E2-5

第52回自動制御連合講演会
2009年11月21, 22日(大阪大学)

最適化におけるロバストネス

Robustoness in Optimization under Uncertainty

慶応義塾大学　○ 武田朗子
Akiko Takeda
Keio University, Faculty of Science and Technology

Abstract It has been known that solutions to optimization problems can exhibit remarkable sensitivity to perturbations in the input data of the problem. In other words, when the data differs from the assumed nominal values, the generated optimal solution may violate critical constraints and perform poorly. These observations motivate the need for mathematical optimization methodologies that provide solutions that are immune to data uncertainty. Robust optimization addresses such issue. The aim of this paper is to introduce robust optimization methodology and survey some recent results.

1 はじめに

応用上の問題を最適化問題として定式化する際には，"測定誤差が含まれているデータ" や "将来の需要の代わりに過去のデータを用いた予測値" 等を使わなければならないこともあるだろう．Ben-Tal&Nemirovski[3] は，所与のデータを用いて定式化した最適化問題の最適解が，そのデータを微小に変動させて作られた制約式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では，入力データ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．

そこで，本稿では，微小なデータの変動に対して強健な解を得ることのできる，ロバスト最適化法を紹介したい．ロバスト最適化では，不確定なデータの生じ得る範囲をあらかじめ設定し，その中で最悪の状況が生じた場合を想定したモデル化が行なわれている．ロバスト最適化による解は，不確定なデータが想定範囲内で動く分には制約式を破ることはないため，微小な変動に対して強健な解を得ることができる．

Ben-Tal&Nemirovski[2] が 1998 年にロバスト最適化法を提案して以来，盛んに研究が行われるようになった．最悪状況を想定した意思決定方法は新しいものではなく，1973 年に Soyster[13] によって既に用いられていたが，Ben-Tal&Nemirovski の研究をきっかけに，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[9] が同様の定式化を示している．

ロバスト最適化法について簡単な説明の後，いくつかの研究トピックスを取りあげ，現在どのような研究が進められているか紹介したい．

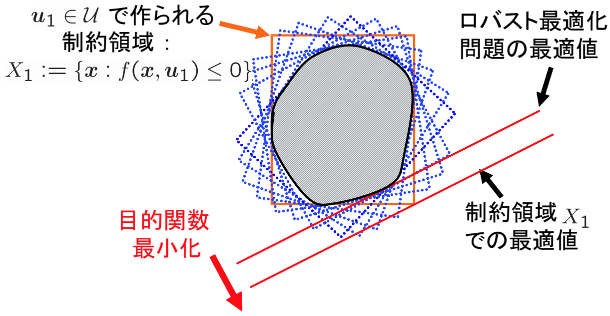

図 1: ロバスト最適化問題のイメージ

2 ロバスト最適化問題

不確定な状況下での意思決定問題，つまり不確定なデータを含んだ意思決定問題として，以下の最適化問題を考える．

$$
\begin{array}{lll}
\text{最小化：} & f_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_0) & \\
\text{条件：} & f_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_i) \le 0, & i = 1, \ldots, m_1, \\
& g_j(\boldsymbol{x}) \le 0, & j = 1, \ldots, m_2.
\end{array}
\tag{1}
$$

ここで，$\boldsymbol{u}_i \in \mathcal{R}^\ell$ は不確定なデータ，$\boldsymbol{x} \in \mathcal{R}^n$ は意思決定変数，$f_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_0) : \mathcal{R}^n \times \mathcal{R}^\ell \to \mathcal{R}$ は目的関数，$f_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_i) : \mathcal{R}^n \times \mathcal{R}^\ell \to \mathcal{R}$ と $g_j(\boldsymbol{x}) : \mathcal{R}^n \to \mathcal{R}$ は制約条件を表わす関数とする．ここで，目的関数や制約式毎に異なる不確定なデータ $\boldsymbol{u}_0, \boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_{m_1}$ が含まれていることに注意したい．これは制約毎の不確実性と呼ばれ，ロバスト最適化問題を扱いやすくするための仮定である．

問題 (1) の不確定なデータ $\boldsymbol{u}_i$ が生じうる範囲を不確実性集合と呼び，ここでは $\mathcal{U}_i \subset \mathcal{R}^\ell$ と記述する．各不確実なデータ $\boldsymbol{u}_i$ に対して $\mathcal{U}_i$ を仮定すると，ロバスト

