

機関番号：32641

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2008～2010

課題番号：20510143

研究課題名(和文) 自動設定機能を備えた最適化問題用オンライン・ソルバーの構築と公開
 研究課題名(英文) The development of online solver having functions of automatic parameter settings for optimization problems

研究代表者

藤澤 克樹 (FUJISAWA KATSUKI)

中央大学 理工学部 准教授

研究者番号：40303854

研究成果の概要(和文)：

主要な最適化問題(半正定値計画問題, 最短路問題, 混合整数計画問題)に対応し、最適化ソルバーやパラメータの自動設定機能を持つ高機能かつ高性能の最適化オンライン・ソルバーを構築して、インターネットから広く利用できるように公開を行った。また特に半正定値計画問題, 最短路問題に対しては世界最高性能を持つ最適化ソルバーの開発を行い、既存のソルバーでは解くことが出来なかった巨大な最適化問題の最適解を求めることにも成功した。

研究成果の概要(英文)：

We have developed the online solver systems having functions of automatic parameter settings for some major optimization problems (semidefinite program, shortest path problem and mixed integer program). The online solvers are now available from some websites. We have also developed high performance optimization solvers for semidefinite program and shortest path problem, which can obtain optimal solutions for very large-scale optimization problems which existing optimization solvers cannot solve.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2009年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2010年度	1,100,000	330,000	1,430,000
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：数理最適化

科研費の分科・細目：社会・安全システム科学・社会システム工学・安全システム

キーワード：最適化問題、オペレーションズ・リサーチ、HPC(高性能計算)、

クラスタコンピューティング、グリッドコンピューティング、クラウドコンピューティング、
 マルチスレッドコンピューティング、数理計画問題

1. 研究開始当初の背景

近年、大規模かつ複雑な最適化問題を高速に解く需要は様々な産業界や学術分野において急速に高まりつつある。本研究では最適化問題を数理計画問題と組合せ最適化問題の二つに大きく分類しているが、いずれの場合においても通常は最初に実際問題を最適化問題にモデル化(定式化など)して、数値デー

タを用意し最適化ソルバー(最適化問題を解くためのソフトウェア)を利用して解を求めることになる。しかし、多くの関係者の意見を総合すると以下のような問題に直面することが多く、そのことが最適化ソルバーの普及の妨げの要因になっている。

(1) ユーザは必ずしもコンピュータ分野に詳しいとは限らないので、実行環境の構

築(OS やコンパイラ)やインストール作業を適切に行うことが困難な場合も多い。近年ではクラスタやグリッドなどの並列計算技術が普及し、最適化ソルバーでも並列計算に対応しているものも増えてきているが、専門家以外には並列計算の敷居が高く費用もかかることが多い。

- (2) ソフトウェアの更新作業等が面倒なので、最新の高性能かつ安定した最適化ソルバーが必ずしも普及していない。
- (3) 一つの最適化問題に対しても問題の特性や規模に対応した複数の最適化ソルバーが存在し、またパラメータ設定によって性能向上が期待できる。しかし、この選択肢の多さは専門家以外のユーザにとってはおかえって負担になることが多い。
- (4) 検索エンジンなどで最適化ソルバーの情報は入手できるが、どのような最適化問題に対してどのような最適化ソルバーが存在しているのか、あるいは自分が想定している最適化問題はどの最適化ソルバーで解くことができるのか等の情報収集と判断は、これもまた専門家以外のユーザには困難である。

2. 研究の目的

本研究では実用的な最適化問題(半正定値計画問題(SDP), 最短路問題, 混合整数計画問題等)にも対応したオンライン・ソルバーの作成を行う。特に上記の研究開始当初の背景(3)の問題の解決を意図し、最適化ソルバーやパラメータの自動設定機能を持つ高性能かつ高性能の最適化オンライン・ソルバーを構築して、世界に向けて広く公開していく。

例えば SDPA Online Solver ではユーザが問題を入力するだけで、自動的に最適化ソルバーを選択して、同時にパラメータの設定などを行う新システムを構築する。例えば SDP に関しては SDPA, SDPARA, SDPARA-C という三つのソフトウェアが登録されている。SDPARA と SDPARA-C はクラスタ計算機上で並列計算を行うので、通常のパラメータ設定に加えて並列計算に用いる CPU 数などのパラメータも必要になる。

