

令和 2 年 6 月 12 日現在

機関番号：12605

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2019

課題番号：17K01246

研究課題名（和文）非凸な目的関数を持つ離散最適化問題に特化した整数計画アプローチ

研究課題名（英文）Model building and algorithms via integer programming for discrete nonconvex optimization

研究代表者

宮代 隆平（Miyashiro, Ryuhei）

東京農工大学・工学（系）研究科（研究院）・准教授

研究者番号：50376860

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,600,000円

研究成果の概要（和文）：数式で表された最適化問題の中には、式が非線形で、かつ変数の取りうる値が整数値しか許されないような離散最適化問題と呼ばれる種類の問題がある。この種の問題は近年、機械学習などの分野でよく表れ、現実的にも重要な問題とされている。本研究では、非凸な目的関数を持つ離散最適化問題をより高速に解くためのアルゴリズムを、整数計画法と呼ばれる手法を応用して開発した。その結果として、特に機械学習・統計学の分野で重要とされる特徴選択を扱う問題に対し、従来の研究より高速かつ高精度に解を求めることに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

社会的に解きたい問題には、複数のものからいくつかのものを選択する際に、最もよい選び方を決めたいという形式のものが多い。ただしこの種の問題は、現在の解き方では高性能なコンピュータを用いても計算に多大な時間がかかるものが大部分である。本研究では、そのような問題のうち特定の形式の問題について、より高速に解くための方法を開発した。研究成果を応用することにより、例えば機械学習という分野で扱われる「特徴選択」と呼ばれるような問題がより高速に解けるようになることが期待できる。

研究成果の概要（英文）：Mathematical optimization problems are not only theoretically but also practically important. These problems contain a class of nonconvex discrete optimization problems. Such problems are difficult to solve exactly because of their nonlinear and discrete nature. However, recent progress on machine learning requests us to solve these problems exactly. In this research, we developed a model building method and algorithms via integer programming (integer optimization) for a class of nonconvex discrete optimization problems. The proposed method allows us to solve feature selection problems in statistics and machine learning faster than existing methods. In addition, the quality of the obtained solutions is better than those obtained by the previous methods, for example, L1-regularization.

研究分野：数理最適化

キーワード：OR 整数計画法 数理計画法 アルゴリズム 最適化

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

非凸な目的関数を持つ離散最適化問題は、問題を解きにくくする「非線形性」「非凸性」「離散性」を全て含み、厳密な最適化は難しいことが知られている。これらの問題に対して、古くから SOS Type 1 や半連続変数などの整数計画法を用いたモデリングが知られているものの、近年は新しい発展がほぼ無く、大規模な問題の厳密な最適化は実現できていなかった。研究が進まなかった要因として、非凸な目的関数を持つ離散最適化問題は、以前には需要が多くなかったこともその一つと考えられる。

しかし、非線形だが凸な目的関数を持つ離散最適化問題が整数計画法の進歩によって厳密に最適化できるようになりつつあり、非線形で非凸な目的関数を持つ離散最適化問題が次の厳密最適化のターゲットとして注目されていた。また他の研究分野でも、機械学習における特徴選択問題など、非凸な目的関数を持つ離散最適化問題が重要であることが判明してきた。

### 2. 研究の目的

非凸な目的関数を持つ離散最適化問題は厳密な最適解を求めることが難しく、大規模な問題に対してはヒューリスティクスによる近似的な最適化が用いられてきた。一方で、厳密な最適化を行う研究として整数計画法を用いるものが多数あるが、それらのモデリング手法やアルゴリズムはあくまでも線形の整数計画問題を解くためのものがベースとなっており、非凸な離散最適化問題をモデリングして解いた際の性能はいまだに十分ではなかった。そこで本研究では、整数計画法によるアプローチを非凸な目的関数を持つ離散最適化問題に特化させて展開し、これらの離散最適化問題に対して厳密な最適解を求めるためのモデリングおよび高速なアルゴリズムを開発することを目的とした。

