不確実性下での最適化
—ロバスト最適化を中心に—

武田 朗子

キーワード：ロバスト最適化，不確実性，機会制約

1. はじめに

不確実性下での最適化，これは企業の研究所に就職して直面したテーマである．その仕事内容は火力発電の設備投資計画（電源開発計画）の立案だったが，一概に設備といっても，規模もいろいろ，使用燃料も石炭，石油，天然ガス等がある．しかし，電力需要や燃料価格を予想して単純なコスト最小化問題を作ると，燃料費の安さゆえに「古い設備を破棄して，石炭燃料の大規模設備に変えましょう」という使えない結果になってしまう．実際には，電力需要や燃料価格は変動するものだから，様々なスペック/使用燃料の設備を備えておくべきである．最適化問題の解を見たときには，「現実の問題は，コスト最小化のみを目的にするような簡単なものではないのだなぁ」と実感したものだった．さらに，地球環境問題への関心が高まってきたことを理由に，最近，ある石炭火力開発計画が中止になったようである．おそらく，コスト最小化に重点をおいて計画立案したものの，今後，環境問題のために石炭使用量が制限される状況を想定して，中止という結論を出したのだろう．ますます，不確実性が高まり，意思決定が難しくなっているようである．

不確実な状況下では，様々な状況を考慮して最適化問題を構築することが大切である．そこで，「これから起こりうる状況を想定できるか」が1つの重要なポイントになるだろう．状況想定はその業界の方々にお任せするとして，本稿では，起こりうる状況をいろいろ想定した上で「いかに意思決定を行うか」に注目したい．不確実性下での最適化手法として，ロバスト最適化を中心に，その定式化から最近の研究まで簡単に紹介する．

たけだ あきこ
東京工業大学 大学院情報理工学研究科
〒152-8552 目黒区大岡山 2-12-1

電源開発計画を持ち出さなくとも，実は，私達も何気なく，不確実な状況下での意思決定を行っている．例えば，就職活動期には“不況にも強い職種選び”などと題打った雑誌特集を読んだものだが，これはまさに，ここで紹介しようと思っている，ロバスト最適化の考え方といえよう．

2. 不確実な最適化問題

線形不等式制約1本のシンプルな形をした，不確実な線形計画問題について考えてみよう：

$$\min_{x} c^\top x \text{ s.t. } a^\top x \geq b. \tag{1}$$

制約式の係数 a が不確実であると仮定して，発電計画（電源運用計画）を立てる問題にあてはめてみる．変数 $x \in R^n$ は各発電設備による発電量を示し，c は単位発電量当たりの費用を示している．将来の電力需要 b や単位発電費用 c として，しばしば過去のデータから予測される値を用いるが，それらの値には予測誤差が含まれている．この場合，目的関数 $c^\top x$ は不確実になるが，新しい変数 s を導入して目的関数を s，そして制約式に $-c^\top x+s\geq 0$ を追加すれば，a が不確実という仮定で充分である．

また，「電力需要をみたすように供給したい」という供給安定性制約は $e^\top=(1 \cdots, 1)$ を用いて $e^\top x \geq b$ と表せる．この場合には，不確実なのは需要量を示す b であるが，これは新しい変数 y_0 を導入して制約式を $e^\top x - by_0 \geq 0$, $y_0=1$ と記述すれば，a が不確実な問題(1)に帰着される．

不確実なデータを取り扱う基本的な方法に感度分析と呼ばれる手法があるが，これは最適解が何か得られ

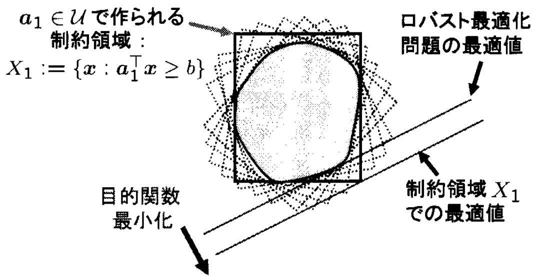

図1　ロバスト最適化問題のイメージ

た後の，いわば事後評価である．より直接的に不確実性を取り扱う手法として，以下の2つの方法を紹介したい．

2.1　確率計画法によるアプローチ

不確実なデータを確率的な事象とみなして，関数値の期待値や制約式を満たす確率を評価して最適化を行う方法である．a に確率分布を仮定し，次のような制約式を扱っている．

