

平成22年 4月28日現在

研究種目：基盤研究（B）
 研究期間：2007～2009
 課題番号：19310096
 研究課題名（和文）超大規模半正定値計画への挑戦 — 疎性の活用，並列計算と多項式最適化問題への応用
 研究課題名（英文）A challenge to huge scale semidefinite programs --- exploiting sparsity, parallel computation and polynomial optimization problems
 研究代表者
 小島 政和（KOJIMA MASAKAZU）
 東京工業大学・大学院情報理工学研究科・教授
 研究者番号：90092551

研究成果の概要（和文）：

理工学のさまざまな分野に多くの応用を持つ重要な最適化問題である半正定値計画問題に対する高速で安定した数値解法（主双対内点法）の研究を行い，それに基づいたソフトウェア SDPA を開発し公開したことが主たる研究成果である．これにより，従来解けなかった大規模な半正定値計画問題を高速に解くことが可能となった．さらに，SDPA を組み込んだ多項式最適化問題の解法ソフトウェア SparsePOP，大規模なセンサーネットワーク位置同定問題の解法ソフトウェア SFSDP を開発・公開している．

研究成果の概要（英文）：

We studied primal-dual interior-point methods for solving a semidefinite program which is one of the most important optimization problems having lots of applications in various fields of science and engineering, and developed a software package SDPA based on them. SDPA solves larger scale problems in shorter time than the existing software packages. As applications of SDPA, we provided SparsePOP for polynomial optimization problems and SFSDP for large scale sensor network localization problems.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	7,900,000	2,370,000	10,270,000
2008年度	3,600,000	1,080,000	4,680,000
2009年度	3,700,000	1,110,000	4,810,000
年度			
年度			
総計	15,200,000	4,560,000	19,760,000

研究分野：最適化の理論と手法

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，半正定値計画問題，並列計算，多項式，疎性，数値計画

1. 研究開始当初の背景

本研究の対象である半正定値計画問題（Semidefinite Program, 以下，SDP と略）

は $n \times n$ 対称行列変数 X に関する線形目的関数を X に関する線形等式・線形不等式条件と半正定値 (X の固有値がすべて非負) 条件の下

で最小化する問題である n 次元ベクトル空間で定義された線形計画問題の $n \times n$ 対称行列空間への拡張と見なせる。伝統的な凸最適化と比較して、SDP はより高度なモデル記述能力を備えている。例えば、制御分野の安定性に関する問題、量子化学分野の電子構造計算、工学分野のロバスト最適化等では SDP を用いての定式化が必須となっている。線形計画問題に対する主双対内点法が SDP に拡張されたことで強力な計算手法が確立され、SDP は最適化分野で中核をなす数理モデルの 1 つとして位置付けられている。しかし、研究の開始時点では高精度に解ける SDP の規模 (X の次元 n および条件の個数) は実用上・応用上十分な大きさに達していなかった。その主な理由は、非凸最適化問題に SDP 緩和を適用する場合、解くべき問題の規模の増大と緩和の精密化につれて SDP 緩和問題の規模が急速に増大することにある。他の理由は、SDP が $n \times n$ 対称行列 X をその変数として含んでいることにある。 n 次元ベクトルを変数とする線形計画問題あるいは通常の最適化問題と比較すると SDP に含まれる実変数 (X の要素) の個数は n の 2 乗の速度で増加することにある。

2. 研究の目的

本研究の主目的は超大規模な SDP に挑戦することにある。より具体的には、大きく以下の 2 つに分けることが出来る。

(1) 大規模な SDP を高速に、かつ、安定して解く計算手法とそれに基づくソフトウェアの開発

(2) 上記の (1) の計算手法を応用として、多項式計画問題、量子化学分野での電子構造計算、センサネットワークの位置同定問題等から生じる大規模な最適化問題の高速数値解法の開発

