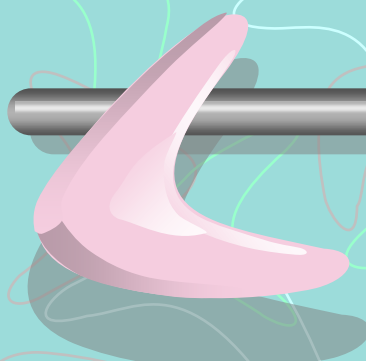


組み合わせ論的 オンライン予測問題



九州大学 システム情報科学研究所

瀧本 英二



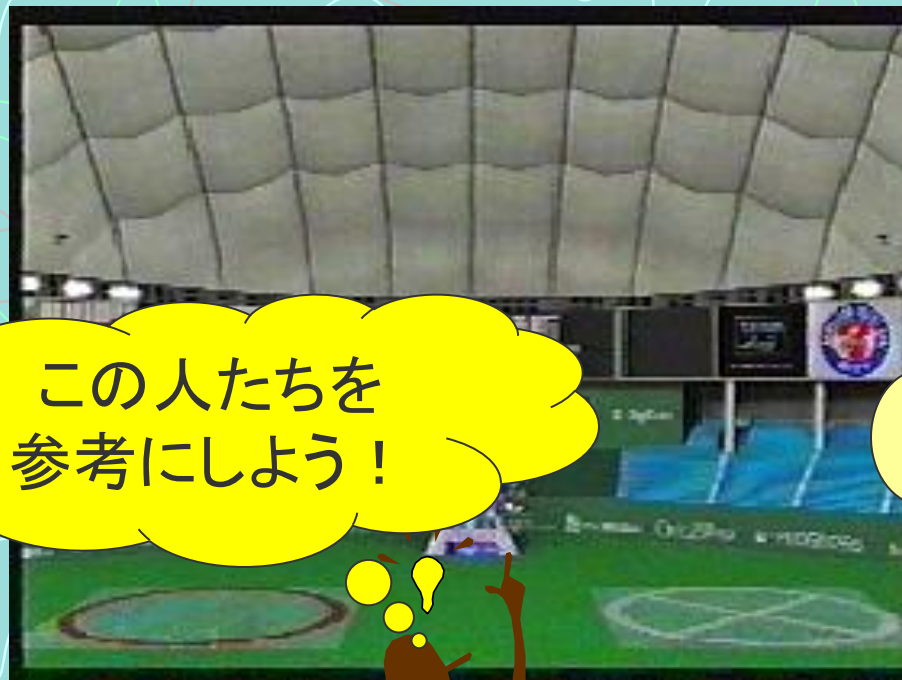
もくじ

1. エキスパート統合モデルについて
 - 二分法
 - 重みつき平均アルゴリズム
2. モデルの拡張
 - バンディット問題
 - オンライン凸最適化問題
3. 組み合わせ論的オンライン予測
 - 一般化ピタゴラスの定理
4. さらなるモデルの拡張に向けて

「タイガーウッズは寅年生まれである. ○か×か？」



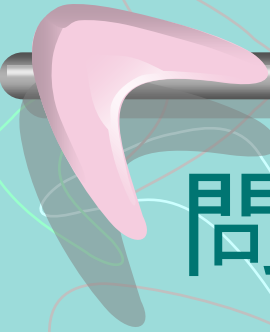
迷う参加者たち



この人たちを
参考にしよう!



クイズ王達
発見!!



問題設定

- クイズは全部で100問
- クイズ王(**エキスパート**)は8人
- エキスパート達の答えを見てから自分の答えを決められる
- 正解数の上位者が次ラウンドに進出
- エキスパート達の答えをどのようにして**統合**すれば良いか？

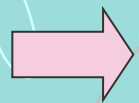


問題設定(入門編)

仮定:「エキスパート8人のうち、少なくとも1人は全問正解する」とする

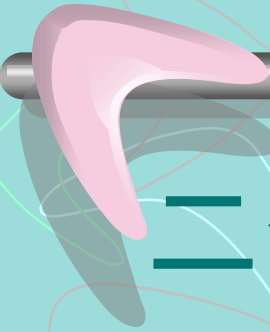
素朴な戦略

「これまでに一度も間違えていないエキスパートを1人選び、その答えをマネする」



高々7回しか間違えない！

(93点以上取れることを理論的に保証)



二分法 (Halving Algorithm) [Littlestone 88]

- エキスパート8人のうち
少なくとも1人は全問正解すると仮定すると...
- 二分法:
「これまで一度も間違えていないエキスパート
たちの予測の多数決に従う」

➡ 高々3回しか間違えない！

エキスパートがN人なら、高々 $\log_2 N$ 回

二分法の解析

N人のエキスパート

×と予測

○と予測

誤り経験あり

多数決: ○

誤り経験なし(生存)

