n}{k}$本以上の制約式を持ち，その数は問題規模nに対して指数的に増加する．そこで，彼らは一部の制約式からなる整数計画緩和問題BIP(Q) $(Q \subseteq F)$を用いた制約生成法(CG)を提案した． BIP(Q)を解くと，その最適解Sと最適値zが得られ，それぞれ問題(1)の実行可能解と最適値の上界となる．制約生成法は，整数計画緩和問題BIP(Q)を解いて，その最適解Sから導かれる新しい制約式を集合Qに加える手続きを，上界と下界が一致するまで繰り返す．

制約生成法$(S^{(0)})$

Input: 初期実行可能解 $S^{(0)}$.

Output: 最適解 S^*.

Step 1: $Q \leftarrow S^{(0)}$, $S^* \leftarrow S^{(0)}$, $t \leftarrow 1$に設定する．

Step 2: BIP(Q)を解く． $S^{(t)}$と$z^{(t)}$は，それぞれBIP(Q)の最適解と最適値とする．

Step 3: $f(S^{(t)}) > f(S^*)$ならば，$S^* \leftarrow S^{(t)}$.

Step 4: $z^{(t)} = f(S^*)$ならば，最適解S^*を出力し停止する．そうでなければ， $(z^{(t)} > f(S^*) \geq f(S^{(t)})$より), $Q \leftarrow$

$Q \cup \{S^{(t)}\}$, $t \leftarrow t+1$に設定しStep 2へ戻る．

各反復で1つの制約式しか生成しないため，最適値が求まるまで多数の整数計画緩和問題を解く必要があるため実際には効率的ではない．

3. 提案手法

BIP(Q)解いた後，その最適値 $z^{(t)}$を達成する実行可能解$S^{\natural} \in Q$が少なくとも1つ存在する．

$$z^{(t)} = f(S^{\natural}) + \sum_{i \in N \setminus S^{\natural}} f(\{i\} \mid S^{\natural})\, y_i^{(t)}. \tag{3}$$

BIP(Q)の最適解$S^{(t)}$に対応する2値ベクトル$\boldsymbol{y}^{(t)}$とする．$S^{\natural}$に要素$j \in S^{(t)} \setminus S^{\natural}$を加えると，劣モジュラ性より以下の式を得る．

$$\begin{aligned} z^{(t)} &= f(S^{\natural}) + \sum_{i \in N \setminus S^{\natural}} f(\{i\} \mid S^{\natural})\, y_i^{(t)} \\ &= f(S^{\natural}) + f(\{j\} \mid S^{\natural})\, y_j^{(t)} + \sum_{i \in N \setminus (S^{\natural} \cup \{j\})} f(\{i\} \mid S^{\natural})\, y_i^{(t)} \\ &= f(S^{\natural} \cup \{j\}) + \sum_{i \in N \setminus (S^{\natural} \cup \{j\})} f(\{i\} \mid S^{\natural})\, y_i^{(t)} \\ &\geq f(S^{\natural} \cup \{j\}) + \sum_{i \in N \setminus (S^{\natural} \cup \{j\})} f(\{i\} \mid S^{\natural} \cup \{j\})\, y_i^{(t)}. \end{aligned} \tag{4}$$

ここで，$j \in S^{(t)}$より$y_j^{(t)} = 1$となることに注意する．式(4)を用いて，複数の新しい制約式$S' \subseteq S^{(t)} \cup S^{\natural}$を生成するヒューリスティクスを組み込んだ改良制約生成法(ICG)を提案した．また，この改良制約生成法を組み込んだ分枝カット法(BC-ICG)を提案した．さらに，下界を改善するために局所探索法を組み込んだ分枝カット法(BC-ICG+)も提案した．

4. 実験結果

センサ配置問題，重み付き被覆問題，二部グラフ影響最大化問題を3つの既存手法(A*-MOD, A*-DOM, CG)と3つの提案手法(ICG, BC-ICG, BC-ICG+)を用いて厳密に解いた．図1は，センサ配置問題の例に対して，制約生成法(CG)と改良制約生成法(ICG)により得られる上界と下界の時間の経過にともなう変化を表している．実行可能解を生成していることにより良い下界を得ることにも貢献していることがわかる．図2は，3つの既存手法(A*-MOD, A*-DOM, CG)と3つの提案手法(ICG, BC-ICG, BC-ICG+)に対するperformance profileである．提案手法のBC-ICG, BC-ICG+は，ratio ≈ 4で，140問以上(全150問)を厳密に解いていることがわかる．図1,2より，提案手法が既存の制約生成法(CG)より良い結果を示している．詳細な結果 [7]については，紙面の都合上発表会当日に報告する．

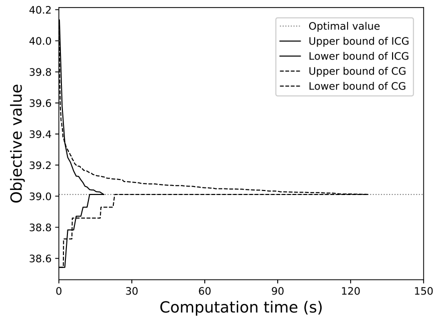

図1　CGとICGの上界と下界の時間の経過にともなう変化

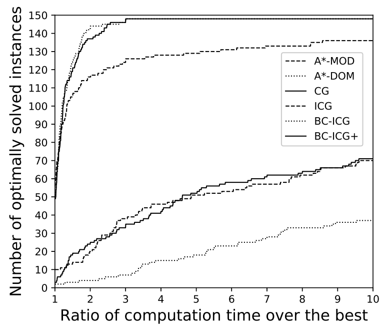

図2　各手法のperformance profile

参考文献

[1] W. Chen. and Y. Chen, and K. Weinberger, Filtered search for submodular maximization with controllable approximation bounds, *Proceedings of AISTATS'15*, 156–164, 2015.

[2] L. Lovasz, Submodular functions and convexity, A. Bachem, M. Grotschel, and B. Korte (eds.), *Mathematical Programming: The State of the Art*, Springer, Berlin, 235–257, 1983.

[3] G. L. Nemhauser, L. A. Wolsey and M. L. Fisher, An analysis of approximations for maximizing submodular set functions I, *Mathematical Programming*, **14** (1978), 265–294.

[4] M. Minoux, Accelerated greedy algorithms for maximizing submodular set functions, *Lecture Notes in Control and Information Sciences*, **7** (1978), 234–243.

[5] S. Sakaue and M. Ishihata, Accelerated best-first search with upper-bound computation for submodular function maximization, *Proceedings of AAAI-18*, 1413–1421, 2018.

[6] G. L. Nemhauser and L. Wolsey, Maximizing submodular set functions: Formulations and analysis of algorithms, *Studies on Graphs and Discrete Programming*, **11** (1981), 279–301.

[7] N. Uematsu, S. Umetani and Y. Kawahara, An efficient branch-and-bound algorithm for submodular function maximization, https://arxiv.org/abs/1811.04177