大規模混合整数2次計画問題の解法の実装

数理システム　*逸見宣博　HENMI Nobuhiro
01701240　数理システム　山下浩　YAMASHITA Hiroshi

1　概要

混合整数2次計画問題（MIQP）の分枝限定法による解法の実装について報告する．対象とするMIQPを以下の様に表す．$\boldsymbol{H}$ は半正定値対称行列とする．

$$
\begin{array}{ll}
\text{minimize} & 1/2 \cdot \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{T}} \boldsymbol{H} \boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^{\boldsymbol{T}} \boldsymbol{x} \\
\text{subject to} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\
 & \boldsymbol{l} \leq \boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{u} \\
 & x_1, \cdots, x_k \ \text{：整数}\ (\ k \leq n\ ) \\
\text{where} & \boldsymbol{A} \in \boldsymbol{R}^{\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{n}},\ \boldsymbol{b} \in \boldsymbol{R}^{\boldsymbol{m}}\ \ (\ m \leq n\ ) \\
 & \boldsymbol{H} \in \boldsymbol{R}^{\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{n}},\ \boldsymbol{c} \in \boldsymbol{R}^{\boldsymbol{n}} \\
 & \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^{\boldsymbol{n}},\ \boldsymbol{l}, \boldsymbol{u} \in (\boldsymbol{R} \cup \{\pm\infty\})^n
\end{array}
$$

本実装では，プログラムを数理計画法パッケージNUOPTのコンポーネントとして利用するために，大規模問題に適用可能となることを目的とする．

2　分枝限定法

整数計画問題の分枝限定法による求解手順は次の様に要約される．元の問題の部分問題（整数計画問題）中，最適値が未知なものの集合を P としている。

$z_{UB} = \infty$;
for （ $P := \{$ 元の問題 $\}$ ； $P \neq \phi$ ；）{
　$\exists p \in P$ を選び、$P := P \setminus \{p\}$;
　$p' := p$ から整数条件を緩和（除去）した問題;
　$z_{LB} := p'$ の最適値;
　if （ $z_{LB} \geq z_{UB}$ ）
　　continue;
　$\boldsymbol{x} := p'$ の最適解;
　$F := \{\ i \in [1, k] : x_i$ が非整数値 $\}$;
　if （ $F = \phi$ ）
　　{ $z_{UB} := z_{LB}$; $\boldsymbol{x_{UB}} := \boldsymbol{x}$; continue; }
　$\exists i \in F$ を選び、
　$q := p$ に制約 $x_i \leq \lfloor x_i \rfloor$ を加えた部分問題;
　$r := p$ に制約 $x_i \geq \lceil x_i \rceil$ を加えた部分問題;
　$P := P \cup \{q,\ r\}$;
}

元の問題の許容解 $z_{UB} \cdot \boldsymbol{x_{UB}}$ は最適値・最適解の暫定候補であり，$P = \phi$ となり反復が完了した際に $z_{UB} = \infty$ であれば元の整数計画問題に許容解はなく，$z_{UB} < \infty$ であればこれらが真の最適解と結論する．

一般に p の最適値 z は，その整数条件緩和問題の最適値 z_{LB} に対し $z \geq z_{LB}$ ゆえ，反復中に $z_{LB} \geq z_{UB}$ なら当然 p は P に戻さず廃棄するが，この操作は分枝限定法の処理速度に関する基本原則を与えている．

1. 最適値に近い暫定解（可能解） z_{UB} を早期に獲得する程，部分問題数は削減できる．
2. p の最適解 z と整数条件緩和解 z_{LB} の差を早期に縮小する程，部分問題数は削減できる．

混合整数線形計画（MILP）を対象にした場合，これらの実現目的の為に，各種ヒューリスティックスや前処理・カット追加による可能領域の縮小等を適用した報告は多いが，分枝限定法の運用方法自体についても，部分問題の処理順や分枝変数の処理順の決定機構の実装に於て様々のバリエーションが考案され，例えば［Linderoth, Savelsbergh, 1997］に於て各種実装手法の効果の比較実験の報告がなされている．これら比較実験に於てMILPとMIQPとの間でどの様な差異が存在するかという問題について，当日報告する．