二分法の解析

N人のエキスパート

×と予測

誤り経験あり

多数決: ○

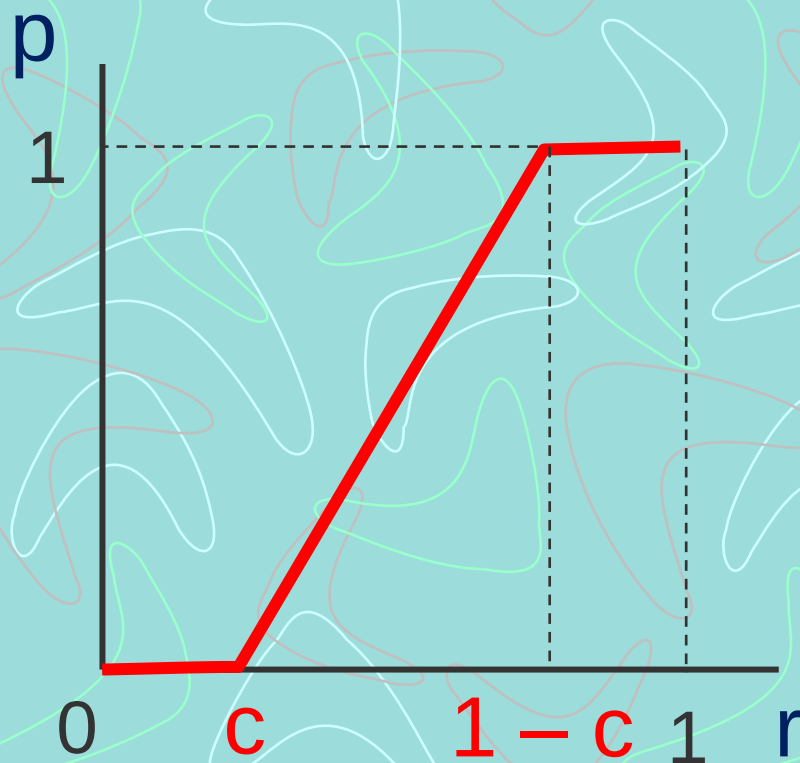
誤り経験なし(生存)

- 間違えたとき, 生存数は半分以下
- 誤り回数が $m \Rightarrow$ 生存数 $\leq N / 2^m$
- 仮定より, $1 \leq$ 生存数

$$m \leq \log_2 N$$

乱択二分法 [folklore]

- r = 生存しているエキスパートのうち
“○”と予測したエキスパートの割合
- 確率 p で“○”, $1 - p$ で“×”と予測



c	誤り回数の 期待値
$1 / 2$ (決定的二分法)	$\log_2 N$
0	$\log_e N$
$\frac{1 - \ln 2}{2}$	$(\log_2 N) / 2$



問題設定（一般編）

- 各エキスパートの予測および正解の系列について、何の仮定もおかない

・・・敵対的な環境

- 今後は $\times$, $\bigcirc$ の代わりに **0**, **1** を用いる
- 全部で **T** 問とする



目標をどう設定すべきか？

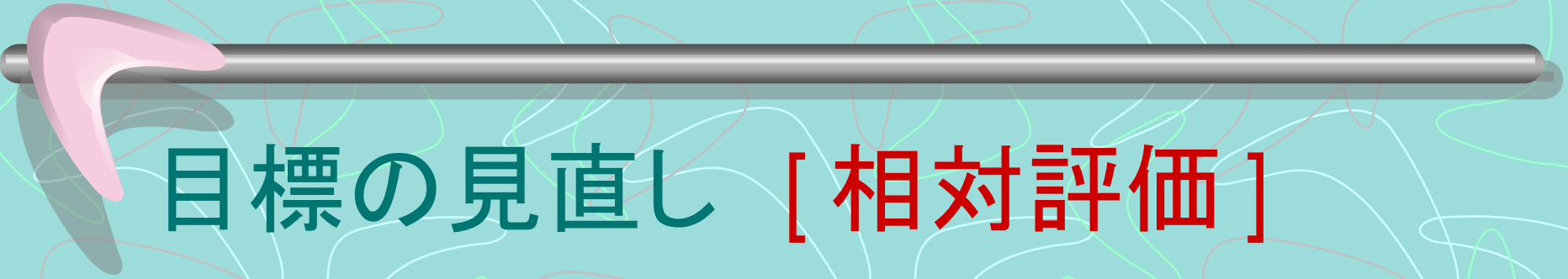
- 誤り回数の期待値 L_T を最小化すること？
- 任意のアルゴリズムに対し, $L_T \geq T/2$ となり得る
(Adversary argument)
- 一方, コイン投げアルゴリズム
(常に確率 $1/2$ で1と予測)で $L_T = T/2$ を達成



目標をどう設定すべきか？

- アルゴリズムの性能を
「最悪の誤り回数の期待値」
で評価すると、コイン投げアルゴリズムが
最適という結論になってしまう

これは面白くないし、役に立ちそうもない



目標の見直し [相対評価]

誤り回数の期待値 $\div$ 最も成績の良かった
エキスパートの誤り回数

- エキスパートが全員ダメだったらあきらめよう
- 1人でも良い成績を挙げた人がいたら、
その成績に匹敵する成績を挙げたい

重みつき平均法(WAA)でこの目標を達成！



重みつき平均アルゴリズム (WAA)

[Kivinen, Warmuth 99]

- $v_i \in [0,1]$: 各エキスパート i の重み
(初期重み $v_i = 1 / N$)
- $x_i \in \{0,1\}$: 各エキスパート i の予測値
- 確率 $p = \sum_i v_i x_i$ で 1 と予測
- 重み更新

