不確かさを考慮する0-1整数計画問題に対するロバスト最適化

呉　偉

現実社会の重要な意思決定の多くを 0-1 整数計画問題として扱うことができる．最適化問題を解く際には，入力データが確定のものであるという前提でアルゴリズム設計されることが一般的である．しかし，現実問題においては，多くの場合，入力データには誤差や不確かさが内在している．不確かさを考慮する意思決定の際に，ロバストな解を求めるために用いる基準として，最大リグレット最小化基準が代表的なものの一つになってきた．この基準では，真のシナリオを事前に知っていた場合の最適解との評価値の差（リグレット）が小さい解ほど高く評価される．本稿では，ロバスト最適化の問題設定を紹介したのち，最大リグレット最小化基準の 0-1 整数計画問題を対象とするさまざまな解法を説明する．

キーワード：最大リグレット最小化，ロバスト最適化，0-1 整数計画

1. はじめに

計算機の性能向上に伴い，大量の情報資源の保存・分析が可能になってきた．それらの資源を有効に利用し，意思決定する際にさまざまな最適化手法が提案されてきている．しかし，最適化手法のほとんどは，入力データが既知であるという前提のもとにアルゴリズムが設計されている．一方で，将来の予測，定量化するときの曖昧さ，データの誤差などの要因により，多くの現実問題における入力データには曖昧さや不確定要素が内在している．

不確かさを考慮する最適化問題に対しては，確率分布を仮定しリスク尺度を用いる確率計画法 [1] と，どんな状況が起こっても信頼できる解を返すロバスト最適化 [2] が知られている．確率計画法では入力データのほかに不確実性を表す確率分布が必要であるが，現実に合う確率分布の推定は難しいことがある．古典的なロバスト最適化手法では，確率分布に関するデータは必要ないが，起こりうる最も好ましくない状況（最悪な状況）での効用（min–max 基準）で解を評価するため，極端に悪い状況が起こる割合が低くても，そのような状況の影響を受けやすいことが知られている．

本稿では，著者が博士課程から研究してきた内容を中心に，組合せ最適化問題に対して，進化し続けているロバスト最適化領域におけるモデルの定義およびそれを解く手法を紹介する．

ご　い
静岡大学
〒 432–8561 静岡県浜松市中区城北 3–5–1
goi@shizuoka.ac.jp

2. 問題定義

本稿が対象とするロバスト最適化問題は以下の三つの要素の組合せで定義できる．

- ノミナル問題 (nominal problem)：不確かさが内在していない問題．
- 不確定集合：不確定な入力の取りうる値（シナリオ）の集合．
- ロバスト性の評価基準：解のロバスト度合いを評価する関数．

一般性を失わないため，ノミナル問題を最小化問題とする．本稿では目的関数の係数（コスト）に不確かさが内在するケースを中心として議論する．

2.1 ノミナル問題

本稿では，ノミナル問題が 0-1 整数計画問題である場合を考える．要素の集合を $N=\{1,2,\ldots,n\}$，要素 $j\in N$ に対する目的関数の係数を c_j，0-1 決定変数を x_j として，線形の目的関数をもつ 0-1 整数計画問題は

$$\min_{\boldsymbol{x}\in X}\sum_{j\in N}c_jx_j \tag{1}$$

のように定義できる．ここで，$X\subseteq\{0,1\}^n$ は実行可能領域である．最短路問題，割当問題，最小全域木問題などのように多項式時間アルゴリズムが存在する問題や，ナップサック問題，集合被覆問題などのようなNP 困難な問題を含め，多くの組合せ最適化問題を問題 (1) の形に表せる．

2.2 ロバスト性の評価基準

目的関数の n 個の係数の値の組合せ $\boldsymbol{c}=(c_1,c_2,\ldots,c_n)$（シナリオ）として実現しうるものすべ

ての集合を U とする．集合 U の例としては，たとえば，ノミナル問題が最短路問題であるとき，渋滞ありとなしの二つの状況を想定し，それぞれのシナリオを $\boldsymbol{c}^{\mathrm{jam}}$ と $\boldsymbol{c}^{\mathrm{nor}}$ として U を有限集合 $U=\{\boldsymbol{c}^{\mathrm{jam}},\boldsymbol{c}^{\mathrm{nor}}\}$ とする方法が考えられる（典型的な渋滞パターンに応じて複数のシナリオを用意して U に加える方がより実践的である）．また，渋滞を考慮する道同士の渋滞状況に相関がない場合，各道 j のコスト c_j の範囲 $[c_j^{\mathrm{nor}},c_j^{\mathrm{jam}}]$ を与え，範囲内のコストの値の組合せすべてからなる無限個のシナリオを U とする方法も考えられる．

