

令和 4 年 4 月 28 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18K11176

研究課題名(和文)半整数制約付き種別構成問題に対する高性能錐最適化手法の構築

研究課題名(英文)Efficient optimization method for optimal contribution problems with semi-integer constraints

研究代表者

山下 真 (Yamashita, Makoto)

東京工業大学・情報理工学院・教授

研究者番号：20386824

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、種別構成問題において各変数が半整数となるような制約を付加した最適化問題に対する効率的な計算手法の開発を行った。錐分割手法では、切除平面の計算が解析的に行えるようにし、半整数制約と合わせて混合整数計画問題を解く反復解法を構築した。また、別の手法として、半整数制約と錐制約をそれぞれの子問題に分解する方法を改良し、一部の制約を含ませることで良好な解を生成可能とした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

半整数制約は、変数が0あるいは一定の範囲の整数となっているような制約である。例えばポートフォリオ構築などであれば、資産をポートフォリオに組み込む場合に手数料などから最低限組み込むべき量が決まっている場合などが想定される。本研究で構築した計算手法は半整数制約を伴うような錐最適化問題に特に効果が高いと考えられる。また、数理最適化問題が複雑になったときに子問題への分解は良く行われる手法であり、特定の制約を含ませる本研究の方法は多くの手法の改善に利用できる可能性がある。

研究成果の概要(英文)：We developed efficient numerical methods for optimization contribution problems with semi-integer variables. The cone decomposition method allows to obtain cutting planes in an analytical form, and this leads to a numerical method that iteratively solves mixed-integer linear programming with semi-integer variables. We modified a splitting approach that splits the main problem into sub problems for semi-integer constraints and cone constraints. By including certain constraints, we improved the solution quality.

研究分野：数理最適化

キーワード：応用数学 数理最適化 錐最適化 混合整数計画問題 半整数制約

1. 研究開始当初の背景

種別構成問題は数理最適化問題の一種であるが、多様性に関する制約を考慮したうえで目的関数を最適化するところに特徴がある。例えば、ポートフォリオ構築ではリスク低減のために複数の銘柄へ分散させることが重要であり、育種学でも近親交配を防ぐために特定の遺伝子への集中を回避する必要がある。これらの応用では多様性に関する制約が二次錐制約などで表されることが多い。ここで、二次錐制約とは n 次元変数の場合には $x_1 \geq \sqrt{\sum_{i=2}^n x_i^2}$ と表せる制約であり、 $n = 3$ の場合を図 1 のようになり錐の形状となっていることが見て取れる。二次錐制約を持つ二次錐計画問題は数理最適化分野で研究が活発に行われており、内点法などを用いれば多項式時間で求解可能であることが知られている。

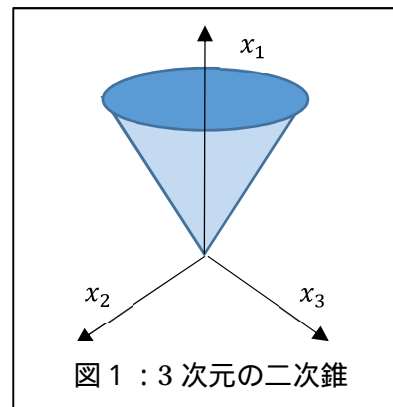


図 1 : 3次元の二次錐

一方で、種別構成問題には半整数制約も制約として用いることも考えられる。半整数制約とは、変数が $x_i \in \{0\} \cup \{l_i, l_i + 1, \dots, u_i - 1, u_i\}$ のように 0 あるいは一定の範囲の整数となるような制約である。ポートフォリオ構築であれば手数料などの要因から、ある銘柄を購入するときには最低限の購入量が設定されるような状況に対応している。

しかしながら、半整数制約は変数の範囲が分離されているなど複雑な構造をしており、非線形制約である二次錐制約と併用することは大規模な問題を扱う場合の計算時間の増加につながる。このことは、半整数制約を付加した種別構成問題に適した計算手法の開発が望ましいことを示している。

2. 研究の目的

本研究では、錐最適化問題の理論的特徴を利用して、半整数制約付き種別構成問題に対する計算手法の構築を行う。特に半整数制約と二次錐制約の持つ数学的構造に基づいて、それぞれの制約の計算効率を維持した解法に着目する。また、これらは近年活発に研究されている混合整数錐最適化問題とも密接に関連しており、そのような問題にも発展可能であるような要素を有する計算手法を構築する。