$v_i \leftarrow v_i b_i$ / 規格化 // $\sum_i v_i = 1$ となるように

$b_i = 1$ エキスパート i が正しかったとき

β エキスパート i が間違えたとき

$\beta (< 1)$ はパラメータ. $\beta = 0$ のとき乱択二分法



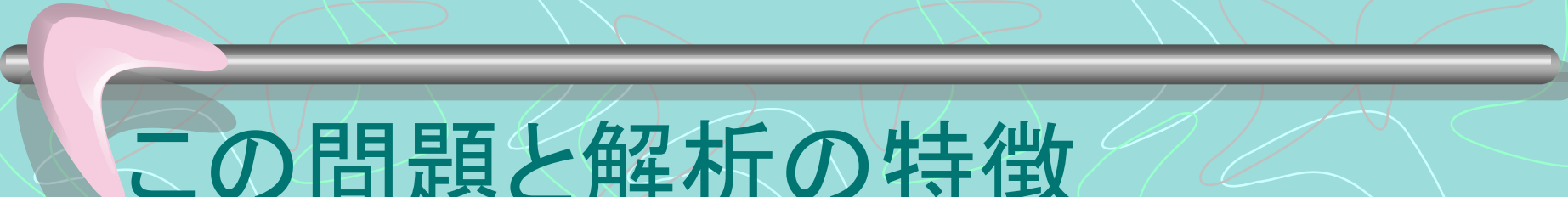
WAAの性能

適当な β に対して,

$$\text{誤り回数の期待値} \leq m^* + O((T \log N)^{1/2})$$

m^* は最も成績の良かったエクスパートの誤り回数

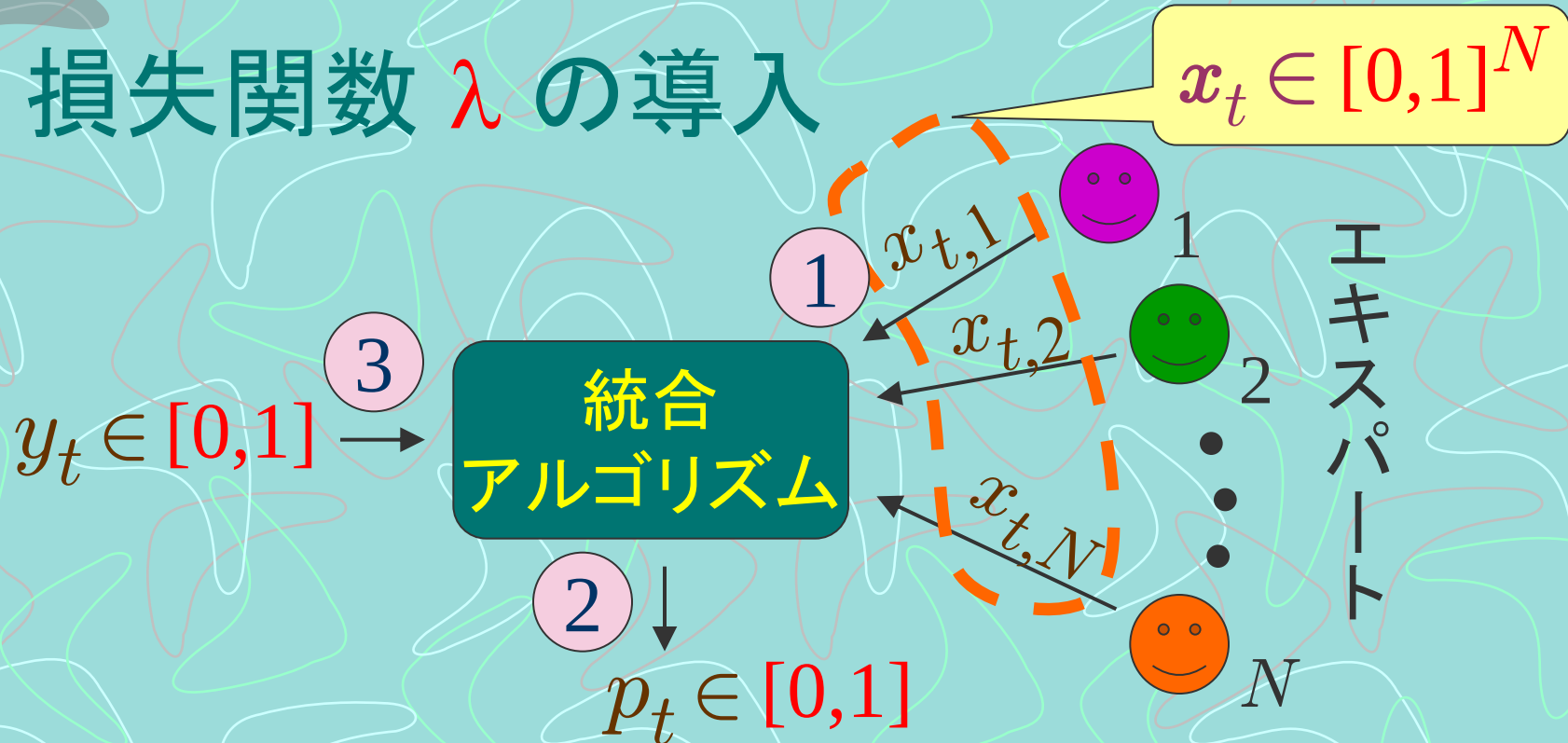
目標達成！



この問題と解析の特徴

- オンライン性
 - 予測と結果の提示が交互に繰り返される
- ユニバーサル性
 - エキスパートの予測や結果の系列に対して何の仮定もおかない
- 最悪値評価
 - アルゴリズムの性能を最悪の場合で評価する
- 相対評価
 - アルゴリズムの性能を, 最適なエキスパートの成績を用いて相対的に評価する

損失関数 λ の導入



$\lambda(y_t, p_t)$: アルゴリズムの損失

$\lambda(y_t, x_{t,i})$: エキスパート i の損失

最適なエキスパート
の累積損失

目標: $\sum_t \lambda(y_t, p_t) \simeq \min_i \sum_t \lambda(y_t, x_{t,i})$



さまざまな損失関数と応用

- $\lambda(y, p) = |y - p|$...クイズ王統合問題
- $\lambda(y, p) = (y - p)^2$...降水確率予報
- $\lambda(y, p) = y \ln(y / p) + (1-y) \ln((1-y) / (1-p))$
...情報圧縮
- $\lambda(y, p) = -\ln y \cdot p$...株式投資

