

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 5 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26282085

研究課題名(和文) 機械学習に基づく汎用的な組合せ最適化アルゴリズムの自動構成

研究課題名(英文) Automated configuration of general-purpose optimization algorithms via machine learning techniques

研究代表者

梅谷 俊治 (Umetani, Shunji)

大阪大学・情報科学研究科・准教授

研究者番号：80367820

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 6,500,000円

研究成果の概要(和文)：組合せ最適化の専門知識を持たない利用者が、産業や学術の幅広い分野において日々新に生じる現実問題を短期間で解決するには、これらの問題を整数計画問題などの汎用的な組合せ最適化問題に定式化して高性能なアルゴリズムを適用することが望ましい。しかし、問題の汎用性が高まればアルゴリズムの性能向上に利用できる特徴的な構造が失われるため、汎用的な組合せ最適化問題に対して高性能なアルゴリズムを開発することは困難である。本研究では、実行時に個別の入力データからアルゴリズムの性能向上に役立つ構造を発見し、アルゴリズムの設定や構成を自動的に決定する手法を提案し、汎用的かつ高性能な組合せ最適化アルゴリズムを実現する。

研究成果の概要(英文)：For most non-expert users suffers, it is desirable to formulate their real world problems into general-purpose combinatorial optimization model such as mixed integer programming problem (MIP) and constraint satisfaction problems (CSP) and solve them by the state-of-the-art algorithms. However, it would be certainly difficult to attain comparable results to those of the specially tailored algorithms, because the hardness of extracting the useful features for improving the efficiency of algorithms from the general form of MIP and CSP. In this research project, in order to achieve a general-purpose algorithm with highest performance, we developed automated system that configures a metaheuristic algorithm for the instance to be solved by combining a wide variety of components and tuning program parameters at runtime.

研究分野：組合せ最適化

キーワード：組合せ最適化 アルゴリズム

1. 研究開始当初の背景

近年、産業や学術の幅広い分野における現実問題の多くが組合せ最適化問題に定式化できることが知られるようになり、特に、現実世界から収集された大規模データに基づく大規模かつ多様な組合せ最適化問題に対する効率的なアルゴリズムの開発が求められるようになった。

計算困難な組合せ最適化問題に対する代表的な手法として、問題を整数計画問題に変換して分枝カット法を適用する方法や、個別の問題に含まれる特徴的な構造を利用してメタヒューリスティクスを開発する方法などが知られている。整数計画問題は多くの現実問題をモデル化できる汎用的な最適化問題であるが、分枝カット法は解候補を体系的に列挙するため、入力データの大きさに対して最悪の計算時間が指数関数的に増大する問題点がある。一方で、高性能なメタヒューリスティクスを開発するには個別の問題に含まれる特徴的な構造を利用するため、最適化の専門家であっても新たな問題に取り組むたびにアルゴリズムの開発に多大な手間を要する問題点がある。

2. 研究の目的

日々新たに生じる多様な現実問題に迅速に対応するためには、これらの問題を整数計画問題や制約充足問題などの汎用的な最適化問題にモデル化し、その問題に対する高性能なアルゴリズムを開発することが望ましい。しかし、問題の汎用性が高まれば、アルゴリズムの性能向上に役立つ特徴的な構造が失われるため、汎用的な最適化問題に対して高性能なアルゴリズムを開発することは非常に困難である。たしかに、産業や学術の幅広い分野に生じる現実問題は多種多様で、これらの問題に共通して現れる特徴的な構造は存在しない。また、整数計画問題の $\min\{c^T x \mid Ax=b, x \in \{0,1\}\}$ という一般的なモデルからアルゴリズムの性能向上に役立つ特徴を見つけ出すことも困難である。

一方で、現実問題をモデル化して得られる個別の入力データは無秩序で全く構造を持たないわけではなく、実際には、グラフ、論理、順序、割当などの典型的な離散構造で記述される特徴的な部分から構成される場合が多く、データマイニングや機械学習の手法を用いてアルゴリズムの性能向上に役立つ特徴を発見することは可能である。さらに、あらかじめアルゴリズムの仕様を全て決定する必要はなく、実行時にアルゴリズムの仕様の一部を変更する機能を持たせれば、個別の入力データの持つ特徴的な構造に合わせた高性能なアルゴリズムを実現することは可能である。

本研究では、整数計画問題などの汎用的な組合せ最適化問題に対して、実行時に個別の入力データからアルゴリズムの性能向上に役立つ特徴的な構造を発見し、その構造に合わせてアルゴリズムの設定や構成を自動的に決