3. 研究の方法

上記 2 つの目的とも、理論的な研究と計算機への実装・ソフトウェアの開発が必要である。理論面では SDP とその応用がカバーする最適化問題においてデータの疎性を有効活用することが計算手法の高速化の鍵となる。この点に関しては、すでにかかなりの蓄積があり、それをさらに発展させる。ソフトウェアの実装においては、これまでに開発してきた SDP に対する主双対内点法のソフトウェア SDPA (この研究の開始時点で Version 6.2.1) を中心にして、その改良と応用を行う。

4. 研究成果

(1) SDP に対する主双対内点法の数値的な安定性を向上させるための研究 (論文 28, 学会発表 11, 20). 主双対内点の数値的な不安定性を解消するために、自由変数を消去する方法等を提案した。これにより、これまで低い精

度の最適解しかえられなかった SDP の高精度の解を安定して計算することが可能になった。

(2) SDP に対する主双対内点法の計算効率をあげるための前処理に関する研究 (論文 1, 6, 28, 学会発表 1, 10, 11, 13, 18, ホームページ 4). コーダルグラフで特徴づけられる疎性を有効利用して、サイズが小さい SDP に変換する方法に関する研究を行い、それを実装したソフトウェア SparseCoLO を開発・公開した。

(3) SDP に対する主双対内点法ソフトウェア SDPA の高速化 (論文 16, 20, 26, 学会発表 12, 14, 19, 23, 24, 27, ホームページ 1). SDP に対する汎用ソフトウェアでは最高速を達成している。

(4) SDP に対する主双対内点法疎ソフトウェアの並列化 (論文 20, 26, 32, 学会発表 1, 2, 6, 19, 27, ホームページ 1). 上記の成果を SDPA の並列版である SDPARA にも取り込み、並列版の高速化を行った。

(5) 多項式最適化問題に対する SDP 緩和の拡張 (論文 7, 30, 学会発表 8). 通常が多項式最適化問題に対する SDP 緩和を、より一般的な問題である対称錐上の多項式最適化問題に拡張した。

(6) 多項式最適化問題の SDP 緩和手法の計算効率の向上 (論文 3, 8, 12, 15, 24, 学会発表 4, 8, 22). 補助変数を導入して多項式の次数をさげる、多項式 SDP として再定式化する等の工夫を取り込んで、計算コストを下げることを行った。

(7) 多項式最適化問題に対する SDP 緩和手法に基づくソフトウェアの SparsePOP の高速化 (論文 25, ホームページ 2). 上記の (3) による SDPA の高速化を SparsePOP にも取り入れて高速化を達成した。

(8) SDP のセンサネットワークの位置同定への応用 (論文 5, 学会発表 3, ホームページ 3). SDP 緩和問題に対して (2) で述べた変換手法を適用して大規模なセンサネットワークの位置同定を高速に解くことを可能にした。

(9) 量子化学分野での電子構造計算に関する研究 (論文 4, 19, 27, 29, 学会発表 16).

(10) その他の研究成果. 最適化手法の学習への応用 (論文 2, 9, 10, 11, 13, 14, 22, 23, 学会発表 5, 7, 9, 15, 17, 21, 25, 26, 29). 多項式方程式系の数値解法に関する研究 (論文 17, 31, 学会発表 28). SDP 緩和手法の拡散過程への応用に関する研究 (論文 21). SDP 緩和の微分方程式, 制御への応用 (論文 18)

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 32 件)