下3つは凸関数

WAA

for $t = 1, 2, \dots$

$x_t \in [0,1]^N$ を入力

$p_t = v_t \cdot x_t = \sum_i v_{t,i} x_{t,i}$ を出力

$y_t \in [0,1]$ を入力

for $i = 1$ to N

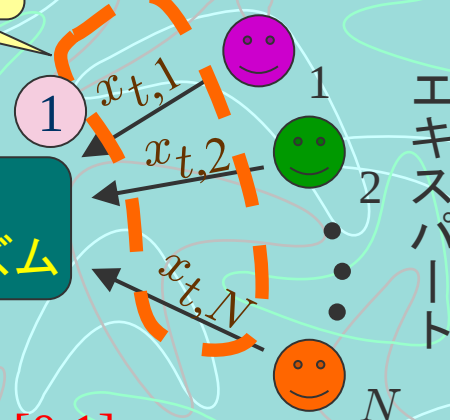
$$v_{t+1,i} = \frac{v_{t,i} \beta^{\lambda(y_t, x_{t,i})}}{\sum_{j=1}^N v_{t,j} \beta^{\lambda(y_t, x_{t,j})}}$$

$$x_t \in [0,1]^N$$

$$y_t \in [0,1]$$

統合
アルゴリズム

$$p_t \in [0,1]$$





WAAの性能

定理 任意の凸損失関数 λ に対し,

$$c = \sup_{y, p \in [0, 1]} \frac{(\lambda'(y, p))^2}{\lambda''(y, p)}$$

$$\beta = e^{-1/c}$$

とおくと

$$\sum_{t=1}^T \lambda(y_t, p_t) \leq \min_i \sum_{t=1}^T \lambda(y_t, x_{t,i}) + c \ln(1/v_{1,i})$$

初期重みが一樣なら $\ln N$

WAAの性能 (cf. Aggregating Algorithm [Vovk 90,98])

$$\sum_{t=1}^T \lambda(y_t, p_t) \leq \min_i \sum_{t=1}^T \lambda(y_t, x_{t,i}) + c \ln(1/v_{1,i})$$

損失関数	$\lambda(y, p)$	c の値	
		AA	WAA
2次損失	$(y - p)^2$	1/2	2
相対エントロピー損失	$(1 - y) \ln \frac{1 - y}{1 - p} + y \ln \frac{y}{p}$	1	1
Hellinger 損失	$\frac{1}{2}((\sqrt{1 - y} - \sqrt{1 - p})^2 + (\sqrt{y} - \sqrt{p})^2)$	$1/\sqrt{2}$	1
絶対値損失	$ y - p $	∞	



WAAの導出

- 確率ベクトル v に対し, $\Phi(v) = \sum_i v_i \ln v_i$ とする
- WAAの重みの導出

$$v_{t+1} = \operatorname{argmin}_v \left(\eta \sum_i v_i \sum_{s=1}^t \lambda(y_s, x_{s,i}) + \Phi(v) \right)$$

$$\begin{aligned} & \min_v \sum_i v_i \sum_{s=1}^t \lambda(y_s, x_{s,i}) \\ &= \min_i \sum_{s=1}^t \lambda(y_s, x_{s,i}) \end{aligned}$$

時刻 t までの最適なエキスパートの累積損失



WAAの導出

- KLダイバージェンス $\Delta(u, v) = \sum_i u_i \ln(u_i / v_i)$

注: $\Delta(u, v)$ は, $\Phi(v) = \sum_i v_i \ln v_i$ の
Bregman divergence

- WAAの重み更新式の別表現

$$\begin{aligned} v_{t+1} &= \operatorname{argmin}_v \left(\eta \sum_i v_i \sum_{s=1}^t \lambda(y_s, x_{s,i}) + \Phi(v) \right) \\ &= \operatorname{argmin}_v \left(\eta \sum_i v_i \lambda(y_t, x_{t,i}) + \Delta(v, v_t) \right) \end{aligned}$$

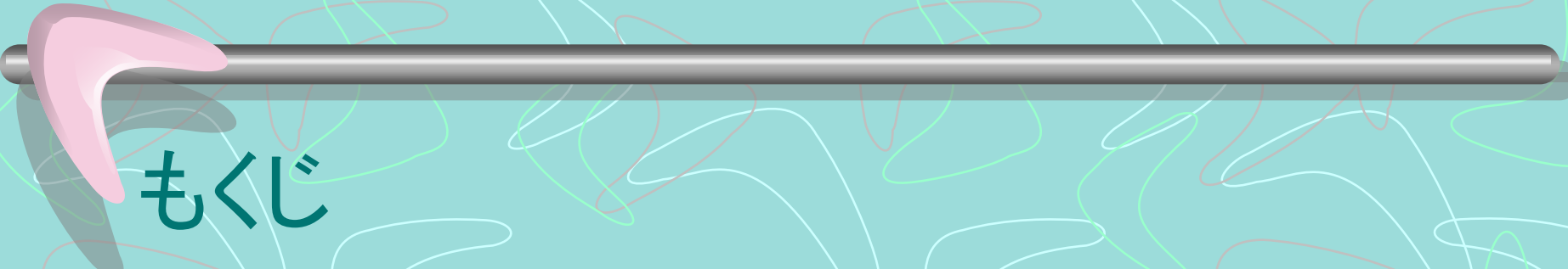


損失上界の導出(ならし解析)

- 任意の確率ベクトル $\boldsymbol{u}$ に対し,

$$\begin{aligned} \lambda(y_t, \boldsymbol{v}_t \cdot \boldsymbol{x}_t) - \sum_i \boldsymbol{u}_i \lambda(y_t, x_{t,i}) \\ \leq c (\Delta(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_t) - \Delta(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_{t+1})) \end{aligned}$$