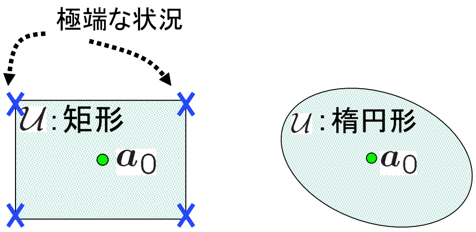

図 2: 矩形と楕円形の $\mathcal{U}$

最適化問題は一般に，次のように定式化される：

$$
\begin{array}{lll}
\text{最小化：} & \sup_{\boldsymbol{u}_0 \in \mathcal{U}_0} f_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_0) & \\
\text{条件：} & f_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_i) \leq 0, \quad \forall \boldsymbol{u}_i \in \mathcal{U}_i, & i = 1, \ldots, m_1, \\
 & g_j(\boldsymbol{x}) \leq 0, & j = 1, \ldots, m_2.
\end{array} \tag{2}
$$

不確実性集合 $\mathcal{U}_i$ の要素が無限にある場合には，問題 (2) には無限本の制約式が含まれることになる (図 1 を参照)．ロバスト最適化問題は，不確定なデータ $\boldsymbol{u}_i$ に対してあらゆる可能性を想定して作られた制約式に対して，すべて満たす解の中から，最も目的関数値の小さいものを見つける問題である．不確定なデータを含んだ制約式については

$$
f_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_i) \leq 0, \quad \forall \boldsymbol{u}_i \in \mathcal{U}_i \quad \Leftrightarrow \quad \sup_{\boldsymbol{u}_i \in \mathcal{U}_i} f_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_i) \leq 0
$$

が成り立つので，sup を用いて最も厳しい制約式表現 1 本で書き換えても構わない．

3 扱いやすい問題への帰着

$\mathcal{U}_i$ の要素が無限にある場合には，問題 (2) は無限本の制約式を含む問題になり，一般に求解は困難である．そこで，線形不等式制約 1 本の最もシンプルな，不確定なデータ $\boldsymbol{a}$ を含んだ線形計画問題に対するロバスト最適化問題：

$$
\begin{array}{ll}
\text{最小化：} & \boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{x} \\
\text{条件：} & \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{x} \leq b, \ \forall \boldsymbol{a} \in \mathcal{U},
\end{array} \tag{3}
$$

を例にあげ，$\mathcal{U}$ が矩形や楕円形であれば，ロバスト最適化問題を解きやすい問題に帰着できることを示す．

矩形不確実性集合の場合: 不確定なデータ $\boldsymbol{a} \in \mathcal{R}^n$ に対して $\mathcal{U} = \{\boldsymbol{u} : \boldsymbol{a}_0 - \bar{\boldsymbol{a}} \leq \boldsymbol{u} \leq \boldsymbol{a}_0 + \bar{\boldsymbol{a}}\} \subset \mathcal{R}^n$ を仮定する (ただし，$\boldsymbol{a}_0 \in \mathcal{R}^n$ のベクトル，$\bar{\boldsymbol{a}} \in \mathcal{R}^n$ の非負ベクトル)．$\bar{\boldsymbol{a}} \geq \boldsymbol{0}$ の仮定より，問題 (3) の制約式は 1 本の不等式：

$$
\max_{\boldsymbol{a} \in \mathcal{U}} \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{x} = \boldsymbol{a}_0^\top \boldsymbol{x} + \bar{\boldsymbol{a}}^\top |\boldsymbol{x}| \leq b \tag{4}
$$

で表される．ここで，$|\boldsymbol{x}|$ はベクトル $\boldsymbol{x}$ の各要素について絶対値を取って作られたベクトルとする．さらに，新たな変数 $\boldsymbol{y} \in \mathcal{R}^n$ を導入して，この制約式を

$$
\boldsymbol{a}_0^\top \boldsymbol{x} + \bar{\boldsymbol{a}}^\top \boldsymbol{y} \leq b, \quad -\boldsymbol{y} \leq \boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{y}, \quad \boldsymbol{y} \geq \boldsymbol{0}
$$