古典的な最大値最小化 (min–max) 基準のロバスト最適化問題は，最悪シナリオに対する評価値が最も良くなる解を求める問題であり，

$$\min_{\boldsymbol{x}\in X}\ \max_{\boldsymbol{c}\in U}\ \sum_{j\in N} c_j x_j$$

と表せる．

最大リグレット最小化基準のロバスト最適化問題は

$$\min_{\boldsymbol{x}\in X}\ \max_{\boldsymbol{c}\in U}\left\{\sum_{j\in N} c_j x_j-\min_{\boldsymbol{y}\in X}\sum_{j\in N} c_j y_j\right\} \tag{2}$$

$$=\min_{\boldsymbol{x}\in X}\ \max_{\boldsymbol{c}\in U,\boldsymbol{y}\in X}\sum_{j\in N} c_j(x_j-y_j) \tag{3}$$

となる．シナリオに応じて取りうる最善策は変わり，そのコストは良いときも悪いときもある．最大リグレット最小化基準では，どんなシナリオ $\boldsymbol{c}$ に対してもそのときの一番良い解 $\boldsymbol{y}$ に比べてあまり悪くならない解 $\boldsymbol{x}$ を探す．すなわち，コストそのものによる絶対的評価ではなく，シナリオに応じた最善策 $\boldsymbol{y}$ との比較に基づき相対的に解を評価できる．「絶対的」から「相対的」に切り替えることにより，min–max 基準の欠点（悪いことが重なった極端なシナリオに影響されやすいこと）を改善することが理論と応用の両面から確認されている．しかし，ほとんどの組合せ最適化問題に対しては，最大リグレット最小化基準の問題は min–max 基準の問題より難しいことが知られている．Aissi らのサーベイ [3] には，これらの結果をはじめ，ロバスト性の評価基準として代表的な min–max 基準および最大リグレット最小化基準に関する主要な成果がまとめられている．

近年，動的な意志決定を前提とした多段階ロバスト最適化 (multi-stage robust optimization) 基準 [4] と，分布の不確かさを扱う分布的ロバスト最適化 (distributionally robust optimization) 基準 [5] も提案されている．多段階ロバスト最適化に関しては，3 段階以上になると理論分析およびアルゴリズムの設計が難しくなるため，多くの研究は 2 段階最適化を対象としている [6].

2.3 不確かさの設定

不確定集合 U は，離散である場合と連続である場合の両方に対して研究されており，それぞれ離散シナリオ集合と連続シナリオ集合と呼ばれている．連続シナリオ集合の中では，各係数 c_j がそれぞれ独立に与えられた区間の中の任意の値を取りうる区間シナリオ集合の研究が最も多いが，現実的には起こりにくい極端なシナリオの影響を受ける可能性がある．そこで，シナリオが動く範囲を凸多面体や楕円体などで制限するモデルが考えられている [7].

区間シナリオ集合 U_{I} では，各要素 j に対して標準値 c_j^* と変動幅 $\delta_j(\geq 0)$ が与えられ，係数 c_j が区間 $[c_j^*-\delta_j,c_j^*+\delta_j]$ 内の任意の値を取りうる．すなわち，

$$U_{\mathrm{I}}=\left\{\boldsymbol{c}\mid \forall j\in N, c_j=c_j^*+\delta_j\gamma_j, \gamma_j\in[-1,1]\right\}$$

である．現実に近い不確かさをモデルに取り込むために，Bertsimas と Sim により，摂動レベル（Γ 上限）を考慮できる連続シナリオ集合が提案された [8]．この不確定集合 $U^{(\Gamma)}$ では，不確定要素が標準値から外れる相対量の合計に対する上限を表すパラメータ Γ を導入し，c_j の標準値 c_j^* と摂動幅 δ_j に対して

$$U^{(\Gamma)}=\left\{\boldsymbol{c}\ \middle|\ \begin{array}{l}\forall j\in N, c_j=c_j^*+\delta_j\gamma_j, \gamma_j\in[-1,1]\\ \qquad\qquad \text{and}\ \displaystyle\sum_{i\in N}|\gamma_i|\leq\Gamma\end{array}\right\} \tag{4}$$

とすることで摂動量を調整できる（$\Gamma=n$ の場合にはこのモデルは区間シナリオ集合 U_{I} となる）.