- $t = 1, \dots, T$ で和を取ることで、WAAの累積損失の上界が簡単に得られる



もくじ

1. エキスパート統合モデルについて
 - 二分法
 - 重みつき平均アルゴリズム
2. モデルの拡張
 - 多腕バンディット問題
 - オンライン凸最適化問題
3. 組み合わせ論的オンライン予測
 - 一般化ピタゴラスの定理
4. さらなるモデルの拡張に向けて

モデルの拡張 1

いままでの目標

$$\begin{aligned}\sum_t \lambda(y_t, p_t) &\simeq \min_i \sum_t \lambda(y_t, x_{t,i}) \\ &= \min_u \sum_i u_i \sum_t \lambda(y_t, x_{t,i})\end{aligned}$$

$u = (u_1, \dots, u_N)$: 確率ベクトル

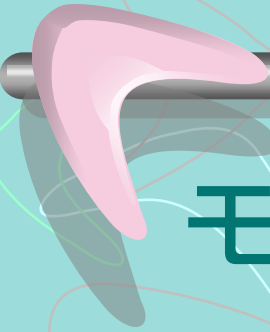
新しい(より困難な)目標:

$$\sum_{t=1}^T \lambda(y_t, p_t) \simeq \min_{\mathbf{u}} \sum_{t=1}^T \lambda(y_t, \sum_{i=1}^N \mathbf{u}_i x_{t,i})$$

cf. for WAA

$$p_t = \mathbf{v}_t \cdot \mathbf{x}_t$$

- オンライン線形回帰問題
- オンラインポートフォリオ問題



モデルの拡張 2

WAAのプロトコル:
(損失関数 λ 固定)

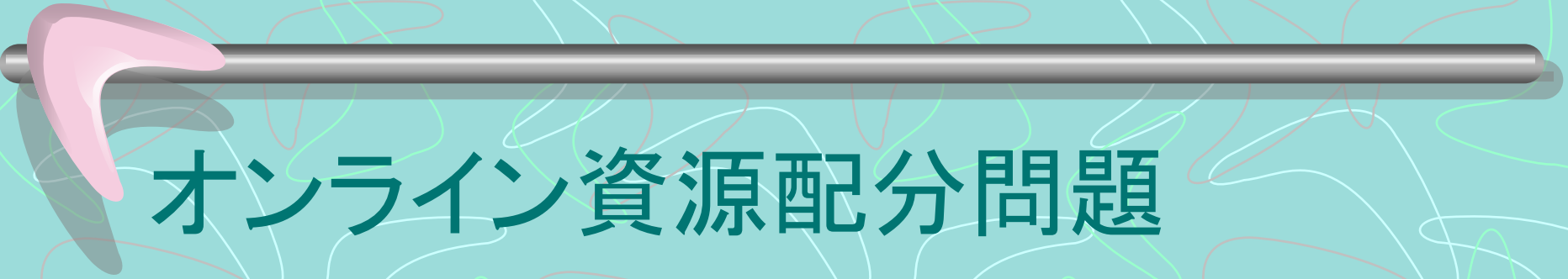
1. $x_t \in [0,1]^N$ を入力
2. $p_t = v_t \cdot x_t$ を出力
3. $y_t \in [0,1]$ を入力
4. 損失 $\lambda(y_t, p_t)$ をこうむる

新しいプロトコル:

1. v_t を出力
2. 凸関数 L_t を入力
3. 損失 $L_t(v_t)$ をこうむる

$L_t(v) \equiv \lambda(y_t, v \cdot x_t)$ とおくことにより WAA の
プロトコルを表現できる

・オンライン凸最適化問題



オンライン資源配分問題

オンライン凸最適化

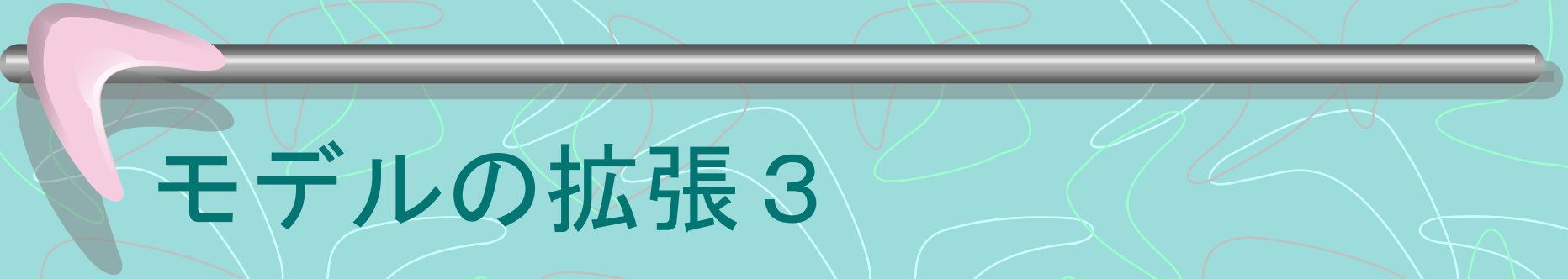
1. v_t を出力
2. 凸関数 L_t を入力
3. 損失 $L_t(v_t)$ をこうむる

L_t を線形な関数に制限すると...