と記述すると，ロバスト線形計画問題 (3) は通常の線形計画問題として定式化される．$\mathcal{U}$ 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 (4) 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．この手法は Soyster[13] によって提案されたものの，得られる最適意思決定は保守的になりがちであると評価されている．

楕円形不確実性集合の場合: 不確定なデータ $\boldsymbol{a} \in \mathcal{R}^n$ に対して $\mathcal{U} = \{\boldsymbol{a}_0 + \boldsymbol{A}\boldsymbol{u} : \|\boldsymbol{u}\| \leq 1\} \subset \mathcal{R}^n$ を仮定する (ただし，$\boldsymbol{a}_0 \in \mathcal{R}^n, \boldsymbol{u} \in \mathcal{R}^\ell$ はベクトル，$\boldsymbol{A} \in \mathcal{R}^{n \times \ell}$ の行列，$\|\cdot\|$ はユークリッドノルム)．$\mathcal{U}$ は，$\boldsymbol{a}_0$ を中心にもつ楕円体 (柱) を表わしている．不確定なデータの取りうる範囲として楕円形の $\mathcal{U}$ 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 (3) の制約式左辺は

$$
\max_{\boldsymbol{u}:\|\boldsymbol{u}\| \leq 1} (\boldsymbol{a}_0 + \boldsymbol{A}\boldsymbol{u})^\top \boldsymbol{x} = \boldsymbol{a}_0^\top \boldsymbol{x} + \max_{\boldsymbol{u}:\|\boldsymbol{u}\| \leq 1} (\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{u}
$$

となる．上式の最適解は $\boldsymbol{u}^* = \dfrac{\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{x}\|}$ と陽に得られ，問題 (3) の制約式は 1 本の制約式 $\boldsymbol{a}_0^\top \boldsymbol{x} + \|\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{x}\| \leq b$ で表現される．つまり，ロバスト線形計画問題 (3) は，二次錐計画問題：

$$
\min_{\boldsymbol{x}} \ \boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{x} \quad \text{s.t.} \quad \boldsymbol{a}_0^\top \boldsymbol{x} + \|\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{x}\| \leq b
$$

に変形され，内点法で効率的に解くことができる．

4 現在進行形の研究

不確定なデータを含む最適化問題への解法として，ロバスト最適化法はかなり新しい手法である．どのような研究がなされているのか，簡単にまとめたい．

解きやすいロバスト最適化問題の構築方法: 不確定なデータを含んだ最適化問題 (線形計画問題，二次錐計画問題，半正定値計画問題，離散最適化問題等) を扱いやすいロバスト最適化問題に定式化するための，不確定データの記述方法が研究されている ([2, 6, 10, etc.])．

確率分布の利用: 不確定なデータに対して不確実性集合だけでなく確率分布も仮定した上で，制約式を破る確率に関する精度保証の付いた解法が提案されている ([6, 7, 8, 16, etc.]).

ロバスト多段階最適化への拡張: ロバスト最適化問題 (2) では，不確定なデータ $\boldsymbol{u}_0, \ldots, \boldsymbol{u}_{m_1}$ が実現する前に意思決定がなされている．これを意思決定のプロセスを多段階に分けて，第 1 段では不確定データの実現前に意思決定が行なわれ，不確定データの実現値が得られた後に，第 1 段での意思決定を受けて第 2 段では適切な調整がなされるものとする．これを多段階繰り返すことにより，ロバスト多段階最適化が行なわれる ([4, 5, 15, etc.]).

応用事例への適用: どんな種類の金融商品にどの程度の割合で資産を割り振るかを決めるポートフォリオ問題に対して，各資産の収益率に関する平均値や資産間の分散・共分散行列について不確定という仮定に基づいて，様々なロバスト最適化問題が提案されている ([11, 17, etc.])．また，観測値を用いて重回帰モデルや識別モデルといった統計モデルを構築する際に，観測値に観測誤差が含まれていて不確定であるとの仮定に基づいて，ロバスト最適化問題が提案されている ([9, 12, 14, 18, 19, etc.])．その他にも，在庫管理や建築構造設計に対するロバスト最適化の適用など様々な応用研究が進められている．