1. K. Murota, Y. Kanno, M. Kojima and S.

- Kojima, A Numerical Algorithm for Block-Diagonal Decomposition of Matrix *-Algebras, Part I: Proposed Approach and Application to Semidefinite Programming, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics 掲載決定. 査読あり.
2. A. Takeda and S. Taguchi, A Relaxation Algorithm with a Probabilistic Guarantee for Robust Deviation Optimization, Computational Optimization and Applications 掲載決定. 査読有り.
 3. S. Kim and M. Kojima, Solving polynomial least squares problems via semidefinite programming relaxations, Journal of Global Optimization, Vol.46, 1-23 (2010). 査読有り.
 4. M. Fukuda, Semidefinite Programmig from Optimization to Quantum Chemistry, Tokyo Institute of Technology Chronicle, Vol. 445, 10-12 (2009). 査読無し.
 5. S. Kim, M. Kojima and H. Waki, Exploiting Sparsity in SDP Relaxation for Sensor Network Localization, SIAM Journal of Optimization, Vol.20, 192-215 (2009) . 査読有り.
 6. S. Kim, M. Kojima and Ph. ~L. ~Toint, Recognizing Underlying Sparsity in Optimization, Mathematical Programming Vol.119, 273-303 (2009). 査読有り.
 7. M. Kojima and M. Muramatsu, A Note on Sparse SOS and SDP Relaxations for Polynomial Optimization Problems over Symmetric Cones, Computational Optimization and Applications, Vol.42, 31-41 (2009). 査読有り.
 8. M. Mevissen and M. Kojima, SDP Relaxations for Quadratic Optimization Problems Derived from Polynomial Optimization Problems, Asia-Pacific Journal of Operational Research. Vol.27, 1-24 (2010). 査読有り.
 9. A. Takeda and T. Kanamori, A Robust Approach Based on Conditional Value-at-Risk Measure to Statistical Learning Problems, European Journal of Operational Research, Vol.198, 287-296 (2009). 査読有り.
 10. A. Takeda, Generalization Performance of nu-Support Vector Classifier Based on Conditional Value-at-Risk Minimization, Neurocomputing, Vol. 72, 2351-2358 (2009). 査読有り.
 11. A. Takeda and M. Sugiyama, On Generalization Performance and non-convex optimization of extended nu-Support Vector Machine, New Generation Computing, Vol. 27, 259-279 (2009). 査読有り.
 12. H. Waki, M. Muramatsu and M. Kojima, Invariance under Affine Transformation in Semidefinite Programming Relaxation for Polynomial Optimization Problems, Pacific Journal of Optimization, Vol.5, 297-312 (2009). 査読有り.
 13. X. Bai, H. Wei, K. Fujisawa and Y. Wang, Semidefinite Programming for Optimal Power Flow Problems, The International Journal of Electrical Power & Energy Systems, In Press, Available online (2008). 査読有り
 14. J. Gotoh and A. Takeda, Conditional Minimum Volume Ellipsoid with Applications to Subset Selection for MVE Estimator and Multiclass Discrimination, Computational Optimization and Applications, Vol.41, 27-51 (2008). 査読有り.
 15. K. Kobayashi, S. Kim and M. Kojima, Sparse Second Order Cone Programming Formulations for Convex Optimization Problems, Journal of the Operations Research Society of Japan, Vol.51, 241-264 (2008). 査読有り.
 16. K. Kobayashi, S. Kim and M. Kojima, Correlative Sparsity in Primal-Dual Interior-Point Methods for LP, SDP and SOCP, Applied Mathematics and Optimization, Vol.58, 69-88 (2008). 査読有り.
 17. M. Kojima, Efficient Evaluation of Polynomials and Their Partial Derivatives in Homotopy Continuation Methods, Journal of the Operations Research Society of Japan, Vol.51, 29-54 (2008). 査読有り.
 18. M. Mevissen, M. Kojima, J. Nie and N. Takayama, Solving partial differential equations via sparse SDP relaxations, Pacific Journal of Optimization Vol. 4, 213 - 241 (2008). 査読有り.
 19. 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, Vol.128, 164113, (2008). 査読有り
 20. 中田和秀, 藤澤克樹, 福田光浩, 山下真, 中田真秀, 小林和博, 最適化ソフトウェア SDPA, 応用数理, Vol. 18, 2-14, (2008). 査読有り
 21. 鈴木健太郎, 三好直人, 小島政和, 拡散過程の生存確率に対する半正定値計画を用いた数値計算手法, Transactions of the Operations Research Society of Japan, Vol.