そのほかにも，統計的推定 [9] または機械学習 [10] に基づくデータ駆動型の多面体不確定集合，複数の不確定集合の組合せで得られる集合 [11] など，不確かさに関するさまざまな設定が検討されている．

3. 求解アプローチ

ノミナル問題，不確定集合，評価基準の組合せで定義したさまざまなロバスト最適化問題に関する研究が近年盛んになっており，経済，建築，都市計画，化学など多くの分野で応用されている．最大リグレット最小化基準においては，ノミナル問題が NP 困難である場合，不確定集合が最も単純な区間シナリオ集合 U_{I} であってもロバスト最適化問題が Σ_2^p 困難になることがある [12]．このように，計算複雑度の観点からは解き

にくいことが知られているが，それでも，区間シナリオ集合 U_{I} の下で具体的な組合せ最適化問題（e.g., ナップサック問題 [13]，巡回セールスマン問題 [14]，集合被覆問題 [15]，一般化割当問題 [16] など，主に，ノミナル問題が NP 困難であっても効率良い実践的解法に対する多くの成果のある問題）を対象とし，問題ごとにさまざまな手法が提案されてきた．

本稿では，区間シナリオ集合 U_{I} を不確定集合とする最大リグレット最小化 0-1 整数計画問題 (min–max regret binary integer programming problem, MMR-BIP) に対する厳密解法および近似解法を紹介する．

まず，多くの手法に使用される最悪シナリオ補題を以下に記す．

補題 1（文献 [17]）**.** 任意の解 $\boldsymbol{x} \in X$ に対して，$\boldsymbol{x}$ のリグレットを最大にするシナリオの一つ $\boldsymbol{c}^{(\boldsymbol{x})} = (c_1^{(\boldsymbol{x})}, c_2^{(\boldsymbol{x})}, \ldots, c_n^{(\boldsymbol{x})})$ は以下で与えられる：

$$c_j^{(\boldsymbol{x})} = \begin{cases} c_j^* + \delta_j & \text{if } x_j = 1 \\ c_j^* - \delta_j & \text{otherwise} \end{cases} \qquad \forall j \in N. \tag{5}$$

最悪シナリオ補題により，MMR-BIP は (2) の形から

$$\min_{\boldsymbol{x} \in X} \left\{ \sum_{j \in N} c_j^{(\boldsymbol{x})} x_j - \min_{\boldsymbol{y} \in X} \sum_{j \in N} c_j^{(\boldsymbol{x})} y_j \right\} \tag{6}$$

のように書き換えることができる．連続補助変数 φ を導入することで，問題 (6) は

$$\min_{\boldsymbol{x} \in X} \left\{ \sum_{j \in N} c_j^{(\boldsymbol{x})} x_j - \varphi \right\} \tag{7}$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{j \in N} c_j^{(\boldsymbol{x})} y_j \geq \varphi \qquad \forall \boldsymbol{y} \in X \tag{8}$$

のように変形できる．

3.1 厳密解法

3.1.1 Benders-like 分解法

モデル (7)–(8) には一般的に入力のサイズに対する指数個の制約条件が存在するため，そのまま解くのは困難である．Benders-like 分解法は，制約 (8) の集合 X を部分集合 $X' \subseteq X$ に置き換えた緩和問題 $P(X')$ を厳密に解く．そして，得られた最適解 $(\boldsymbol{x}', \varphi')$ の実行可能性の判定問題を部分問題として解く．この部分問題は，不等式 (8) の左辺が最小となるとき，その値が φ' より小さくなるかどうかを判定する問題である．すなわち，ノミナル問題 $Q(\boldsymbol{x}')$

$$\min_{\boldsymbol{y} \in X} \sum_{j \in N} c_j^{(\boldsymbol{x}')} y_j$$

を解くことによりこの判定問題は解ける．$Q(\boldsymbol{x}')$ の最適値が φ' 以上であれば，解 $(\boldsymbol{x}', \varphi')$ は問題 (7)–(8) の実行可能解であり，$\boldsymbol{x}'$ は MMR-BIP の最適解であることが結論できる．一方，そうでない場合は，部分問題 $Q(\boldsymbol{x}')$ の最適解 $\boldsymbol{y}'$ に対して $X' \leftarrow X' \cup \{\boldsymbol{y}'\}$ としたのち再び緩和問題 $P(X')$ を解く．問題 (7)–(8) の実行可能解を得るまで上述の手順を反復する．最終的に得られる実行可能解は緩和問題の最適解であるため，最適性が担保される．