### 3. 研究の方法

#### (1) 区分線形関数で表現される非凸非単調な目的関数を持つ離散最適化問題のモデリング

区分線形関数で表現される非凸非単調な目的関数を持つ離散最適化問題は、SOS type 2 を始め、整数計画問題としてのモデリングがいくつか提案されている。これらの手法については、区分線形関数の個数分の整数変数が必要な定式化と、 $\log(\text{区分線形関数の個数})$ だけの整数変数が必要なものに分かれる。前者は変数の個数は多くなるが緩和問題の性能が強く、後者はその逆という特徴があるが、どちらのモデリングも扱う問題によって良し悪しが変わる状況である。本研究では、変数の個数を抑えたまま緩和問題の性能が悪化しないモデリングの開発を目指す。

#### (2) 離散的な凸関数と非凸関数の和で表される目的関数を持つ離散最適化問題のモデリング

離散的な線形項 +  $\log(\text{凸2次関数})$  という形式の離散最適化問題については、既に研究代表者らによって整数計画問題としてモデリングする手法を開発済みであるが、計算速度が遅いという欠点がある。そのため本研究では、この種の離散最適化問題のさらなる計算効率の向上を目指す。

#### (3) 異なる分野および現実社会からの非凸な目的関数を持つ離散最適化問題の発掘

いわゆる数理最適化以外の分野における、非凸な目的関数を持つ離散最適化問題について調査・解析を行い、扱う問題の枠組みを広げる。現状では、機械学習の分野で注目されている Lasso などの  $L_p$  正則化問題、化学プロセス制御の分野で現れる離接計画問題、都市計画の分野におけるある種のリスクを考慮したネットワーク設計問題などを非凸な構造を持つ分析すべき対象と確認しているが、これをさらに拡大する。

#### (4) その他の研究テーマ

本研究課題については、当初は以下のテーマについても研究を行う予定であったが、詳細は省略する。

- ・双線形項を含む目的関数を持つ離散最適化問題の数値不安定性の除去
- ・非凸な整数計画問題に特化した前処理アルゴリズム
- ・非凸な整数計画問題に適合した分枝順序の解析と改良
- ・Primal ヒューリスティクスとの相互作用を重視したモデリングの追究

### 4. 研究成果

本研究の研究成果は、大まかには三つの分野「特徴選択問題の解法の高速度・高精度化」「離

散的ネットワーク設計におけるモデリング手法の開発」「線形計画問題における単体法の解析」にまたがる。以下、順に(1)(2)(3)として記載する。

### (1) 特徴選択問題の解法の高速度・高精度化

特徴選択問題は、非凸な目的関数を持つ離散最適化問題の中でも、近年注目を集めている問題である。特徴選択問題は、統計学においては古くから知られていたが、近年の人工知能の興盛にともない、機械学習の分野でも注目が集まっている。特徴選択問題の解法としては、統計においては各種のヒューリスティクス、機械学習においては様々なL1正則化手法が研究されてきたが、どちらも近似解法であり、厳密最適化は行われてこなかった。

本研究は、そもそも「非凸な目的関数を持つ離散最適化問題に特化した整数計画アプローチ」をテーマにしていたが、研究を進めていくにつれ、各種の特徴選択問題に対して有効なアルゴリズムが複数開発できる見込みとなったため、特に特徴選択問題に対して研究の主眼を置いた。なお、特徴選択問題は本研究課題が対象とする「離散的な凸関数と非凸関数の和で表される目的関数を持つ離散最適化問題」という性質を持つものがほとんどであり、当初の研究目的にも合致している。

研究の結果として、主として以下の成果を得た。

#### ・条件数を制限した場合の特徴選択問題のモデリング

従来の手法では、特徴選択問題を解いた結果として、多重共線性を含む解が得られることがあり、そのような解が得られた場合は人為的な後処理を施す必要があった。本研究では、モデリングの段階で、多重共線性の指標である条件数を一定値以下に抑えるという制約式の開発に成功し、数値実験とともにその有効性を示した。

#### ・VIF値を制限した場合の特徴選択問題のモデリング

多重共線性の指標として、上記の条件数以外にもう一つ重要な指標としてVIF値がある。VIF値は逆行列の計算を必要とするため整数計画アプローチと相性が悪かったが、本研究ではVIF値を一定値以下に抑えるという線形制約式の開発に成功し、数値実験により制約式の正しさと得られた解の有効性を確認した。