3. 研究の方法

半整数制約付き種別構成問題に対する計算手法として、本研究では(1)錐分割手法と(2)制約分離手法の2種類の計算手法を構築した。

(1) 錐分割手法

半整数制約 $x_i \in \{0\} \cup \{l_i, l_i + 1, \dots, u_i - 1, u_i\}$ は、補助変数 y_i を導入すると $x_i \in Z, y_i \in \{0, 1\}, l_i y_i \leq z_i \leq u_i y_i$ のように混合整数線形計画問題の制約式として表現可能である。したがって、二次錐制約を線形制約で近似すれば、半整数制約付き種別構成問題は混合整数線形計画問題として求解可能である。既存研究では、劣微分に基づく outer approximation による切除平面を毎反復で生成して、混合整数計画問題を逐次的に解くことで厳密な最適解を得る手法が提案されている。しかし、outer approximation は近似精度が良好でないため、多くの反復が必要なことが指摘されている。

本研究では、以前から開発してきた錐分割手法を利用することで、切除平面を算出した。一般に n 次元変数の二次錐制約は $x_1 \geq \sqrt{\sum_{i=2}^n x_i^2}$ で表現されるが、これは補助変数 $w_2, w_3, \dots, w_n \geq 0$ を用いれば $x_1 \geq \sum_{i=2}^n w_i$ および $x_1 + w_i \geq \sqrt{(2x_i)^2 + (x_1 - w_i)^2}$ ($i = 2, \dots, n$) と書き直すことができる。これらの不等式のうち前者は線形制約であるため、混合整数計画問題の制約として直接扱うことが可能である。後者は依然として非線形な二次錐制約であるものの変数が x_1, x_i, w_i の3個に限定されるため、この二次錐制約については切除平面を解析的な計算により短時間で求められる。

以上の要素を組み合わせることで、各反復において混合整数計画問題を求解することで、半整数制約付き種別構成問題に対する反復計算手法を開発した。また、この提案手法における切除平面は従来の outer approximation と同時に利用することも可能であり、一反復あたりの計算量

は増加するものの全体の反復回数を削減するような効果が期待できる。

(2) 制約分離手法

半整数制約を満たす集合を X とし二次錐制約を満たす集合を Y と表記すれば、半整数制約付き種別構成問題の最適化問題としての構造は

$$(P) \text{ 最小化 } \min f(x) \quad \text{制約 } x \in X \cap Y$$

と記述できる。しかしながら、 X と Y の共通部分 $X \cap Y$ を直接扱うことは容易でないため、これらの制約を分離し、以下の 2 つの子問題 $(P_X), (P_Y)$ を交互に求解するのが制約分離手法の基本的な方策である。

$$(P_X) \text{ 最小化 } \min f(x) \quad \text{制約 } x \in X, \quad (P_Y) \text{ 最小化 } \min f(y) + g(y-x) \quad \text{制約 } y \in Y$$

ここで、 (P_Y) における関数 $g(y-x)$ は x と y の差異を表す関数であり、 (P_X) と (P_Y) のそれぞれの点列が最終的には一つの解に集積しやすくするために導入されている。図 2 は制約分離手法の概念図であり、 (P_X) の点と (P_Y) の点が交互に生成され、それらが元問題 (P) の実行可能集合に接近していく様子を示している。

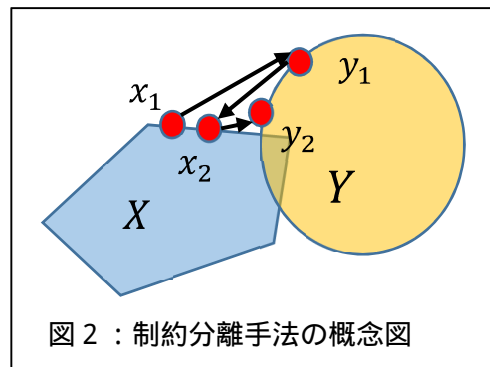


図 2 : 制約分離手法の概念図

しかし、 $g(y-x)$ を単純に導入しても (P_X) と (P_Y) のそれぞれの点列が乖離してしまうことがある。このため、本研究では (P_X) と (P_Y) の制約を完全に分離するのではなく、一部の制約を両方に課すことで良好な解への集積を達成しやすくしている。

$(P_X), (P_Y)$ への分離による重要な特徴の一つとして、目的関数 $f(x)$ が線形関数であれば (P_X) は混合整数計画問題になっていることが挙げられる。したがって、混合整数計画問題に対する通常のソルバーで求解可能である。さらに、 $g(y-x)$ として $y-x$ のユークリッドノルムに設定すると (P_Y) は二次錐計画問題となり、こちらも二次錐計画問題の通常のソルバーが適用できる。混合整数計画問題と二次錐計画問題を同時に扱えるソルバーは現時点では多くないが、それぞれの問題に特化したソルバーは多岐に渡るため、利用できるソルバーにも幅を持たせることができる。例えば、フリーソフトウェアのみでも実行できる範囲が広がり、より多くの利用へとつながると考えられる。