51, 25-43 (2008). 査読有り.

22. A. Takeda, S. Taguchi and R. H. Tutuncu, Adjustable Robust Optimization Models for a Nonlinear Two-Period System, Journal of Optimization Theory and Applications, Vol. 136, 275-295 (2008). 査読有り.

23. A. Takeda and M. Sugiyama, ν -Support Vector Machine as Conditional Value-at-Risk Minimization, Proceedings of the 25th International Conference on Machine Learning (ICML 2008), 1056-1063 (2008). 査読有り.

24. C. Vo, M. Muramatsu and M. Kojima, Equality Based Contraction of Semidefinite Programming Relaxations in Polynomial Optimization, Journal of the Operations Research Society of Japan, Vol. 51, 111-125 (2008). 査読有り

25. H. Waki, S. Kim, M. Kojima, M. Muramatsu and H. Sugimoto, SparsePOP : a Sparse Semidefinite Programming Relaxation of Polynomial Optimization Problems, ACM Transactions on Mathematical Software Vol.35, 15 (2008). 査読有り.

26. K. Fujisawa, K. Nakata, M. Yamashita and M. Fukuda, SDPA Project : Solving Large-scale Semidefinite Programs, Journal of the Operations Research Society of Japan, Vol.50, 278-298, (2007). 査読有り

27. M. Fukuda, B. Braams, M. Nakata, M. Overton, J. Percus, M. Yamashita and Z. Zhao, Large-scale semidefinite programs in electronic structure calculation , Mathematical Programming B, Vol.109 , 553-580 (2007), 査読有り.

28. K. Kobayashi, K. Nakata and M. Kojima, A Conversion of an SDP Having Free Variables into the Standard Form SDP, Optimization and Applications Vol. 36, 289-307 (2007). 査読有り.

29. M. Fukuda, M. Nakata and M. Yamashita, SemiDefinite Programming: Formulations and Primal-Dual Interior-Point Methods, in Reduced-Density-Matrix Mechanics with Applications to Many-Electron Atoms and Molecules, edited by D. A. Mazziotti, John Wiley & Sons, Inc. pp. 103-118 (2007), 査読有り.

30. M. Kojima and M. Muramatsu, An Extension of Sums of Squares Relaxations to Polynomial Optimization Problems over Symmetric Cones, Mathematical Programming, Vol.110, 315-336 (2007). 査読有り.

31. T. Mizutani, A. Takeda and M. Kojima, Dynamic Enumeration of All Mixed Cells,

Discrete and Computational Geometry Vol. 37 (3) 351-367 (2007). 査読有り.

32 M. Yamashita, K. Fujisawa and K. Nakata, Parallel Solver for Semidefinite Programming, International Journal of LOGISTICS and SCM Systems, Vol.2, (2007). 査読有り

[学会発表] (計 43 件)

1. K. Fujisawa, New Technologies in the SDPA Project, The 20th International Symposium of Mathematical Programming (ISMP), Chicago, IL, USA, August 23 - 28 2009.

2. K. Fujisawa, M. Fukuda, Y. Futakata, K. Kobayashi, M. Kojima, K. Nakata and M. Nakata, Parallel Software for Semidefinite Programming with Sparse Schur Complement Matrix, The 20th International Symposium of Mathematical Programming (ISMP), Chicago, IL, USA, August 23 - 28 2009.

3. S. Kim and M. Kojima, Exploiting Sparsity in SDP Relaxation for Sensor Network Localization, The 20th International Symposium of Mathematical Programming (ISMP), Chicago, IL, USA, August 23 - 28 2009.

4. M. Mevissen and M. Kojima, Reduction of SDP Relaxations for Polynomial Optimization Problems, The 20th International Symposium of Mathematical Programming (ISMP), Chicago, IL, USA, August 23 - 28 2009.

5. A. Takeda and M. Sugiyama, Non-convex Optimization of Extended ν -Support Vector Machine, The 20th International Symposium of Mathematical Programming (ISMP), Chicago, IL, USA, August 23 - 28 2009.