各反復においては，$P(X')$ を厳密に解くことによって得られた解 $(\boldsymbol{x}', \varphi')$ の $\boldsymbol{x}'$ は MMR-BIP の実行可能解であり，$P(X')$ の最適値と $\boldsymbol{x}'$ の最大リグレット

$$\sum_{j \in N} c_j^{(\boldsymbol{x}')} x_j' - [Q(\boldsymbol{x}') \text{ の最適値}]$$

はそれぞれ MMR-BIP の下界と上界である．そのため，Benders-like 分解法は計算時間の上限（もしくは反復回数の上限）が設定される場合でも発見的解法として使用できる．

3.1.2 分枝カット法

緩和問題 $P(X')$ を解く際に分枝限定法の枠組みを利用する．整数解 $\boldsymbol{x}^*$ を発見するたびに部分問題 $Q(\boldsymbol{x}^*)$ を解く．解 $\boldsymbol{x}^*$ が違反する制約 (8) が発見された場合，その制約を新たなカットとして追加する．解 $\boldsymbol{x}^*$ が実行可能である場合は，暫定値を更新し，現在のノードを終端する．

分枝カット法は早い段階で良い実行可能解に到達する傾向がある．そのため，時間制限のある状況においては，発見的解法としても有用である．

3.2 発見的解法

3.2.1 シナリオ固定法

コストに不確かさが内在する（制約には不確かさがない）ロバスト最適化問題において，ノミナル問題の任意の実行可能解はロバスト最適化問題の実行可能でもある．シナリオ固定法（fixed-scenario algorithm, FS 法）では，ある固定したシナリオの下で，ノミナル問題の最適解を求め，その解の最大リグレットを計算し，評価値として出力する．固定したシナリオが標準シナリオ $\boldsymbol{c}^* = (c_1^*, c_2^*, \ldots, c_n^*)$ であるとき，FS 法で得られる解の評価値は最適値の 2 倍以内に抑えられることが知られている [18].

3.2.2　双対置換法

双対置換法（dual substitution algorithm, DS 法）は，問題 (6) において，$\boldsymbol{y}$ に対する内部の最適化問題 $Q(\boldsymbol{x})$ の線形緩和問題をその双対問題に置換し，混合整数計画問題として厳密に解く手法である．得られた最適解に含まれる $\boldsymbol{x}'$ は MMR-BIP の実行可能解であるため，発見的解法として数多くの研究に使用されている．また，ノミナル問題が最短路問題や割当問題などのように線形計画法によって解ける問題に対しては，最適解が得られる保証がある．

DS 法は，FS 法より計算時間を要するが，より良い解が効率よく得られる傾向にあることが計算実験で観測されている [19].

3.2.3　反復双対置換法

DS 法に関しては，ノミナル問題が一般的な 0-1 整数計画問題であるとき，近似保証のないことが示されている [16]．そのため，DS 法で得られる解の改善を考える．反復双対置換法（iterated dual substitution algorithm, iDS 法）では，これまでの探索で得られた実行可能解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ を探索空間（iDS 法の次の反復で対象とする問題の実行可能領域）から排除する制約条件を追加することにより，DS 法を反復的に利用することができる．排除の方法としては，解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ からハミング距離 $d\,(\geq 1)$ 離れることを表す制約

$$\sum_{j:\,\hat{x}_j=0} x_j + \sum_{j:\,\hat{x}_j=1} (1-x_j) \geq d \tag{9}$$

と最良シナリオの性質を利用する制約

$$\sum_{j:\,\hat{x}_j=1} c_j^+ x_j + \sum_{j:\,\hat{x}_j=0} c_j^- x_j < \sum_{j:\,\hat{x}_j=1} c_j^+ \tag{10}$$

が提案されている [19]．ハミング距離 $d \leq 1$ のとき，カット (9) はカット (10) に優越される（制約 (9) が排除できる領域は制約 (10) が排除できる領域の部分集合である）.

最大リグレット最小化基準の，ナップサック問題，多次元ナップサック問題，集合被覆問題，一般化割当問題を対象として，本稿で述べたすべての手法および既存研究で得られた最良値を比較した結果，iDS 法は，比較対象に挙げられたほかのすべての手法より発見的解法として優れた性能をもつことが確認されている．また既存研究の最良値と比較して同等以上の解が得られる傾向にあることが報告されている [19].