具体的な自動設定のためのアルゴリズムは以下の通りである。

- 入力された問題から問題の大きさ(行列のサイズ、制約式の数)、疎性(非零要素の数や構造)などの情報を取り出す
- 内点法アルゴリズムの 1 反復の各箇所における計算量やデータ移動量の推定量を計算することによって 1 反復における実行時間の見積もりを行う

う。データ移動量とメモリやネットワークの帯域幅の関係によって並列計算における適切な CPU 数を推定することが可能である。

- 以上の情報に基づいて、適切なソルバーやパラメータを自動的に設定する

申請者が調べた範囲では最適化分野において同様の目的、機能を持つオンライン・ソルバーを開発する研究計画は存在しない。しかも SDPA Online Solver の運用経験から判断してオンライン・ソルバーに対する需要は大きいものであると判断できる。また計算量の見積もり機能に関しては SDPA が先駆的存在であり、これを複数の最適化ソルバーと自動設定機能まで発展させていくことが重要であると考えられる。

3. 研究の方法

オンライン・ソルバー (図 1) に関しては以下の方針で開発を行った。

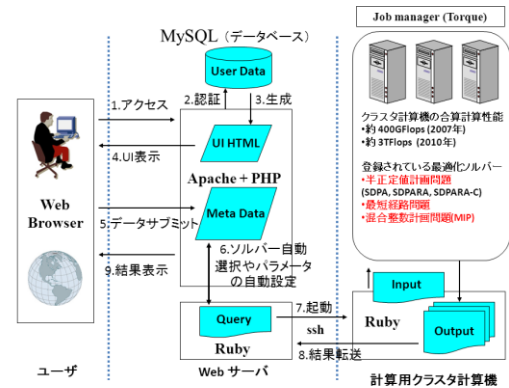


図 1 : オンライン・ソルバーの概要

- (1) クラスタやグリッドなどの技術を用いて多種多様な実行形態をユーザに提供するオンライン・ソルバーシステムの構築と運用を行う
- (2) 最適化ソルバーのユーザインターフェイスの改善や追加機能などの提案と検討
- (3) 計算時間やデータ転送量の推定によって計算時間の見積もりを行うシステムを用いて、ソルバー自動選択やパラメータの自動設定を行う機能をオンライン・ソルバーに追加する

また大規模最短路問題に対する高速処理システムの開発を行った。現在では米 Microsoft の研究者によるソフトウェア (マルチパケット法) が非常に高性能として知られているが、メモリ消費量、安定性、速度などを総合的に考慮して、大規模かつ複雑な実際問題に耐えうる新しいソフトウェアの開発を行った。ソフトウェアの具体的な仕様は

以下の通りである。性能目標は全米データ(点数が約 2,400 万点, 枝数が約 5,800 万点)という超巨大なデータでも任意の二点間を数秒で(データ読み込みも含める)求めることであり, 特別な前処理を行わない場合には世界最高速の部類に属する。メモリ使用量は現在の標準的なコンピュータの構成を考慮して数 Gbytes 以内, また現在のマルチコア CPU を考慮して, マルチスレッド化により高速並列計算を行う。

4. 研究成果

(1) 最適化問題用オンライン・ソルバーの整備と計算機サーバの増強

- ① <http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/portal/> (SDPA Online Solver) (図 2)
- ② <http://laqua.indsys.chuo-u.ac.jp/portal/> (SDPA Online Solver)
- ③ <http://opt.indsys.chuo-u.ac.jp/portal/> (最短路問題用 Online Solver) (図 3)

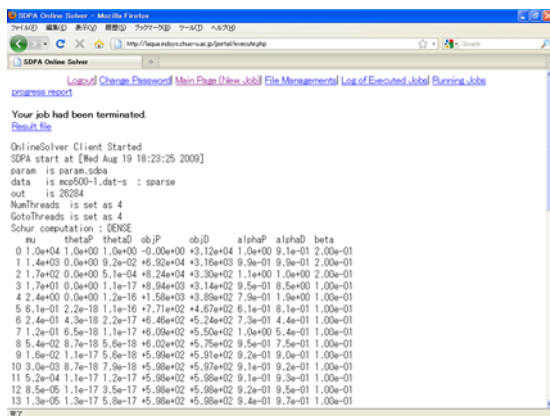


図 2 : SDPA Online Solver

全米横断の最短路(赤: 距離, 青: 時間)
<http://opt.indsys.chuo-u.ac.jp/portal/> 2400万点, 5800万枝, 5.8秒