期待値制約：$\min_x c^\top x$ s.t. $\mathrm{E}[a^\top x] \geq b$

機会制約：$\min_x c^\top x$ s.t. $\Pr\{a^\top x \geq b\} \geq p$

Charnes & Cooper[3]によって提案された機会制約は，通常は凸にはならない，扱いにくい制約式として知られている．

2.2　ロバスト最適化よるアプローチ

不確実なデータの取りうる範囲 $\mathcal{U}$ をあらかじめ想定して，それらのデータによる制約式をすべて満たす解の中から，最もよいものを見つける手法である．a の範囲 $\mathcal{U}$ を仮定して，次のように定式化する．

$$\min_x c^\top x \ \text{s.t.}\ a^\top x \geq b,\ \forall a \in \mathcal{U}. \tag{2}$$

図1の斜線部分が問題(2)の実行可能領域にあたる．この領域は，最も厳しい状況を想定した制約式 $\min_{a\in\mathcal{U}} a^\top x \geq b$ で表せることから，最悪の事態を想定して最適化を行う方法ともいえる．

不確実な最適化問題に対してどの手法を用いるかは，モデルを立てる人の問題意識によるだろう．もしくは，a に対する仮定の妥当性に依存するかもしれない．過去の実現値から $\mathcal{U}$ が大体わかる，さらに想定される制約式を厳密に満たす解が欲しい，のであれば，ロバスト最適化によるアプローチが適当であろう．

3.　ロバスト最適化

3.1　今，なぜロバスト最適化なのか

ロバスト最適化問題の原型は70年代にSoyster[7]によって提案されたが，Ben-Tal & Nemirovskiの研究[1]をきっかけに，再び脚光をあびるようになった．また，時期を同じくして，ロバスト制御の流れからEl Ghaoui & Lebret[4]が同様の定式化を示している．脚光をあびている理由として，1：不確実性の高い時代に，最悪状況で被る損失をなるべく小さくしたいというロバスト最適化の考え方がマッチしている(実務家向けの理由)，2：ある $\mathcal{U}$ の下でのロバスト最適化問題(2)が，近年，研究の盛んな二次錐計画問題や半正定値計画問題に帰着される（研究者向けの理由）などが挙げられる．

不確実な問題であっても，実際に最適化問題を構築する際に，将来を予測して問題の入力データ a をエイヤと決めてしまうことが多いのではないだろうか．Ben-Tal等は，a を1つ決めて得られる最適化問題の解が，a を微小に変動させた制約式 $a^\top x \geq b$ を大きく破ってしまう例を示している．最適トラス設計や化学プロセス設計問題では，入力データ a の微小な変動によって解が大きく制約を破ると，大きな事故に繋がる可能性がある．ロバスト最適化による解は，a が想定範囲内 $\mathcal{U}$ で動く分には制約式を破ることはない．微小な変動に対して強健（ロバスト）な解が必要とされる分野では，ロバスト最適化法がよく用いられている．

他にも，様々なロバスト最適化問題が提案されているが，簡単な適用例を2つ挙げたい．

ロバストポートフォリオ問題（文献[5]）：
最悪状況下でのリスクが最小になるようにポートフォリオを組みたいという目的から，ロバストポートフォリオ問題が研究されている．例えば，Markowitzの平均・分散モデルのベクトル μ と行列 Q が不確実であると想定して，次の問題を構築する．

$$\begin{aligned} \min_x \max_{Q\in\mathcal{U}_Q}\ & x^\top Q x \\ \text{s.t.}\quad & \mu^\top x \geq \alpha,\ \forall \mu \in \mathcal{U}_\mu \\ & e^\top x = 1. \end{aligned}$$

目的を変数 s の最小化に置き換えて，制約式に $x^\top Qx \leq s,\ \forall Q \in \mathcal{U}_Q$ を追加することにより，ロバスト最適化問題の定式化になる．シナリオベースの確率計画ポートフォリオ問題はロバスト版より前に提案されているが，それに比べると，不確実データを領域で扱える，シナリオが多い場合には確率計画問題よりも求解に時間がかからない，などメリットがある．

ロバスト最短経路問題（文献[8]）：
各辺に移動時間が与えられており，移動者は最短時間

で目的地に到達するまでの道のりを見つけたい．通常，各辺に与えられる移動時間は決まった値であるが，実際には，ピーク時には交通渋滞が起こるかもしれないし，事故があるかもしれないから，不確実なものである．この仮定の下でロバスト最短経路問題が構築されている．

3.2 求解を可能にする $\mathcal{U}$

ロバスト最適化問題(2)の制約式 $a^\top x \geq b,\ \forall a \in \mathcal{U}$ について考えてみよう．もし，$\mathcal{U}=\{a_1, \dots, a_m\}$ で与えられるならば，この制約式は m 本の不等式制約 $a_i^\top x \geq b,\ i=1, \dots, m$ となり，ロバスト最適化問題は簡単に解ける．しかし，$\mathcal{U}$ が無限個のベクトルで成り立つ場合には，問題は無限本の制約式を持つことになり，とたんに難しくなる．そこで，$\mathcal{U}$ をどのように記述すれば扱いやすい問題に帰着できるか，という視点から研究が進められている．下に挙げる $\mathcal{U}$ は，扱いやすい問題に帰着できるものとして知られている．