6. M. Yamashita, K. Fujisawa, M. Fukuda, Y. Futakata, K. Kobayashi, M. Kojima, K. Nakata and M. Nakata, Parallel Software for Semidefinite Programming with Sparse Schur complement Matrix, The 20th International Symposium of Mathematical Programming (ISMP), Chicago, IL, USA, August 23 - 28 2009.

7. 武田朗子, 数理最適化から機械学習へのアプローチ, 第3回 NEC データマイニングセミナー, NEC 知的資産 R&D ユニット中央研究所, 神奈川県川崎市, 2009年5月18日. 査読無し.

8. M. Kojima, Global Optimization Using Semidefinite Programming Relaxation, Nonlinear Analysis and Convex Analysis, Tokyo Institute of Technology, Tokyo,

March 27-31, 2009.

9. 武田朗子, 機械学習で使われる最適化手法の紹介, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 春季研究発表会, 筑波大学, 茨城県つくば市, 2009年3月18日. 査読無し.

10. M. Kojima, Exploiting Sparsity in Matrix Inequality and Its Application to Polynomial SDP, Workshop of Computational Polynomial Optimization and Multilinear Algebra, The Hong Kong Polytechnic University, December 22-23, 2008.

11. M. Kojima, Conversion Methods for Large Scale SDPs and Their Applications to Polynomial Optimization Problems, Workshop: Advances in Mathematical Modeling and Computational Algorithms in Information Processing, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo November 1, 2008.

12. M. Yamashita, M. Fukuda, M. Kojima, K. Nakata, K. Fujisawa, K. Kobayashi and M. Nakata, SDPA: Leading-edge Software for SDP, INFORMS Annual Meeting 2008, Marriott Wardman Park Hotel, Washington DC, USA, October 12-15, 2008.

13. M. Kojima, Conversion Methods for Large Scale SDPs to Exploit Their Structured Sparsity, The 4th Sino-Japanese Optimization Meeting, National Center for Theoretical Sciences, National Cheng-Kung University, Tainan, Taiwan, August 27-31, 2008.

14. K. Fujisawa, M. Kojima, M. Fukuda, K. Nakata, M. Yamashita, M. Nakata and K. Goto, SDPA Project and New Features of SDPA7, The 4th Sino-Japanese Optimization Meeting, National Center for Theoretical Sciences, National Cheng-Kung University, Tainan, Taiwan, August 27-31, 2008.

15. A. Takeda, Statistical Learning Models Based on Conditional Value-at-risk, The 4th Sino-Japanese Optimization Meeting, National Center for Theoretical Sciences, National Cheng-Kung University, Tainan, Taiwan, August 27-31, 2008.

16. M. Fukuda, Large-Scale Semidefinite Programming Applications in Theoretical Chemistry and Data Assimilation, VII Brazilian Workshop on Continuous Optimization, State University of Campinas, Campinas, Brazil, July 28-31, 2008.

17. A. Takeda, Statistical Learning Models Based on Conditional Value-at-risk, The 25th International Conference on Machine Learning (ICML 2008), July 6, 2008,

University of Helsinki, Helsinki, Finland.

18. M. Kojima, Conversion Methods for Large Scale SDPs to Exploit Their Structured Sparsity, The MIT Computation for Design and Optimization Program Distinguished Speaker Series, Massachusetts Institute of Technology, May 14, 2008.

19. K. Fujisawa, The SDPA Project: Solving Large-Scale Semidefinite Programs, SIAM Conference on Optimization (OP08), Boston, MA, USA, May 10-13, 2008.

20. M. Kojima, S. Kim and H. Waki, "Elimination of Free Variables for Solving Linear Optimization Problems Efficiently," SIAM Conference on Optimization, Boston, May 10 - 13, 2008.

21. A. Takeda, Modified Algorithm for Nonconvex Support Vector Classification, Artificial Intelligence and Applications (AIA 2008), Congress Innsbruck (Innsbruck, Austria), February 2008.