新しいプロトコル:

1. v_t を出力
2. ベクトル $\mathbf{e}_t = (\ell_{t,1}, \dots, \ell_{t,N})$ を入力
3. 損失 $v_t \cdot \mathbf{e}_t$ をこうむる

・オンライン資源配分問題



モデルの拡張 3

オンライン資源配分: 1. v_t を出力

2. $\mathbf{e}_t = (l_{t,1}, \dots, l_{t,N})$ を入力

3. 損失 $v_t \cdot \mathbf{e}_t$ をこうむる

新しいプロトコル:

1. 環境が $\mathbf{e}_t$ を密かに選ぶ

2. $i_t \in \{1, \dots, N\}$ を出力

3. 損失 l_{t,i_t} をこうむる

- 確率分布 v_t に従ってエクスパート i_t を選ぶとすると、損失の期待値は $v_t \cdot \mathbf{e}_t$

- 上との違いは、選択したエクスパート以外の損失が与えられないこと。

• バンディット問題



もくじ

1. エキスパート統合モデルについて
 - 二分法
 - 重みつき平均アルゴリズム
2. モデルの拡張
 - 多腕バンディット問題
 - オンライン凸最適化問題
3. 組み合わせ論的オンライン予測
 - 一般化ピタゴラスの定理
4. さらなるモデルの拡張に向けて



準備

オンライン資源配分(乱択版) :

1. 確率分布 v_t に従って $i_t \in \{1, \dots, N\}$ を選ぶ
2. $\mathbf{e}_t = (\ell_{t,1}, \dots, \ell_{t,N})$ を入力
3. 損失 $v_t \cdot \mathbf{e}_t$ をこらむ

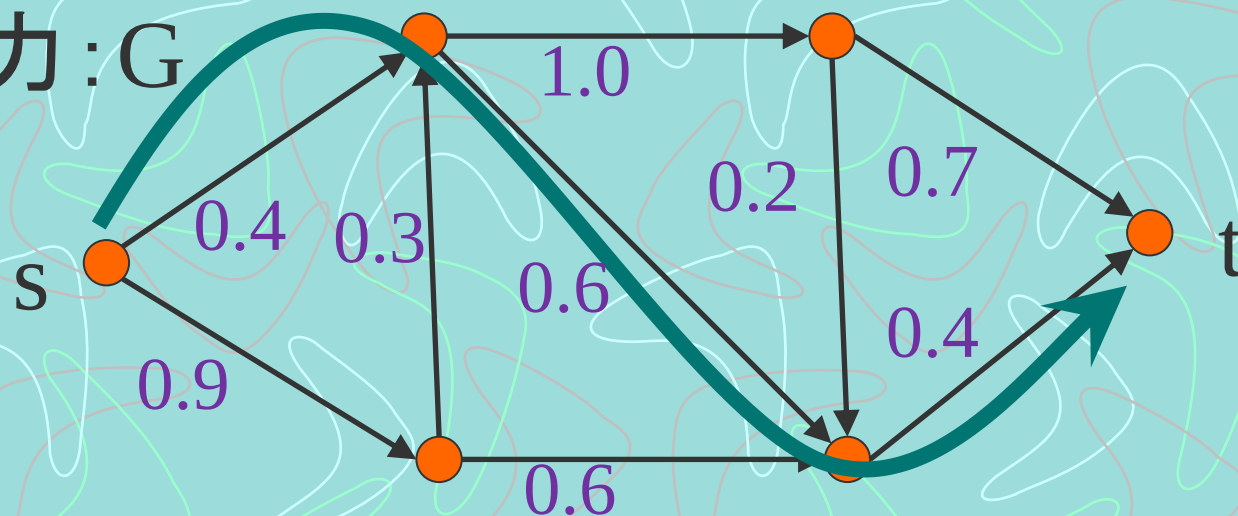
Hedge アルゴリズム [Freund, Schapire 97]

$$v_{t+1,i} = v_{t,i} \beta^{\ell_{t,i}} / \text{規格化}$$

$$\sum_{t=1}^T v_t \cdot \mathbf{e}_t \leq \min_i \sum_{t=1}^T \ell_{t,i} + O((T \log N)^{1/2})$$

オンライン最短路問題 [Takimoto, Warmuth 03]

入力: G

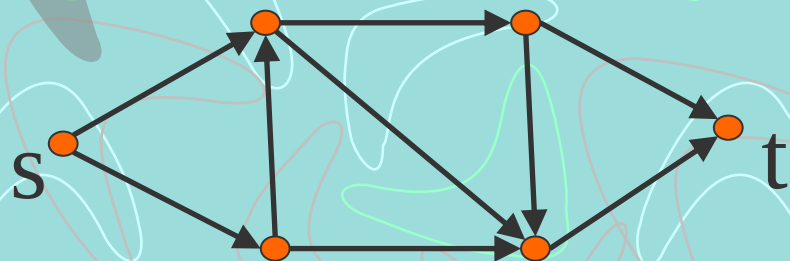


1. ある s - t 道 P を選ぶ. P を選ぶ確率を $v_{t,P}$ とする.
2. 各辺 e の遅延時間 $d_t(e) \in [0,1]$ が明らかとなる.
道 P に沿って s から t に到達する時間は

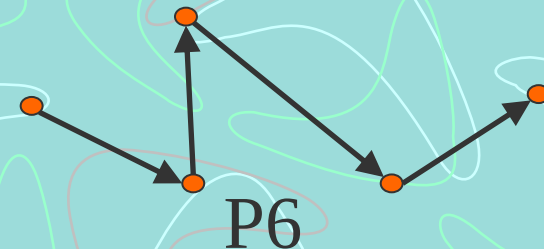
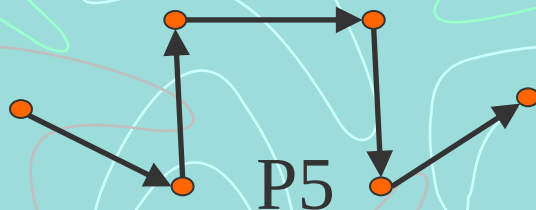
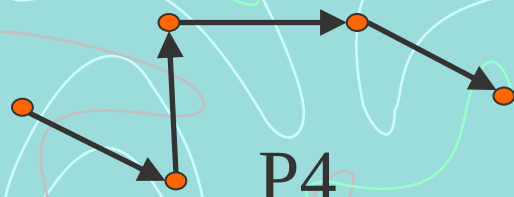
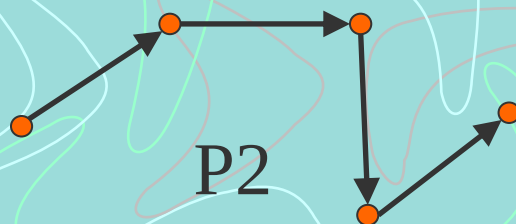
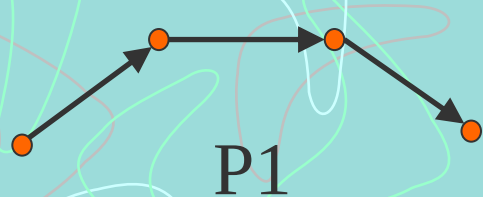
$$l_{t,P} = \sum_{e \in P} d_t(e)$$