4.　おわりに

博士課程の指導教員柳浦睦憲先生から，ロバスト最適化の研究テーマをいただき，学位を取った後も研究を続けてきた．博士前期課程（修士課程）から Σ_2^p 困難である最大リグレット最小化一般化割当問題を研究対象として，アルゴリズムの設計に挑戦し，柳浦先生，Manuel Iori 先生，Silvano Martello 先生の指導の下で自信をもてる成果を何とかあげることができた．自力でゼロから組んだ分枝カット法を実験で評価する際に，数時間の実行でようやく現れるバグと出会ったことは今でも記憶に残っている．

博士後期課程の 3 年間で，ロバスト最適化の研究以外にも後輩の研究や，企業との共同研究に参加することができ，OR に関する多くの理論・実践の知識を勉強することができた．また，博士学生向けの国際サマー（ウィンター）スクールに参加することができ，憧れの大物研究者の授業で，さまざまな刺激に溢れた学びの時間を体験した.

これらの経験を活かし，これからも企業の方や国内外の研究者と積極的に意見交換や共同研究などの交流を通して，ロバスト最適化および OR の理論・実践に関する研究成果をあげていきたい.

参考文献

[1] A. Prékopa, *Stochastic Programming*, Springer Science & Business Media, 2014.

[2] P. Kouvelis and G. Yu, *Robust Discrete Optimization and Its Applications*, Springer Science & Business Media, 2013.

[3] H. Aissi, C. Bazgan and D. Vanderpooten, "Min–max and min–max regret versions of combinatorial optimization problems: A survey," *European Journal of Operational Research*, **197**, pp. 427–438, 2009.

[4] T. Assavapokee, M. Realff and J. C. Ammons, "Min–max regret robust optimization approach on interval data uncertainty," *Journal of Optimization Theory and Applications*, **137**, pp. 297–316, 2008.

[5] L. Chen, W. Ma, K. Natarajan, D. Simchi-Levi and Z. Yan, "Distributionally robust linear and discrete optimization with marginals," *Operations Research*, **70**, pp. 1822–1834, 2022.

[6] V. Gabrel, C. Murat and A. Thiele, "Recent advances in robust optimization: An overview," *European Journal of Operational Research*, **235**, pp. 471–483, 2014.

[7] A. Ben-Tal, L. Ghaoui and A. Nemiroovski, *Robust Optimization*, Princeton University Press, 2009.

[8] D. Bertsimas and M. Sim, "The price of robustness," *Operations Research*, **52**, pp. 35–53, 2004.

[9] D. Bertsimas, V. Gupta and N. Kallus, "Data-driven robust optimization," *Mathematical Programming*, **167**, pp. 235–292, 2018.

[10] C. Shang, X. Huang and F. You, "Data-driven robust optimization based on kernel learning," *Computers & Chemical Engineering*, **106**, pp. 464–479, 2017.

[11] T. Dokka, M. Goerigk and R. Roy, "Mixed uncertainty sets for robust combinatorial optimization," *Optimization Letters*, **14**, pp. 1323–1337, 2020.

[12] V. G. Deineko and G. J. Woeginger, "Pinpointing the complexity of the interval min–max regret knapsack problem," *Discrete Optimization*, **7**, pp. 191–196, 2010.

[13] F. Furini, M. Iori, S. Martello and M. Yagiura, "Heuristic and exact algorithms for the interval min–max regret knapsack problem," *INFORMS Journal on Computing*, **27**, pp. 392–405, 2015.

[14] R. Montemanni, J. Barta, M. Mastrolilli and L. M. Gambardella, "The robust traveling salesman problem with interval data," *Transportation Science*, **41**, pp. 366–381, 2007.

[15] J. Pereira and I. Averbakh, "The robust set covering problem with interval data," *Annals of Operations Research*, **207**, pp. 217–235, 2013.

[16] W. Wu, M. Iori, S. Martello and M. Yagiura, "Exact and heuristic algorithms for the interval min–max regret generalized assignment problem," *Computers & Industrial Engineering*, **125**, pp. 98–110, 2018.

[17] H. Yaman, O. E. Karaşan and M. C. Pınar, "The robust spanning tree problem with interval data," *Operations Research Letters*, **40**, pp. 29–31, 2001.

[18] A. Kasperski and P. Zieliński, "An approximation algorithm for interval data minmax regret combinatorial optimization problems," *Information Processing Letters*, **97**, pp. 177–180, 2006.

[19] W. Wu, M. Iori, S. Martello and M. Yagiura, "An iterated dual substitution approach for binary integer programming problems under the min–max regret criterion," *INFORMS Journal on Computing*, ahead of print, https://doi.org/10.1287/ijoc.2022.1189, 2022.