また、育種学から生じる二次錐制約のデータ行列は疎構造を持つが、このように (P_Y) を構築するとデータ行列は (P_Y) に限定されるために、その疎構造を利用した高速計算ルーチンを用いることができ、計算時間を大幅に短縮できる。なお、 (P_X) にも $g(y-x)$ をユークリッドノルムとして追加した場合には、 (P_X) は半整数制約の集合 X への射影計算に類似の計算となる。この場合は、半整数制約は変数ごとに独立した制約とみなすことができるので、短時間で近似解の計算が可能である。

4. 研究成果

本研究で開発をした錐分割手法および制約分離手法について数値実験により評価を行った。数値実験は育種学のデータを用いて行い、各データにおける Z は遺伝子型の種類数を表し、半整数制約付き種別構成問題には変数の数に相当する。比較対象として混合整数二次錐計画問題を直接扱うことができる CPLEX を用いた。CPLEX については双対ギャップが 0.5% になった時点で終了条件とした。

(1) 錐分割手法

CPLEX と錐分割手法の計算時間および目的関数値を比較したのが表 1 および表 2 である。錐分割手法では計算時間が CPLEX とほぼ同様の時間を達成していることが見て取れる。Outer approximation (外部近似) を併用した場合は各反復における混合整数計画問題の制約が増えるため、 Z が小さい場合は計算時間が増加してしまうが、 $Z=4079$ の場合には併用の効果が表れ、計算時間を短縮できている。さらに大規模なデータについても、錐分割手法と Outer approximation の併用が効果的であると考えられる。また、表 2 の目的関数値についても、CPLEX の終了条件として設定した 0.5% よりも小さい差のみしかなく、優れた目的関数値が得られていることが確認できる。

表 1 : 錐分割手法の計算時間の比較 (単位は秒)

	Z = 379	Z = 473	Z = 3386	Z = 4079
CPLEX	0.533	0.604	10.422	23.528
錐分割	0.735	0.502	7.668	21.225
錐分割+外部近似	2.310	1.969	14.318	19.960

表 2 : 錐分割手法の目的関数値の比較 (CPLEX を 100%とした場合)

	Z = 379	Z = 473	Z = 3386	Z = 4079
CPLEX	100%	100%	100%	100%
錐分割	99.87%	99.61%	99.72%	100%
錐分割+外部近似	99.81%	99.84%	100%	99.99%

これらの錐分割手法の数値結果については、オペレーションズ・リサーチ学会 2021 年春季研究発表会や国際会議 SIAM Optimization 2021 で報告を行った。

(2) 制約分離手法

データ生成の関係で(1)とは異なるサイズのデータではあるが、制約分離手法についても計算時間および目的関数値で比較を行い、それらをまとめたのが表3および表4である。計算時間を比較すると CPLEX, 制約分離手法ともに問題の規模に合わせて計算時間が増加する傾向が確認できるが、制約分離手法は増加ペースが遅いことが分かる。特に、Z=4014 の場合や CPLEX と比較して4分の1程度の計算時間を達成している。また、表4より、(1)と同様に制約分離法でも良好な解が算出されていることが見て取れる。 (P_X) と (P_Y) の求解回数も10回以下になっており、 $g(x-y)$ の導入や制約の重複などにより、 (P_X) および (P_Y) の生成する点列が集積点に急速に接近していることも確認している。

表 3 : 制約分離手法の計算時間 (単位は秒)

	Z = 1127	Z = 2529	Z = 3468	Z = 3973	Z = 4014
CPLEX	1.525	8.030	13.806	14.817	16.132
制約分離	1.970	3.273	11.818	3.464	4.076

表 4 : 制約分離手法の目的関数値の比較 (CPLEX を 100%とした場合)

	Z = 1127	Z = 2529	Z = 3468	Z = 3973	Z = 4014
CPLEX	100%	100%	100%	100%	100%
制約分離	100%	99.90%	99.96%	99.96%	99.93%

以上のように制約分離法で開発した半整数制約と錐制約を子問題へと分離する方法は育種学のデータに効果的であることを確認したが、この方法は他のデータにも適用可能であるため、本研究での計算手法のさらなる発展も考えられる。