3. 到達時間の期待値 $\sum_P v_{t,P} l_{t,P} = v_t \cdot \ell_t$

オンライン資源配分問題だ！

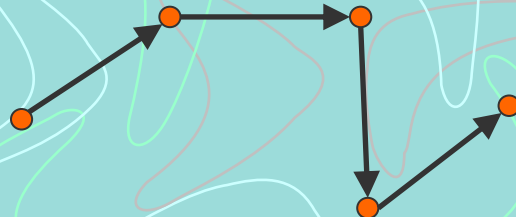
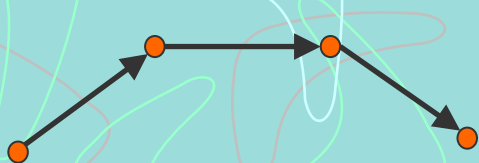
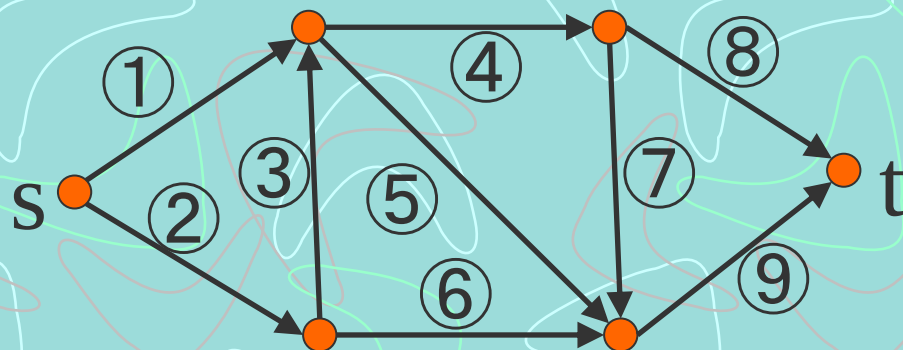


各 s - t 道をエキスパートとみなして Hedge を適用すればよい？



N (= s - t 道の総数) が指数的！

アイデア1 各s-t 道を短いベクトルで表す



$P1 = (100100010)$ $P2 = (100100101)$ $P3 = (100010001)$

道 P の損失は $\ell_{t,P} = \sum_e d_t(e) P(e) = d_t \cdot P$

組み合わせ論的オンライン予測問題

[Koolen, Warmuth, Kivinen 10]

決定集合 $D \subseteq \{0,1\}^K$

1. 決定 $P \in D$ を選ぶ. P を選ぶ確率を $v_{t,P}$ とする.

2. ベクトル $d_t \in [0,1]^K$ を入力

決定 P の損失は $\ell_{t,P} = d_t \cdot P$

3. 損失 $v_t \cdot \ell_t$ をこらむる

アイデア2

• 分布 $v_t \Rightarrow z_t = \sum_{P \in D} v_{t,P} P \in \text{conv}(D) \subseteq [0,1]^K$

• 損失 $v_t \cdot \ell_t = d_t \cdot z_t$

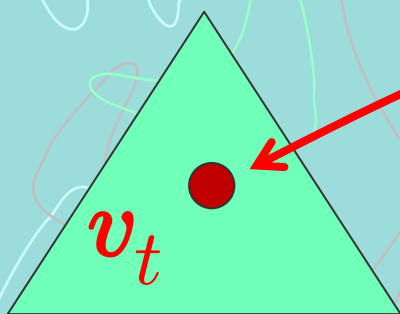
高次元の v_t の代わりに低次元の z_t を使おう

等価な問題

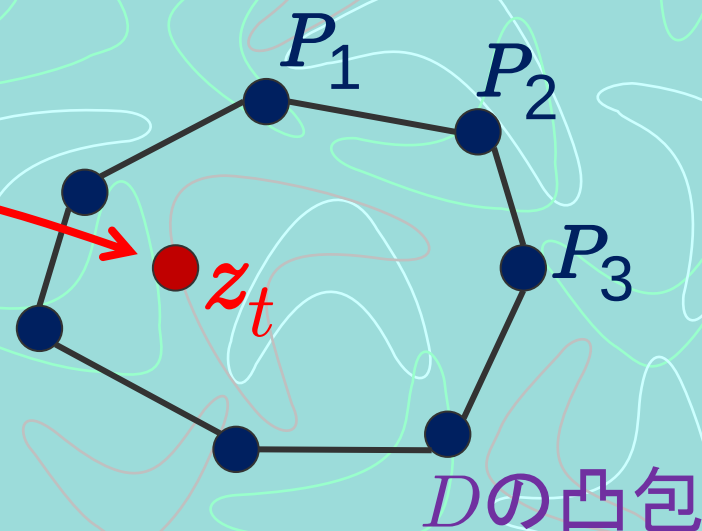
決定集合 $D \subseteq \{0,1\}^K$

オンライン資源配分問題
との違いは、重みを凸包
から選ぶこと

1. $z_t \in \text{conv}(D)$ を選ぶ
2. (分解) $z_t = \sum_{P \in D} v_{t,P} P$ を満たす分布 v_t に従って
 $P \in D$ を選ぶ.
3. ベクトル $d_t \in [0,1]^K$ を入力
4. 損失 $d_t \cdot z_t$ をこらむる