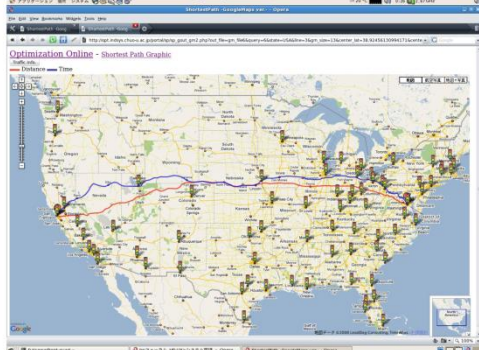


図 3 : 最短路問題用 Online Solver

(2) 量子化学分野における最適化問題の適用と大規模計算による解決。最先端の計算アルゴリズムに基づいた最適化問題用ソフトウェア SDPARA (<http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/sdpa/>) の開発を行い, SDPARA を京都

大学 T2K オープンスパコンで大規模に実行することで, メチルラジカル (CH₃), アンモニア (NH₃), 酸素 (O₂) について, 分子の挙動を解明するための最適化問題を精密に計算することに世界で初めて成功した(平成 21 年 5 月 28 日プレスリリース済み)。具体的に解説すると化学または物理分野では原理的にはシュレーディンガー方程式を解くことによって, ほぼ全ての現象を理解することができると言われていたが, 具体的な現象としては水分子の挙動, 蛋白質の性質, 光合成, 超電導の仕組みなどがある。しかし, シュレーディンガー方程式を解くのは様々な面で困難を抱えるため, 2 次の縮約密度行列の直接変分法という手法の開発, 研究が行われている。著者らのグループでは SDPARA や SDPA-GMP などのソフトウェアを用いて, 世界で初めて正確に 2 次の縮約密度行列の直接変分を行い, 多くの原子・分子に適用することに成功した。特に以下の CH₃(メチルラジカル), NH₃(アンモニア), O₂(酸素) から生じる巨大な SDP に対しては, 今回(2010年3月)世界で初めて京都大学 T2K スーパーコンピュータを用いて SDPARA によって最適解を求めることに成功し, 世界最大規模の SDP を非常に正確に安定して解くことができた。今回の数値実験で解いた最も大きな SDP は巨大なブロック対角構造を持っており(CH₃, NH₃ から生じる SDP), 各行列の大きさは 19,460 × 19,460, 制約式の数は 36,795 個, 非零要素の総数は 6,731,930 個にも達する(図 4)。

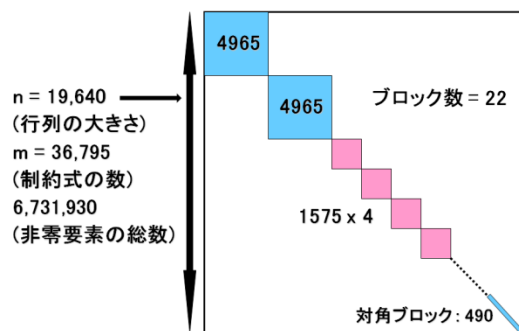


図 4 : 巨大 SDP のブロック構造

(3) 超大規模ネットワークにおける高速探索技術の開発大規模なネットワークデータ上における最短路計算などのグラフ探索アルゴリズムには以下のように非常に幅広い応用があることが知られ

ている。

- ① 交通ネットワークにおける経路探索(カーナビゲーションシステム等)
- ② 災害時における避難や誘導等の支援システム
- ③ Twitter, Facebook などのソーシャルネットワークデータの解析

これらの応用においては、今後は超大規模ネットワークデータ(点数1億以上)が対象となることが予想されるので、超高速な探索アルゴリズムとソフトウェアの開発が急務となっている。そのため本研究においては数億点規模の超大規模ネットワークの探索アルゴリズムとソフトウェアの開発を行い、上記のオンライン・ソルバーに反映させた。交通データに対する経路探索。ソーシャルネットワークデータに対する動的な重要度、影響度の判定。各点の周辺、及び広域内における影響(情報の伝播力)を推定などの応用に用いることができる。また最短路ソルバーの性能は全米データ(点数が約2,400万点、枝数が約5,800万点)に対する1対全的最短路計算で数秒、超巨大データ(点数が約10億、枝数が約20億)に対する1対全最短路計算が約680秒と非常に高速に計算を行うことができた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計6件)