#### ・多項ロジットモデルにおける特徴選択問題に対する整数計画アプローチ

多項ロジットモデルとは、二項ロジットモデルの一般化であり、商品の選択モデルなどに用いられる。従来の研究では二項ロジットモデルに対する整数計画アプローチまでしか得られていなかったが、本研究ではそれを拡張した多項ロジットモデルに対する整数計画アプローチを行い、モデルの構築に成功した。また、高速に近似解を計算できるアルゴリズムの開発を行い、計算機実験によりその有用性を実証した。

#### ・順序ロジットモデルにおける特徴選択問題に対する整数計画アプローチ

順序ロジットモデルを用いた特徴選択は、逐次ロジットモデルと並び現実問題でしばしば用いられる。本研究では、順序ロジットモデルを用いた特徴選択問題に現れる非線形な目的関数を接平面近似することにより、通常の方枝限定アルゴリズムで効率的に扱えるようにしたものである。本研究では適切な枚数の接平面を選ぶことにより、従来のヒューリスティクスより高精度な特徴選択ができることを実験により示した。

#### ・交差検証規準による特徴選択手法の整数計画問題としての定式化

交差検証規準は古くから知られているものの、それを用いた特徴選択手法の厳密解法は総当たりベースのものしか提案されておらず、小さなサイズの問題しか解けないのが現状であった。本研究ではこの問題に対し整数計画問題としての定式化を与え、先行研究の手法と比較してより大きなサイズの問題を解けることを示した。

### (2) 離散的ネットワーク設計におけるモデリング手法の開発

都市工学におけるネットワーク設計問題は、元より目的関数に離散性を含むが、従来の研究で扱われている問題は離散性を抜けば目的関数は凸なものがほとんどであった。本研究で扱ったネットワーク設計問題は、離散性を除外したとしても目的関数が凸ではない問題であり、従来扱われていた問題より困難さが本質的に上だと考えられる。本研究では、この問題に対し、層別ネットワーク化というモデリング手法を応用することにより、適当なサイズの整数計画問題としてモデリングすることに成功した。また、計算機実験により、得られた解の妥当性および有用性を確認した。この成果は、当初の研究対象である「区分線形関数で表現される非凸非単調な目的関数を持つ離散最適化問題のモデリング」および「異なる分野および現実社会からの非凸な目的関数を持つ離散最適化問題の発掘」に分類される。

