

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「現代の数理科学と連携する
モデリング手法の構築」
研究課題「大規模複雑システムの
最適モデリング手法の構築」

研究終了報告書

研究期間 2014年10月～2020年3月

研究代表者: 岩田 覚
(東京大学大学院情報理工学系研究科、教授)

§ 1 研究実施の概要

(1) 実施概要

モデル化は、数理的手法による現実の問題解決や現象の解明に不可欠な第一歩であるが、生命現象や社会現象の様に支配法則の不明確な対象を扱う際には、同じ現象に対しても多数のモデルが考えられる。本研究課題では、生命現象におけるネットワークや電力システム、交通システムを題材に、離散数学・最適化分野における最新の数理科学的知見を駆使して、多数のモデルの中から最も適切なものを効率的に選択する体系的な手法の創出に取り組んで来た。

例えば、微分代数方程式で記述される動的システムは、指数と呼ばれる特性量によって数値解法の難しさが特徴付けられている。同じ物理現象をモデル化した際にも変数の選び方や方程式の立て方によって指数は異なる。そこで、最小指数の微分代数方程式モデルを自動的に導出する手法を作ることが一つの目標となる。特に、機械力学系や化学プラントに現れる高指数の微分代数方程式への適用を念頭に、正確な値と独立パラメタの両方を含む混合行列を係数とする微分代数方程式に対する指数減少法を開発した。その結果、現在広く用いられている Pantelides のアルゴリズムが破綻する状況においても正しく動作する指数減少法が得られた。この手法は、非線形項を独立パラメタと見做すことで、一般の非線形微分代数方程式にも適用可能である。一方で、この手法とは別に、必要最低限の数式処理を援用することによって、一般の非線形微分代数方程式に対して、指数が1以下の等価な微分代数方程式を効率的に導出する手法も開発した。その結果、現在のシミュレーション・ソフトウェアで広く用いられている指数減少法では必ずしも正しい答えを導出できないという欠点が克服された。

ジャイレータを含む電気回路の過渡解析のための指数減少法を開発するためには、重み付き線形マトロイド・パリティ問題と呼ばれる組合せ最適化問題を解く必要がある。この問題は、Lovász (1978) が一様重みの場合に最大最小定理と多項式時間アルゴリズムを示して以来、40年近くに渡って未解決であった。本研究では、歪対称多項式行列による定式化を用いて、最初の多項式時間アルゴリズムを開発した。

統計的モデリングの最適化に関しては、離散凸解析に基づく離散 DC 計画法を開発した。また、多くの2値判別問題を統一的に定式化し、汎用的な高速解法を開発した。さらに、既存の複数の基底からいくつかの要素を選ぶことで、スパース表現のための辞書を作成する辞書選択に対して、新しい高速貪欲アルゴリズムを開発した。

大規模ネットワークから得られる大量のデータを圧縮する枠組として、テンソル分解の一般化に当たる低ランク基底問題を導入し、実用的なアルゴリズムを開発した。さらに、密なグラフの性質を保存したまま疎なグラフで近似するグラフ疎化の中でも、特にグラフのエネルギー関数を保つスペクトル疎化の概念をグラフからハイパーグラフに拡張した。

社会システムへの応用に関しては、交通システムと電力システムを対象とした研究を進めた。特に、通勤時間帯の列車が非常に混雑している東京首都圏において、移動時間と電車の混雑率に基づくコスト関数を用いた利用者均衡配分モデルを、時空間ネットワークを圧縮して得られるコンパクトなモデル上で繰り返し解く局所探索法により、優等列車停車駅の最適化を行う手法を開発した。また、配電損失最小化問題を非線形混合整数計画問題に定式化する手法を開発し、汎用ソルバによって、実用的な時間内に厳密最適解が得られることを明らかにした。さらに、現実のネットワークを基にしたベンチマーク問題の特徴を利用して、動的計画法に基づく、より高速な厳密解法を開発した。

生命現象に関しては、シロイヌナズナの概日周期やコウモリの採餌行動などの数理モデル化に関する研究を進めてきた。植物において、概日周期を統率する部位の存在を探るため、シロイヌナズナに関する計測データの解析を行い、茎頂部が概日周期を統率する役割を果た