3　部分問題の求解アルゴリズム

前節では最適化対象となる部分問題数を減らす方向での高速化を検討したが，ここでは一部分問題あたりの処理時間を減らす方向での高速化を考える．

MIQPの部分問題は2次計画問題であるから，そのアルゴリズムは現実的には次の何れかとなる．(i) 主双対内点法，(ii) 主有効制約法（Gill-Murray 法），(iii) 双対法（Goldfarb-Idnani 法）.

しかし，分枝限定法のフローから，部分問題の最適化の際には良い初期値が利用可能なのでその情報を活かす高速化を図るべきであるが，内点法はこのような事情を利用することが不得意であるため，ここでは比較対象から外す事にする．

本実験では残った2方法を部分問題の解法として利用する．Gill-Murray 法，Goldfarb-Idnani 法とも大規模問題に対応するために，ここでは大規模単体法の実

装において有効なテクニックを利用する．この形式の実装での解は単体法における基底解と同様に，基底変数・各々下限値/上限値に値をとる非基底変数・その他の変数の各集合を各々 B, N_L, N_U, S と表記した際，次の様に表される．但し $\boldsymbol{B}$ は基底行列で $\boldsymbol{A}' = -\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}$ とし、$\boldsymbol{P} \in \boldsymbol{R}^{n\times n}$ は $\boldsymbol{AP} = (\ \boldsymbol{B}\ \boldsymbol{A}_{N_L}\ \boldsymbol{A}_{N_U}\ \boldsymbol{A}_S\ )$ と列を並び換える交換行列とする．

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Y}\begin{pmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{l}_{N_L} \\ \boldsymbol{u}_{N_U} \end{pmatrix} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{x}_S$$

$$\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix} \boldsymbol{B}^{-1} & \boldsymbol{A}'_{N_L} & \boldsymbol{A}'_{N_U} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{N_L} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{N_U} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix},\ \boldsymbol{Z}=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix} \boldsymbol{A}'_S \\ \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{I}_S \end{pmatrix}$$

有効制約は $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}_{N_L} \geq \boldsymbol{l}_{N_L}, \boldsymbol{x}_{N_U} \leq \boldsymbol{u}_{N_U}$ であり $\boldsymbol{y} \in \boldsymbol{R}^m$, $\boldsymbol{z} \in \boldsymbol{R}^n$ を制約 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ と $\boldsymbol{l} \leq \boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{u}$ の各双対変数とおくと KKT 条件は次の様になる．

$$\boldsymbol{Wx} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{l}_{N_L} \\ \boldsymbol{u}_{N_U} \end{pmatrix},\ \boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{B} & \boldsymbol{A}_{N_L} & \boldsymbol{A}_{N_U} & \boldsymbol{A}_S \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{N_L} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{N_U} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\boldsymbol{P}^T$$

$$\boldsymbol{l}_B \leq \boldsymbol{x}_B \leq \boldsymbol{u}_B,\ \ \boldsymbol{l}_S \leq \boldsymbol{x}_S \leq \boldsymbol{u}_S$$
$$\boldsymbol{z}_B = \boldsymbol{0},\ \ \boldsymbol{z}_S = \boldsymbol{0},\ \ \boldsymbol{z}_{N_L} \geq \boldsymbol{0},\ \ \boldsymbol{z}_{N_U} \leq \boldsymbol{0}$$
$$\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{Hx} + \boldsymbol{c}) - \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$$
$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{B}^{-T}(\boldsymbol{Hx} + \boldsymbol{c})_B$$