5 サポートベクターマシンによるクラス分類

最後に，機械学習分野で研究の行われている学習モデルに対して，ロバスト最適化からの解釈を紹介したい．

2 クラス分類問題とは，新たな未学習データがどちらのグループに属しているかを予測するため，2 つのグループに分かれている複数のデータを用いて分類ルールを学習する問題である．病気の診断やスパムメールの分類等に現れる重要な問題である．データとしてベクトルとラベルの組：$(\boldsymbol{x}_i, y_i), i \in M := \{1, \ldots, m\}$ が与えられており，y_i は -1 または 1 の 2 値を取るラベルで，$\boldsymbol{x}_i \in \mathcal{R}^n$ は i 番目のデータベクトルを表すものとする．“学習” とは，これらのデータに何らかの基準で最も合う関数関係 $y = h(\boldsymbol{x})$ を求めることである．このような関数関係が求められれば、未学習データ $\boldsymbol{x}$ に関数を適用することで，そのラベルを予測することができる．

サポートベクターマシン (SVM) は, 分類問題のために提案された多くの手法の中で，識別性能が優れた学習モデルの一つと言われている．それは，未学習データに対して高い識別性能を得るための工夫があるためである．この工夫について，ロバスト最適化の視点で解釈を与えようという試みが Xu 等 [19] によってなされた．この成果を簡単に紹介したい．

学習データが線形分離不可能な場合における代表的なモデルとして，ソフトマージン SVM がよく知られている：

$$\begin{array}{ll} \min_{\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{z}} & \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{m} z_i \\ \text{s.t.} & y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b) \geq 1 - z_i,\ z_i \geq 0,\ i \in M. \end{array} \tag{5}$$

ここで，$\boldsymbol{w} \in \mathcal{R}^n$，$b \in \mathcal{R}$，$\boldsymbol{z} \in \mathcal{R}^m$ とする．この凸二次計画問題の最適解 $(\boldsymbol{w}^*, b^*)$ を用いて構築された識別関数 $h(\boldsymbol{x}) = \mathrm{sign}(\boldsymbol{w}^{*\top}\boldsymbol{x} + b^*)$ を使って，未学習データのラベルを予測する．ただし，$\mathrm{sign}(\xi)$ は $\xi \geq 0$ の時に 1, $\xi < 0$ では -1 をとるものとする．

この SVM では，正則化項 ($\|\boldsymbol{w}\|^2$) 最小化と経験損失 ($\sum_{i=1}^m z_i$) 最小化の 2 つの目的をコントロールするために，C という正値パラメータを含んだ定式化がなされている．データ $(\boldsymbol{x}_i, y_i), i \in M$ が与えられた時に，経験損失だけを最適化する識別関数を求めても，オーバーフィットなどのため，未学習データのラベル予測がうまくいかないことが多い．正則化項とよばれる $\|\boldsymbol{w}\|^2$ といった項をモデルに加えることによりオーバーフィットを避けるのが，正則化のよばれる手法である．

ここで，経験損失だけを最小化する問題を考えることにする．記号 $[X]^+ = \max\{X, 0\}$ を用いると，経験損失最小化問題は

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \sum_{i=1}^{m} [1 - y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i + b)]^+$$

と記述できる．$\boldsymbol{x}_i$ としてデータ $\boldsymbol{x}_i^o, i \in M$ が得られているものの，誤差を含んでいて不確定であると仮定し，不確実性集合：

$$\mathcal{U} = \{(\Delta\boldsymbol{x}_1, \ldots, \Delta\boldsymbol{x}_m) : \sum_{i=1}^{m} \|\Delta\boldsymbol{x}_i\| \leq \delta\}$$

を想定する．この経験損失最小化問題をロバスト化すると次の問題が得られる．

$$\min_{\boldsymbol{w},b} \max_{(\Delta\boldsymbol{x}_1,\ldots,\Delta\boldsymbol{x}_m)\in\mathcal{U}} \sum_{i=1}^{m} [1 - y_i\{\boldsymbol{w}^\top(\boldsymbol{x}_i^o + \Delta\boldsymbol{x}_i) + b\}]^+$$

このロバスト最適化問題を同値変形すると，

$$\begin{array}{ll} \min_{\boldsymbol{w},b,\boldsymbol{z}} & \delta\|\boldsymbol{w}\| + \sum_{i=1}^{m} z_i \\ \text{s.t.} & y_i(\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i^o + b) \geq 1 - z_i,\ z_i \geq 0,\ i \in M, \end{array} \tag{6}$$