### (3) 線形計画問題における単体法の解析

本成果については、当初は研究課題のテーマとしては予定していなかったものの、本来の研究テーマの重要な副産物として得られた。線形計画問題自体は離散最適化問題ではなく連続最適化問題であるが、それを解くアルゴリズムの単体法は離散性が表れた組合せ的解法とみなすことができる。本成果では、退化していない線形計画問題に対して、steepest-edge と呼ばれる変数選択ルールを用いた単体法の繰返し回数の解析を行い、その上界を導出することに成功した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Y. Takano, R. Miyashiro	4. 巻 -
2. 論文標題 Best subset selection via cross-validation criterion	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 TOP	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） 10.1007/s11750-020-00538-1	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 M. Naganuma, Y. Takano, R. Miyashiro	4. 巻 E102.D
2. 論文標題 Feature Subset Selection for Ordered Logit Model via Tangent-Plane-Based Approximation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 IEICE Transactions on Information and Systems	6. 最初と最後の頁 1046-1053
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1587/transinf.2018EDP7188	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 M. Tano, R. Miyashiro, T. Kitahara	4. 巻 47
2. 論文標題 Steepest-edge rule and its number of simplex iterations for a nondegenerate LP	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Operations Research Letters	6. 最初と最後の頁 151-156
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.orl.2019.02.003	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 K. Tanaka, R. Miyashiro, Y. Miyamoto	4. 巻 12
2. 論文標題 A layered network formulation for the safe walking route design problem	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1299/jamdsm.2018jamdsm0065	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 R. Tamura, K. Kobayashi, Y. Takano, R. Miyashiro, K. Nakata, T. Matsui	4. 巻 73
2. 論文標題 Mixed integer quadratic optimization formulations for eliminating multicollinearity based on variance inflation factor	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Global Optimization	6. 最初と最後の頁 431-446
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10898-018-0713-3	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 神谷俊介, 高野祐一, 宮代隆平	4. 巻 2069
2. 論文標題 混合整数二次錐計画法による情報量規準最小化手法の高速化	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 数理解析研究所講究録	6. 最初と最後の頁 42-49
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 R. Tamura, K. Kobayashi, Y. Takano, R. Miyashiro, K. Nakata, T. Matsui	4. 巻 60
2. 論文標題 Best subset selection for eliminating multicollinearity	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the Operations Research Society of Japan	6. 最初と最後の頁 321-336
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.15807/jorsj.60.321	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 田村隆太, 小林健, 高野祐一, 宮代隆平, 中田和秀, 松井知己	4. 巻 63
2. 論文標題 多重共線性を考慮した回帰式の変数選択問題の定式化	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 オペレーションズ・リサーチ	6. 最初と最後の頁 128-133
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 S. Kamiya, R. Miyashiro, Y. Takano	4. 巻 89
2. 論文標題 Feature subset selection for the multinomial logit model via mixed-integer optimization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of Machine Learning Research	6. 最初と最後の頁 1254-1263
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計15件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Y. Takano, R. Miyashiro
2. 発表標題 Best subset selection via cross-validation criterion
3. 学会等名 International Conference on Nonlinear Analysis and Convex Analysis-International Conference on Optimization: Techniques and Applications (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Kamiya, R. Miyashiro, Y. Takano
2. 発表標題 Feature subset selection for the multinomial logit model via mixed-integer optimization
3. 学会等名 The 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 宮代隆平
2. 発表標題 整数最適化アプローチへの入門
3. 学会等名 電子情報通信学会2019年総合大会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Tano, R. Miyashiro, T. Kitahara
2. 発表標題 On the number of simplex iterations of the steepest-edge for a nondegenerate LP
3. 学会等名 The 23rd International Symposium on Mathematical Programming (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Takano, R. Miyashiro
2. 発表標題 Recent advances in mixed-integer optimization approaches to feature subset selection
3. 学会等名 INFORMS Annual Meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 神谷俊介, 宮代隆平, 高野祐一
2. 発表標題 外部近似法による多項ロジットモデルの最良部分集合選択
3. 学会等名 最適化とその応用: 未来を担う若手研究者の集い2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田野昌也, 宮代隆平, 北原知就
2. 発表標題 退化していない線形計画問題におけるsteepest-edge規則の反復回数
3. 学会等名 最適化とその応用: 未来を担う若手研究者の集い2018
4. 発表年 2018年



1. 発表者名 永沼瑞穂, 高野祐一, 宮代隆平
2. 発表標題 数理最適化法による順序ロジットモデルの変数選択
3. 学会等名 最適化とその応用: 未来を担う若手研究者の集い2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 神谷俊介, 宮代隆平, 高野祐一
2. 発表標題 多項ロジットモデルの最良部分集合選択
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会60周年記念事業 本部SSOR2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高野祐一, 宮代隆平
2. 発表標題 交差確認規準による回帰式の最良変数選択
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2019年春季研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Tamura, K. Kobayashi, Y. Takano, R. Miyashiro, K. Nakata, T. Matsui
2. 発表標題 Mixed-integer quadratic optimization formulations for eliminating multicollinearity based on variance inflation factor
3. 学会等名 INFORMS 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Y. Miyamoto, R. Miyashiro, K. Tanaka
2. 発表標題 Solution Methods of Safe Walking Route Design Problem
3. 学会等名 INFORMS 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Tanaka, R. Miyashiro, Y. Miyamoto
2. 発表標題 Relaxation of tree assumption in safe walking route design problem
3. 学会等名 International Symposium on Scheduling 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 宮代隆平
2. 発表標題 特徴選択に対する整数計画アプローチ
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会「離散アルゴリズムの応用と理論」研究部会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 神谷俊介, 高野祐一, 宮代隆平
2. 発表標題 混合整数二次錐計画法を用いた情報量規準最小化手法の高速化
3. 学会等名 京都大学数理解析研究所研究集会「数理最適化の発展：モデル化とアルゴリズム」
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
--	---------------------------	-----------------------	----