問題の非線形性に対応する部分 $\boldsymbol{x}_S$ の値は $\boldsymbol{Z}$ が $\boldsymbol{W}$ の null space の基底である事より，KKT 行列を係数とする方程式を $\boldsymbol{H}_Z = \boldsymbol{Z}^T\boldsymbol{HZ}$ を係数とするものに変形後に求解して算出するが，その算出コストが全求解時間に与える影響は大きく，一般に null space の次元 $|S|$ が大きい程不利なのがこの形式の特徴といえる．

Gill-Murray 法は primal feasibility $\boldsymbol{l} \leq \boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{u}$ を保ちつつ、dual feasibility $\boldsymbol{z}_B = \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{z}_S = \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{z}_{N_L} \geq \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{z}_{N_U} \leq \boldsymbol{0}$ の獲得を経て最適化を図る手法であり，その初期解として primal feasibile な解を必要とする．

初期解の入手法としては単純に単体法の phase 1 を適用する他にも，元来親問題 QP の解 $\boldsymbol{x}_0$ に於ては dual feasibility が成立していた経緯から，$\boldsymbol{x}_0$ に於ける勾配 $(\boldsymbol{Hx}_0 + \boldsymbol{c})$ を目的関数とする線形計画問題に対し双対単体法を適用して初期 dual feasible 解 $\boldsymbol{x}_0$ から得られる primal feasible 解 $\boldsymbol{x}_1$ を Gill-Murray 法の初期解とする事も可能である．又，$\boldsymbol{x}_1$ において新たに勾配を計算し直して LP を解く操作を数回反復して得た解 $\boldsymbol{x}_n$ は当初の初期解よりも最適値に近付き，Gill-Murray 法の反復回数を減少する可能性も考えられる，(Sequential Linear Programming)

他方、Goldfarb-Idnani 法は dual feasible な初期解から primal fieasibility を得た時点で最適化を完了する手法であり，親問題の整数条件緩和解から直接に求解過程を開始できる利点がある．但し $\boldsymbol{H}$ が正定値である事を前提とするため工夫が必要である事や，求解過程中に要するデータの計算コストから，効率的実装が容易とは必ずしも言えない要素も備えている様に思われる．

本報告では Gill-Murray 法及び Goldfarb-Idnani 法の分枝限定法内での適用時の所要時間に関する比較実験の詳細な報告を行う．MIQP における Goldfarb-Idnani 法の有効な利用法に関しては，今後の研究課題としたい．

4 数値計算例

銘柄数制約付きマルコビッツモデルと同インデックスフィッティング問題（2-norm 最小化）の実験結果を以下に記す．利用マシンは Pentium-III 450MHz.

1. 銘柄数制約付き（コンパクト分解形式）マルコビッツモデル：
   選択銘柄数を 5 に固定，1000 銘柄 60 期につき 20 点から成るフロンティア曲線を求めた．($n = 2061, m = 63, k = 1000$，整数変数はすべて $0-1$ タイプ）計算時間は 1855 秒で全部分問題数は 8635 であった．
2. 銘柄制約付きインデックスフィッティング問題 (2-norm 最小化)：
   100 銘柄 60 期、選択銘柄数 2 で実験した．($n = 260, m = 62, k = 100$，整数変数はすべて $0-1$ タイプ）計算時間は 292 秒で部分問題数は 9696 であった．

その他の数値例については，当日発表する．

参考文献

[1] D.Goldfarb, A.Idnani, "A numerically stable dual method for solving strictly convex quadratic programs", *Math.Prog.*, 27:1-33, 1983.

[2] P.E.Gill, W.Murray, M.A.Saunders, M.H.Wright, "Inertia-controlling methods for general quadratic programming", *SIAM Review*, 33:1-36, 1991.

[3] R.Fletcher, S.Leyffer, "Numerical experience with lower bounds for MIQP branch-and bound" , 1995

[4] J.T.Linderoth, M.W.P.Savelsbergh, "A computational Study of Search Strategy for Mixed Integer Programming" , 1997.