●矩形：$\mathcal{U}=[a_0-\bar{a}, a_0+\bar{a}]$ (Soyster[7])

$\bar{a} \geq 0$ より，問題(2)の制約式は1本の不等式：

$$\operatorname*{mix}_{Q \in \mathcal{U}} a^\top x = a_0^\top x - \bar{a}^\top |x| \geq b \tag{3}$$

で表される．さらに，新たな変数 y を導入して，この制約式を

$$a_0^\top x - \bar{a}^\top y \geq b,\ -y \leq x \leq y,\ y \geq 0$$

と記述すると，ロバスト線形計画問題(2)は通常の線形計画問題として定式化される．図2(左)が示すように，$\mathcal{U}$ は直方体であり，その角は，各成分について上限もしくは下限値がとられる極端な状況に対応している．さらに，式(3)より，ロバスト最適化問題ではこの極端な状況のみ考慮されることが分かる．その結果，得られる最適意思決定は保守的になり，Soyster の $\mathcal{U}$ の設定は“保守的すぎる”と指摘されている．

●楕円形：$\mathcal{U}=\{a_0+Au : \|u\| \leq 1\}$ (Ben-Tal & Nemirovski[1])

不確実なデータに対して楕円形の $\mathcal{U}$ を想定することで，各成分が上・下限値を同時に取るような極端な状況を排除することができる．この $\mathcal{U}$ のもとで，問題(2)の制約式は

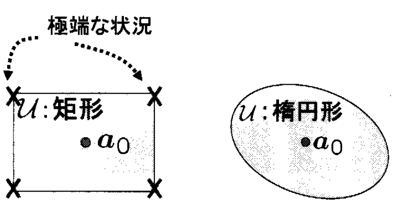

図2　矩形と楕円形の $\mathcal{U}$

$$\begin{aligned}&\operatorname*{mix}_{u : \|u\| \leq 1} (a_0+Au)^\top x \geq b \\ &= a_0^\top x + \operatorname*{mix}_{u : \|u\| \leq 1} (A^\top x)^\top u\end{aligned}$$

となる．右辺第2項の最適解は $u^* = -\dfrac{A^\top x}{\|A^\top x\|}$ と陽に得られ，上記の制約式は1本の制約式 $a_0^\top x - \|A^\top x\| \geq b$ で表現される．つまり，ロバスト線形計画問題(2)は，二次錐計画問題：

$$\min_x c^\top x \ \text{s.t.}\ -a_0^\top x + \|A^\top x\| \leq -b$$

に変形され，内点法で効率的に解くことができる．

他にも，扱いやすい $\mathcal{U}$ がいくつか提案されている．また，本稿で示したロバスト線形計画問題だけでなく，ロバスト二次錐計画問題等も提案されている．

4. ロバスト最適化研究の最近の流れ

実際にロバスト最適化問題を構築してロバスト解を求める場合に，最も難しくて重要な点は「$\mathcal{U}$ を如何に設定するか」であろう．不確実なデータの取りうる範囲 $\mathcal{U}$ を大きく設定すれば，どんな状況にも耐えうる解が得られることになる．しかし，あまりに $\mathcal{U}$ が大きい場合には，すべての制約式を満たす実行可能解がなくなってしまう．また，実行可能解が存在したとしても，余りに無難な解を出すかもしれない．例えば，ロバストポートフォリオ問題では，問題の設定によっては，「無危険資産に投資しましょう」という面白くない最適解が得られる可能性もある．

そこで，解のロバスト性と想定する範囲 $\mathcal{U}$ の大きさのトレードオフについて，研究が進められている．$\mathcal{U}$ の構築に CVaR (Conditional Value-at-Risk) を用いることも提案されている．

また，最近の傾向として，用意する無限本の制約式をすべて満たす必要はない，という考えのもと，機会制約を取り入れた研究が増えている．中でも，Calafiore & Campi の研究[2]は非常に面白いので，その成果を紹介したい．

ロバスト最適化問題に対して，$\mathcal{U}$ からベクトルをランダムに N 個サンプリングして，N 本の制約式を持つ緩和問題 (P_N) を解くことを提案している．ここでは，適当にサンプル数 N を決めるのではなく，精度よい緩和解を得るためにどれくらいのサンプル数 N が必要かを論じている．

問題(2)に対して，次の緩和問題を構築する．

$$(P_N) \left| \min_x c^\top x \ \text{s.t.}\ a_i^\top x \geq b,\ i=1, \dots, N.\right.$$