定する手法を提案し、大規模かつ多様な現実問題に対応できる汎用的かつ高性能なメタヒューリスティクスを開発する(図1)。

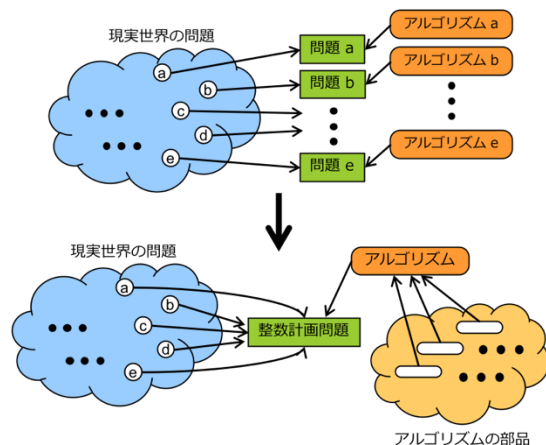


図1: 従来のメタヒューリスティクス(上)と提案するメタヒューリスティクス(下)

現実世界から収集された大規模データに基づく組合せ最適化問題は十分に整理されていない場合が多く、近年の情報爆発による問題の大規模・多様化も相まって、最適化の専門家であってもアルゴリズムの性能向上に役立つ構造を発見することが困難な事例が急増している。本研究により、最適化の専門家さえ発見が困難な隠れた構造を自動的に発見できるようになれば、より高性能な組合せ最適化アルゴリズムの実現が期待できる。この点において、提案手法は計算困難な組合せ最適化問題に対する従来手法の限界を乗り越える新たな枠組みとしての発展が期待できる。

3. 研究の方法

本研究では、現実世界から収集された大規模データに基づく大規模かつ多様な整数計画問題に対して、局所探索法を雛形とするメタヒューリスティクスを開発する。局所探索法は、現在の解に対してごく少数の変数の値に変更を加えて(近傍操作)、得られる解集合(近傍)の中に改善解があればその解に移動する手続きを繰り返すメタヒューリスティクスの基本戦略である。その設計における自由度は大きく、個々の問題に含まれる特徴的な構造を把握した上で、探索空間、解の評価、近傍の定義、移動戦略など各要素を注意深く設計することで高性能な局所探索法を実現できる。

(1) 評価計算の高速化

局所探索法において、改善解を発見するための近傍内の解候補の走査は近傍探索と呼ばれる。局所探索法では計算時間の大部分が近傍探索に費やされるため、大規模な組合せ最適化問題に対応する上でその効率化は最も重要な課題である。

整数計画問題では、解候補の評価関数の値を計算するために目的関数と全ての制約条件を走査する必要があるため、これが局所探索法の

計算時間の大部分を占めている。一方で、近傍操作では、ごく少数の変数のみ値が変化するため、現在の解 x と近傍内の解候補 $x' \in NB(x)$ の間で値が変化した変数に関わる部分のみ再計算すれば、評価関数値の変化量 $\Delta z(x) = z(x') - z(x)$ を高速に計算できる場合が多い。そこで、近傍内の解候補の評価計算に必要な情報を補助記憶に持ち、現在の解が移動する際に補助記憶を更新することで評価計算の高速化を実現する。局所探索法では、近傍内の解候補を評価する回数に比べて、現在の解が移動する回数ははるかに少ない場合が多いので、補助記憶の更新に多少時間がかかっても、全体では十分な高速化が実現できる。

具体的には、整数計画問題の各制約条件の左辺値をあらかじめ計算して補助記憶に持てば、評価関数値の変化量を効率良く計算できる。さらに、評価関数値の変化量を直接に補助記憶に持つことで、近傍内の解候補を定数時間で評価する方法を提案した。

(2) 変数間の関係を表す k -近傍グラフを用いた探索空間の縮小

整数計画問題に対して精度の良い近似解を求めるためには、複数の変数を同時に反転するより大きな近傍を持つ局所探索法を開発する必要がある。しかし、大規模な整数計画問題では、2つの変数の値を同時に反転する2反転近傍であっても近傍内の解候補の数が非常に多くなるため、大きな近傍を探索する際には改善する見込みの高い解候補にのみ絞り込む必要がある。整数計画問題では、同じ制約条件に同時に現れる頻度の高い変数の組を同時に反転させると改善解が得られ易い。

データマイニングにおける k -近傍法のアプローチを用いて、入力データから各変数に対応する制約行列 A の列ベクトルに関する k -近傍グラフを生成し(図2)、局所探索法における近傍探索の走査範囲を「同じ制約条件に同時に現れる頻度の高い変数の組」(類似度が高い列ベクトルの組)に絞り込むことで、個別の入力データに合わせて探索を効率化する手法を提案した。また、数千~数万制約、数十万~数百万変数におよぶ大規模な整数計画問題では、 k -近傍グラフの生成に多大な計算時間を要するため、探索時に k -近傍グラフの必要な部分のみを遅延生成する手法を提案した。