に帰着されることが，論文 [19] により示された．問題 (6) の目的関数は “正則化項+経験損失” から成り立っており，ソフトマージン SVM(5) と非常に似た問題となっている．経験損失最小化問題をロバスト化することによって得られたことから，[19] は “ロバスト化＝正則化” という関係を示唆している．つまり，所与のデータ $\boldsymbol{x}_i^o, i \in M$ にオーバーフィットしない分類ルールは，そのデータの微小変動にロバストな解を用いて構築することができるのである．

6 おわりに

ロバスト最適化法は 1998 年に提案されて以降，速いスピードで研究が進んでおり，1 つの研究分野として確立してきている．つい最近，ロバスト最適化について包括的な解説を行なったテキスト [1] が出版されたところである．

本稿では，ロバスト最適化法の基本的な考え方を紹介するとともに，いくつかの研究の流れを挙げた．しかしながら，ロバスト最適化研究を追いきれていないため，興味をもった方には是非，テキストを参照していただきたい．

ロバスト最適化法は最適化分野において新しい研究テーマではあるが，既にその考え方は様々な分野で使われている．機械学習分野で研究の行なわれている SVM の正則化項に対して，ロバスト最適化の考え方から新しい解釈が与えられたように，他にも既存手法がロバスト最適化という視点から眺められるかもしれない．これを今後の研究課題の 1 つにしたい．

参考文献

[1] A. Ben-Tal, L. El Ghaoui and A. Nemirovski: Robust Optimization, Princeton University Press, 2009

[2] A. Ben-Tal and A. Nemirovski: Robust convex optimization; Mathematics of Operations Research, Vol. 23, pp. 769-805 (1998)

[3] A. Ben-Tal and A. Nemirovski: Robust solutions of linear programming problems contaminated with uncertain data; Mathematical Programming, Vol. 88, pp. 411-424 (2000)

[4] A. Ben-Tal, A. Goryashko, E. Guslitzer and A. Nemirovskii: Adjustable robust solutions of uncertain linear programs; Mathematical Programming, Vol. 99, No. 2, pp. 351-376 (2004)

[5] D. Bertsimas and C. Caramanis: Finite adaptability in multistage linear optimization; to appear in IEEE Transactions in Automatic Control

[6] D. Bertsimas and M. Sim: The price of robustness; Operations Research, Vol. 52, No. 1, pp. 35-53 (2004)

[7] G. Calafiore and M.C. Campi: A new bound on the generalization rate of sampled convex programs; 43rd IEEE Conference on Decision and Control (CDC04), Vol. 5, pp. 5328-5333 (2004)

[8] M.C. Campi and S. Garatti: The exact feasibility of randomized solutions of robust convex programs; SIAM Journal on Optimization, Vol. 19, No. 3, pp. 1211-1230 (2008)

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

[10] D. Goldfarb and G. Iyengar: Robust convex quadratically constrained programs; Mathematical Programming, Vol. 97, pp. 495-515 (2003)

[11] D. Goldfarb and G. Iyengar: Robust portfolio selection problems; Mathematics of Operations Research, Vol. 28, pp. 1-38 (2003)

[12] G.R.G. Lanckriet, L. El Ghaoui, C. Bhattacharyya, and M.I. Jordan: A robust minimax approach to classification; Journal of Machine Learning Research, Vol. 3, pp. 555-582 (2002)

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

[14] 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, No. 1, pp. 287-296 (2009)

[15] A. Takeda, S. Taguchi and R. Tütüncü: Adjustable Robust Optimization Models for a Nonlinear Two-Period System; Journal of Optimization Theory and Applications, Vol. 136, No. 2, pp. 275-295 (2008)

[16] A. Takeda, S. Taguchi and T. Tanaka: A Relaxation Algorithm with Probabilistic Guarantee for Robust Deviation Optimization Problems; to appear in Computational Optimization and Applications

[17] R. Tütüncü and M. Koenig: Robust asset allocation; Annals of Operations Research, Vol. 132, pp. 157-187 (2004)

[18] T.B. Trafalis and R.C. Gilbert: Robust classification and regression using support vector machines, European Journal of Operational Research, Vol. 173, pp. 893-909 (2006)

[19] H. Xu, C. Caramanis, S. Mannor: Robustness and Regularization of Support Vector Machines; to appear in Journal of Machine Learning Research