D 上の分布



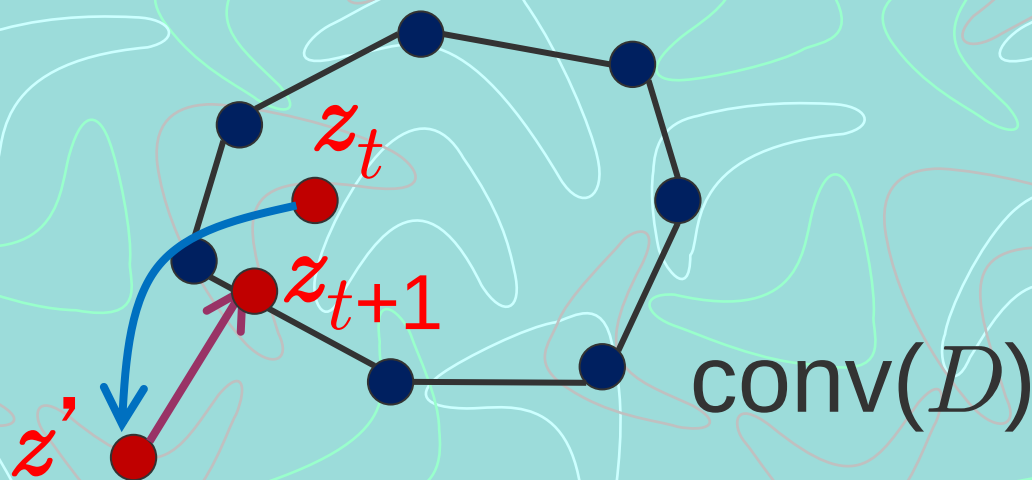
Component Hedge z_t の更新

1. $z' = \operatorname{argmin}_z (\eta d_t \cdot z + \Delta(z, z_t))$

Δ は unnormalized relative entropy

2. (射影)

$$z_{t+1} = \operatorname{argmin}_{z \in \operatorname{conv}(D)} \Delta(z, z')$$





ならし解析(少し不正確)

1. $z' = \operatorname{argmin}_z (\eta d_t \cdot z + \Delta(z, z_t))$

2. (射影) $z_{t+1} = \operatorname{argmin}_{z \in \operatorname{conv}(D)} \Delta(z, z')$

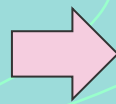
任意の $u \in \operatorname{conv}(D)$ に対し,

$$d_t \cdot z_t - d_t \cdot u \leq c (\Delta(u, z_t) - \Delta(u, z'))$$

WAAの解析と同じ

$$\Delta(u, z') = \Delta(u, z_{t+1}) + \Delta(z_{t+1}, z')$$

一般化ピタゴラスの定理


$$d_t \cdot z_t - d_t \cdot u \leq c (\Delta(u, z_t) - \Delta(u, z_{t+1}))$$



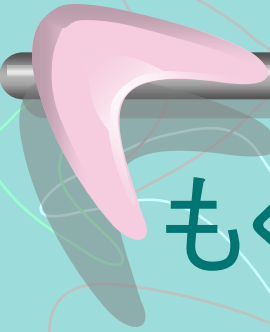
Component Hedge の性能

- ・ R^K 空間における Hedge と同等以上
- ・ 射影と分解は，問題ごとにアルゴリズム設計が必要(NP困難な場合も)
- ・ k-set, 順列, 全域木 など, 構造を持つ様々なエキスパートクラスを扱える

cf. オンラインランキング問題

[安武, 畑埜, 瀧本, 竹田@IBIS 2011]

[安武, 畑埜, 来嶋, 瀧本, 竹田@ISAAC2011]



もくじ

1. エキスパート統合モデルについて
 - 二分法
 - 重みつき平均アルゴリズム
2. モデルの拡張
 - 多腕バンディット問題
 - オンライン凸最適化問題
3. 組み合わせ論的オンライン予測
 - 一般化ピタゴラスの定理
4. さらなるモデルの拡張に向けて

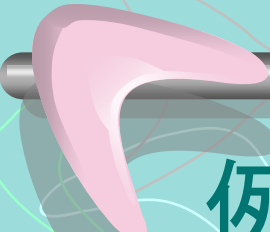


さらなる拡張について

- ・ アルゴリズム理論の分野で盛んに研究が行われているオンライン最適化（競合比解析）に、ほとんど貢献していない。

壁は2つ

1. 各時刻 t での損失が過去の履歴にも依存
2. （オフライン）最適解が決定の系列



例

オンライン資源配分

1. $i_t \in \{1, \dots, N\}$ を選ぶ
2. $\mathbf{e}_t = (e_{t,1}, \dots, e_{t,N})$ を入力
3. 損失 $v_t \cdot \mathbf{e}_t$ をこうむる

MTS問題

エキスパート空間に
メトリック d を仮定

1. $\mathbf{e}_t = (e_{t,1}, \dots, e_{t,N})$ を入力
2. $i_t \in \{1, \dots, N\}$ を選ぶ
3. 損失 $d(i_{t-1}, i_t) + e_{t,i_t}$ をこうむる

目標のオフライン最適値

$$\min_{i_t} \sum_t e_{t,i_t}$$

$$\min_{i_1, i_2, \dots, i_T} \sum_t d(i_{t-1}, i_t) + e_{t,i_t}$$