22. M. Kojima, Exploiting Sparsity in Polynomial Optimization Problems, Nonconvex Programming: Local and Global Approaches, Theory, Algorithms and Applications, National Institute for Applied Sciences, Rouen, France, 17-21 December 2007.

23. K. Nakata, K. Fujisawa, M. Fukuda, K. Kobayashi, M. Kojima, M. Nakata, M. Yamashita, New Features of SDPA (semidefinite programming algorithm), INFORMS Annual Meeting, Seattle, November, 2007.

24. M. Yamashita, Computational Time Estimation of SDP Solvers INFORMS Annual Meeting 2007, Washington Convention Center, Seattle, USA, November 4-7, 2007.

25. 武田朗子, ロバスト最適化問題への確率的アプローチ, 第19回 RAMP シンポジウム (RAMP2007), 長崎ブリックホール国際会議場, 2007年10月25-26日.

26. A. Takeda, Application of Conditional Value-at-Risk to Statistical Learning Problems, ICCOPT-II (the Second International Conference on Continuous Optimization), McMaster University (Hamilton, Canada), August 2007.

27. K. Fujisawa, M. Kojima, K. Nakata, M. Fukuda, M. Yamashita and M. Nakata, SDPA Project: Solving Large-scale Semidefinite Programs, Workshop on Advances in Optimization, Tokyo Institute of Technology, Japan, April 19-21, 2007.

28. M. Kojima, Polyhedral Homotopy Methods vs Semidefinite Programming Relaxations for Problems Involving Polynomials, Workshop on Advances in Optimization, Tokyo Institute of Technology, Japan, April 19-21, 2007.

29. A. Takeda, Support Vector Machine Based on Conditional Value-at-Risk Minimization, Workshop on Advances in Optimization, Tokyo Institute of Technology, Japan, April 19-21, 2007.

[図書] (計1件)

1 応用に役立つ50の最適化問題(応用最適化シリーズ3), 藤澤克樹, 梅谷俊治 著, 朝倉書店, 2009年8月.184頁

[産業財産権]

○取得状況 (計1件)

1 名称: 充足可能列挙システム
発明者: 小島政和, 宇野毅明, 秋葉博
権利者: (株) アライドエンジニアリング,
国立大学法人東京工業大学, (株) マツダ
種類: 特許
番号: 4298333
取得年月日: 2009年4月24日
国内外の別: 国内

[その他]

ホームページ等

1 ソフトウェア SDPA ホームページ

<http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/sdpa/>

2. ソフトウェア SparsePOP ホームページ

<http://www.is.titech.ac.jp/~kojima/SparsePOP/SparsePOP.html>

3. ソフトウェア SFSDP ホームページ

<http://www.is.titech.ac.jp/~kojima/SFSDP122/SFSDP.html>

4. ソフトウェア SparseCoL0 ホームページ

<http://www.is.titech.ac.jp/~kojima/SparseCoL0/SparseCoL0.htm>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小島 政和 (KOJIMA MASAKAZU)

東京工業大学・大学院情報理工学研究科・教授

研究者番号; 90092551

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

藤澤 克樹 (FUJISAWA KATSUKI)

中央大学・理工学部・准教授

研究者番号: 40303854

武田 朗子 (TAKEDA AKIKO)

慶應義塾大学・大学院理工学研究科・専任講師

研究者番号: 80361799

中田 和秀 (NAKATA KAZUHIDE)

東京工業大学・大学院社会理工学研究科・准教授

研究者番号: 00312984

山下 真 (YAMASHITA MAGKOTO)

東京工業大学・大学院情報理工学研究科・助教

研究者番号: 20386824

福田 光浩 (FUKUDA MITUHIRO)

東京工業大学・グローバルエッジ研究院・助教

研究者番号: 80334548

(4) 海外研究協力者

Sunyoung Kim

Ewha W. University 数学科・教授