その緩和解 $\hat{x}_N$ は，問題(2)の制約式を破る確率：$V(\hat{x}_N)=\Pr\{a\in\mathcal{U}:a^\top\hat{x}_N<b\}$ を用いて，評価される．以下の定理は，確率的に $V(\hat{x}_N)\le\epsilon$ を満たすために必要なサンプル数を示している．そのサンプル数 N は，パラメータ ϵ と β の関数（n は x の次元）：

$$N(\epsilon,\beta)=\frac{2}{\epsilon}\log\frac{1}{\beta}+2n+\frac{2n}{\epsilon}\log\frac{2}{\epsilon}$$

に基づいて決められる．

定理1（文献[2]） $\epsilon\in(0,1)$，$\beta\in(0,1)$ とする．サンプル数 $N>N(\epsilon,\beta)$ の問題 (P_N) の最適解 $\hat{x}_N$ は，確率 $1-\beta$ 以上で $V(\hat{x}_N)\le\epsilon$ を満たす．

解のロバスト性はパラメータ ϵ で調節される．ほとんど全ての制約式を満たすようなロバスト解が必要であれば，ϵ を0近くに設定すればよいだろう（ただし，$N(\epsilon,\beta)$ が大きくなり，(P_N) の求解が難しくなるが）．さらに，$V(\hat{x}_N)\le\epsilon$ を

$$\Pr\{a\in\mathcal{U}:a^\top\hat{x}_N\ge b\}\ge1-\epsilon$$

と書き換えると，これはまさに機会制約である．問題 (P_N) はロバスト最適化問題の緩和問題であって，機会制約という視点からの評価も可能であり，非常に面白い．さらに，自分達の研究の宣伝で恐縮であるが，定理1を用いて，制約式を破る確率だけでなく破る大きさ $\max_{a\in\mathcal{U}} b-a^\top\hat{x}_N$ の見積りも可能である（文献[6]）．

Soysterの成果は，近年になってロバスト最適化として言及されている．先人の知恵に，半正定値計画や二次錐計画の研究発展という新たな知識が加わって，ロバスト最適化は数理計画における一つの研究分野として発展を遂げている．最近の研究として，他にも挙げたいものがいろいろあるが，挙げきれない状況である．これからの発展を楽しみにしている．

5. おわりに

ORの研究分野において，女性研究者をとりまく環境は昔に比べて大きく発展を遂げたことと思う．機械学習等の他分野の研究会に参加すると，女性研究者の少なさに驚くとともに，ORの研究分野に多くの女性研究者が活躍していることを改めて感じる．機会学習の研究者によると，「女性は白黒はっきりさせるのが好きだから，確率的な議論をする機会学習よりも，最適解を1つ見つける最適化手法の方が魅力的なのではないか」とのことだった．

個人的には，女性研究者の先輩方の御尽力により，居心地のよい研究環境が整っていることが，多くの女性研究者が活躍している一因なのではと思っている．まだ短い研究生活ではあるものの，苦労したという思いも特にない．それもこれも，女性研究者の先輩方のご奮闘によるものなのだろう．そんな先輩の一人であり，自分の人生設計すら未だ最適化できていない私を「21世紀を最適化する女性たち」に加えてくださった，吉瀬章子先生に感謝したい．

参考文献

[1] Ben-Tal, A. and Nemirovski, A.: "Robust convex optimization," *Mathematics of Operations Research*, 23 (1998) 769-805.

[2] Calafiore, G. and Campi, M. C.: "A new bound on the generalization rate of sampled convex programs," *43rd IEEE Conference on Decision and Control* (*CDC 04*), 5 (2004) 5328-5333.

[3] Charnes, A. and Cooper, W. W.: "Chance constrained programming," *Management. Science*, 6 (1959) 73-79.

[4] El Ghaoui, L. and Lebret, H.: "Robust solutions to least-squares problems with uncertain data," *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 18 (1997) 1035-1064.

[5] Goldfarb, D. and Iyengar, G.: "Robust portfolio selection problems," *Mathematics of Operations Research*, 28 (2003) 1-38.

[6] Kanamori, T. and Takeda, A.: "Worst-case violation of sampled convex programs for optimization with uncertainty," *Research Report B*-425, *Dept. of Mathematical and Computing Sciences, Tokyo Institute of Technology*, (2006).

[7] Soyster, A. L.: "Convex programming with set-inclusive constraints and applications to inexact linear programming," *Operations Research*, 21 (1973) 1154-1157.

[8] Yu, G. and Yang, J.: "On the robust shortest path problem," *Computers & Operations Research*, 25 (1998) 457-468.