4. 研究成果

大規模な整数計画問題のベンチマーク問題例として、最大で5000制約、100万変数におよぶ集合被覆問題(47問)と、最大で約3400変数、約257万変数におよぶ集合分割問題(42問)に対して提案手法を適用した。いずれの問題でも、(1)評価計算の高速化、(2) k -近傍グラフを用いた探索空間の縮小により、計算効率の大幅な改善とそれにとまらう求解性能の向上を確認できた。また、最新の整数計画ソルバーや集合被覆問題、集合分割問題に対する専用アルゴリズムとの性能を比較し、整数

計画ソルバーを上回り、かつ専用アルゴリズムに迫る性能を達成したことを確認した。

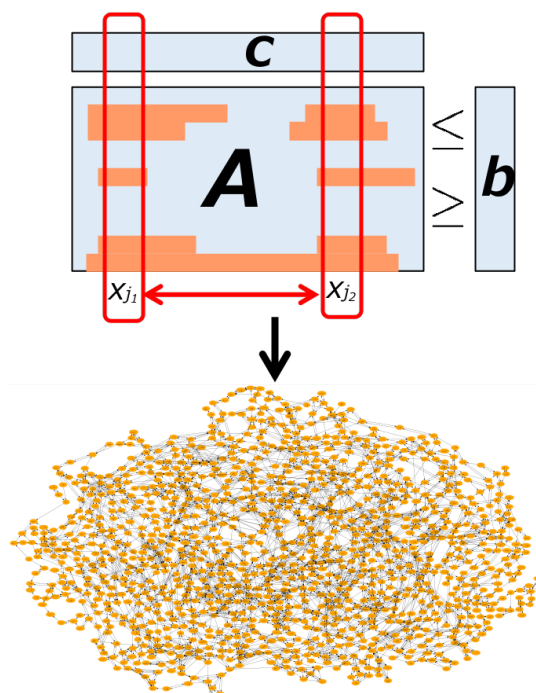


図2：整数計画問題の制約行列から k -近傍グラフを生成

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5件)

- ① S.Umetani, M. Arakawa, M. Yagiura, Relaxation heuristics for the set multicover problem with generalized upper bound constraints, *Computers & Operations Research*, **93** (2018), 90–100. DOI:10.1016/j.cor.2018.01.007 (オープンアクセス)
- ② S.Umetani, Exploiting variable associations to configure efficient local search algorithms in large-scale binary integer programs, *European Journal of Operational Research*, **263** (2017), 72–81. DOI:10.1016/j.ejor.2017.05.025 (オープンアクセス)
- ③ S.Umetani, Y. Fukushima, H. Morita, A linear programming based heuristic algorithm for charge and discharge scheduling of electric vehicles in a building energy management system, *Omega*, **62** (2017), 115–122. DOI: 10.1016/j.omega.2016.04.005
- ④ 西野 正彬, 鈴木 潤, 梅谷 俊治, 平尾 努, 永田昌明, 集合分割問題に基づく系列アラインメントのモデル化, 自然言語処理, **23** (2016), 175–194.
- ⑤ 梅谷 俊治, 組合せ最適化入門:線形計画

から整数計画まで, 自然言語処理, 21
(2014), 1059-1090.

[学会発表] (計 6 件)

- ① S.Umetani, Exploiting variable associations to configure efficient local search algorithms in large-scale binary integer programs, *2nd ISM-ZIB-IMI MODAL Workshop on Mathematical Optimization and Data Analysis*, 2017.
- ② 梅谷 俊治, 大規模な組合せ最適化問題に対する発見的解法—汎用性と性能を兼ね備えたアルゴリズムの実現を目指して, 第 61 回システム制御情報学会 研究発表講演会 チュートリアル講演, 2017.
- ③ 梅谷 俊治, 大規模な組合せ最適化問題に対する発見的解法, 電子情報通信学会総合大会 企画セッション「人工知能と最適化の理論と応用」, 2017.
- ④ S.Umetani, Y. Shinano, Communicating with external heuristic solvers to improve the performance of MIP solvers, *22nd International Symposium on Mathematical Programming (ISMP 2015)*, 2015.
- ⑤ S.Umetani, Exploiting variable associations to configure efficient local search algorithms in large-scale set partitioning problems, *Proceedings of the 29th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI-15)*, 2015.
- ⑥ S.Umetani, Variable association networks for identifying patterns in 0-1 integer programs, *Conference for the International Federation of Operational Research Societies (IFORS2014)*, 2014.

[その他]

ホームページ等

<https://sites.google.com/site/shunjiumentani/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

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

(2) 研究分担者

河原 吉伸 (KAWAHARA, Yoshinobu)
大阪大学・産業科学研究所・准教授
研究者番号: 00514796