- ① 安井雄一郎, 藤澤克樹, 笹島啓史, 後藤和茂, 大規模最短路問題に対するダイクストラ法の高速化, *Transactions of the Operations Research Society of Japan*, 査読有, 掲載予定, 2011
- ② Makoto Yamashita, K. Fujisawa, Mituhiro Fukuda, Kazuhiro Kobayashi, Kazuhide Nakata, Maho Nakata, Latest developments in the SDPA Family for solving large-scale SDPs, *Handbook on Semidefinite, Cone and Polynomial Optimization: Theory, Algorithms, Software and Applications*, Springer Press, 査読有, 掲載予定, 2011
- ③ Y. Makoto and K. Fujisawa, Efficient Parallel Software for Large-Scale Semidefinite Programs, *The proceedings of the 2010 IEEE Multi-conference on Systems and Control*, September 8-10, Yokohama, Japan, , 査読有, 2010, CD-ROM.
- ④ 藤澤克樹, 最適化ソルバー開発への最

新の情報技術の適用について, オペレーションズ・リサーチ, 査読無 Vol.55 No.72, 2010

- ⑤ 藤澤克樹, 半正定値計画問題に対するソフトウェア SDPA について, 最適化: モデリングとアルゴリズム, 統計数理研究所共同研究レポート, 査読無, 23, 2009, pp184-216
- ⑥ M. Nakata, B. J. Braams, K. Fujisawa, M. Fukuda, J. K. Percus, M. Yamashita and Z. Zhao, Variational calculation of second-order reduced density matrices by strong N-representability conditions and an accurate semidefinite programming solver, *The Journal of Chemical Physics*, 査読有, 128, 2008, 164113-1,164113-14.

[学会発表] (計5件)

- ① K. Fujisawa, Fast and stable computation for the Semidefinite Programming, HPOPT 2010 - 11th International Workshop on High Performance Optimization Techniques, 2010.06.16, Tilburg University, The Netherlands
- ② K. Fujisawa, SDPA project: Solving large-scale semidefinite programs, Parallel Computing and SDP Workshop, 2010.12.01, Zuse-Institute Berlin, Deutschland
- ③ K. Fujisawa, New Technologies in the SDPA Project, The 20th International Symposium of Mathematical Programming (ISMP), 2009.8.26, Chicago, IL, USA
- ④ K. Fujisawa, SDPA Project and New Features of SDPA 7, The 4th Sino-Japanese Optimization Meeting, 2008.8.30, Tainan, Taiwan
- ⑤ K. Fujisawa, The SDPA Project; Solving Large-Scale Semidefinite Programs, SIAM Conference on Optimization 2008.5.12, Boston Park Plaza Hotel and Towers, Boston, MA, USA

[図書] (計1件)

- ① 藤澤克樹, 梅谷俊治 朝倉書店, 応用に役立つ50の最適化問題(応用最適化シリーズ3), 2009, 174

〔その他〕

ホームページ等

<http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/portal/>
(SDPA Online Solver)

<http://laqua.indsys.chuo-u.ac.jp/portal/>
(SDPA Online Solver)

<http://opt.indsys.chuo-u.ac.jp/portal/>
(最短路問題用 Online Solver)

<http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/sdpa/>
(SDPA ホームページ)

スーパーコンピュータによる量子物質科学
の計算で世界初の記録を達成 -- 3 分子の挙
動解明のための最適化問題を解決し、科学
技術の研究に貢献- 富士通、2010 年 5 月 28
日プレスリリース

<http://pr.fujitsu.com/jp/news/2010/05/28.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

藤澤 克樹 (FUJISAWA KATSUKI)
中央大学・理工学部・准教授
研究者番号：40303854

(2) 研究分担者

後藤 順哉 (GOTOH JUNYA)
中央大学・理工学部・准教授
研究者番号：4 0334031

野々部 宏司 (NONOBE KOJI)
法政大学・デザイン工学部・准教授
研究者番号：40324678

梅谷 俊治 (UMETANI SYUNJI)
大阪大学・情報科学研究科・准教授
研究者番号：80367820