なお、育種学に関する種別構成問題のデータの一部は整理を行い、他の研究者などが利用可能なように github で公開を行っている。

また、種別構成問題への計算手法構築における錐最適化理論に関する知見などを発展させることで、以下のような結果も得た。

1. 二次制約付き二次計画問題が疎構造を持つときに、二次錐計画緩和手法において疎構造を利用することで計算時間を短縮する計算手法を提案した。特に非対角要素が非正であるような二次制約付き二次計画問題では、二次錐計画緩和により厳密な最適値が得られることから、効率的な計算手法となっている。また、半正定値計画問題におけるコーダル分解理論との関連性も明らかにした。
2. Arc-search 型の内点法を非線形最適化問題に適用し、数値実験により評価を行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 5件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yamashita Makoto, Iida Einosuke, Yang Yaguang	4. 巻 89
2. 論文標題 An infeasible interior-point arc-search algorithm for nonlinear constrained optimization	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Numerical Algorithms	6. 最初と最後の頁 249 ~ 275
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11075-021-01113-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Heejune Sheen, Makoto Yamashita	4. 巻 -
2. 論文標題 Exploiting aggregate sparsity in second-order cone relaxations for quadratic constrained quadratic programming problems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Optimization Methods and Software	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/10556788.2020.1827256	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 1.Takashi Nakagaki, Mitsuhiro Fukuda, Sunyoung Kim, and Makoto Yamashita	4. 巻 76
2. 論文標題 A dual spectral projected gradient method for log-determinant semidefinite problems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Optimization and Applications	6. 最初と最後の頁 33-68
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10589-020-00166-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Safarina Sena, Mullin Tim J., Yamashita Makoto	4. 巻 62
2. 論文標題 POLYHEDRAL-BASED METHODS FOR MIXED-INTEGER SOCP IN TREE BREEDING	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Operations Research Society of Japan	6. 最初と最後の頁 133 ~ 151
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.15807/jorsj.62.133	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Masaki Kimizuka, Sunyoung Kim and Makoto Yamashita	4. 巻 75
2. 論文標題 Solving pooling problems with time discretization by LP and SOCP relaxations and rescheduling methods	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Global Optimization	6. 最初と最後の頁 631-654
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10898-019-00795-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 7.Hikaru Komeiji, Sunyoung Kim and Makoto Yamashita	4. 巻 74
2. 論文標題 On the conditions for the finite termination of ADMM and its applications to SOS polynomials feasibility problems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computational Optimization and Applications	6. 最初と最後の頁 317-344
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10589-019-00118-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計7件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 Sena Safarina, Makoto Yamashita
2. 発表標題 A Conic Relaxation Approach for Semi-Integer arising from Tree Breeding
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2021年春季研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Makoto Yamashita*, Sena Safarina, Tim J. Mullin, Satoko Moriguchi
2. 発表標題 An efficient mathematical approach for optimal selection problems in tree breeding
3. 学会等名 2019 International Symposium for Advanced Computing and Information Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡田智之*, Kim Sunyoung, 山下真
2. 発表標題 二次錐計画問題を用いた等式制約付き多項式最適化問題に対する緩和手法
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2020年春季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Sena Safarina, Makoto Yamashita, Tim J. Mullin
2. 発表標題 A polyhedral based method for optimal contribution selection problem
3. 学会等名 京都大学数理解析研究所共同研究「高度情報化社会に向けた数理最適化の新潮流」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Makoto Yamashita, Masaki Kimizuka, Sunyoung Kim
2. 発表標題 An Efficient Approach for Pooling Problems by Second-order Cone Programming Relaxations and Rescheduling Methods
3. 学会等名 International Workshop on Control and Optimization (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 飯田 英之介, Yaguang Yang, 山下真
2. 発表標題 非線形最適化問題に対する非実行可能 arc-search 内点法の数値実験による評価
3. 学会等名 最適化：モデリングとアルゴリズム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山下真, Tim J. Mullin, Sena Safarina
2. 発表標題 樹木園種別構成問題に現れる錐最適化問題への効率的な解法の構築
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 研究部会 最適化とその応用
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

OpSel.jl https://github.com/makoto-yamashita/OpSel.jl

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	SAFARINA Sena (SAFARINA Sena)	Institut Teknologi Sepuluh Nopember・Department of Mathematics・Assistant Professor	
研究協力者	福田 光浩 (FUKUDA Mituhiro)	東京工業大学・数理・計算科学系・特定准教授	
研究協力者	KIM Sunyoung (KIM Sunyoung)	Ewha Womans University・Department of Mathematics・Professor	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------