していることを明らかにした。また、採餌のためにナビゲーション飛行するコウモリが、目の獲物のみならず、その先にいる次の獲物の位置までも超音波で先読みすることで、より多くの獲物を確実に捕らえる飛行ルートを選択していることを数理的解析とフィールド計測によって明らかにした。

このように、社会システムの設計や生命現象の解析に当たっても、最適化の視点を導入して、実際的な成果を挙げている。

(2) 顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

1. 重み付き線形マトロイド・パリティ問題の多項式時間解法

概要：多項式時間解法を有する代表的な組合せ最適化問題であるマッチングとマトロイド交叉の共通の一般化として1970年代に導入されたマトロイド・パリティ問題に関して、一般のマトロイドでは、多項式時間解法が存在し得ないが、行列表現を持つ線形マトロイドでは多項式時間で解けることが、Lovasz (1980) によって示された。本研究では、行列表現を持つ線形マトロイドに関して、重み付きのマトロイド・パリティ問題を解く最初の多項式時間アルゴリズムを与えた。

2. 組合せ緩和による指数減少法

概要：正確な数値と誤差を含む不正確な数値を明確に区別して動的システムをモデル化する道具である混合行列を用いて記述される微分代数方程式に対する指数減少法を開発した。その結果、現在広く用いられているPantelidesのアルゴリズムが破綻する場合も含めて、正確に指数1以下の等価な微分代数方程式を導出する方法が得られた。この手法は、非線形項を独立パラメータと見做すことで、一般の非線形微分代数方程式にも適用可能である。

3. 植物の概日時計に対する数理的解析

概要：哺乳類の概日周期は、脳の視交叉上核と呼ばれる部位で統率されていることが知られている。植物において同様の役割を果たす部位の存在を探るため、シロイヌナズナに関する計測データの解析を行い、茎頂部が概日周期を統率する役割を果たしていることを明らかにした。解析には、著者の一部(合原・平田)が先行研究において開発した線形計画法を用いた多変量時系列解析の手法が用いられている。

<科学技術イノベーションに大きく寄与する成果>

1. コウモリの3次元飛行経路計画

概要：採餌のためにナビゲーション飛行するコウモリが、目の獲物のみならず、その先にいる次の獲物の位置までも超音波で先読みすることで、より多くの獲物を確実に捕らえる飛行ルートを選択していることを数理的解析とフィールド計測によって明らかにした。今後、選択的および分散的注意機構に関する研究や、ドローンなどの自律移動ロボットの軌道計画研究分野における新しいモデル動物としての応用が期待できる。

2. 優等列車停車駅の最適化による混雑緩和

概要：通勤時間帯の列車が非常に混雑している東京首都圏において、移動時間と電車の混雑率に基づくコスト関数を用いた利用者均衡配分モデルを、時空間ネットワークを圧縮して得られるコンパクトなモデル上で繰り返し解く局所探索法により、優等列車停車駅の最適化を行う手法を開発し、京王線に対する数値実験を行って、提案手法の有用性を示した。

3. 辞書選択の高速貪欲アルゴリズム

概要：既存の複数の基底からいくつかの要素を選ぶことで、スパース表現のための辞書を

作成する辞書選択に対して、新しい高速貪欲アルゴリズムを開発した。このアルゴリズムは、二段階劣モジユラ最大化と圧縮センシングの技法を組合せたものであり、より複雑な疎性の制約にも対応できる。また、提案アルゴリズムをオンライン学習の設定へと拡張し、近似リグレットの上界を与えた。さらに、数値実験で提案アルゴリズムが高速かつ高性能であることを示した。

<代表的な論文>

1. S. Iwata, T.Oki, and M. Takamatsu: Index reduction for differential-algebraic equations with mixed matrices. Journal of the ACM, vol.66, No. 35, pp.1-34, 2019.
2. S. Iwata and Y. Kobayashi: A weighted linear matroid parity algorithm, Proceedings of the 49th ACM Symposium on Theory of Computing (STOC), 2017, pp. 264-276.
3. E. Fujioka, I. Aihara, M. Sumiya, K. Aihara, and S. Hiryu, Echolocating bats use future-target information for optimal foraging, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, Vol.113, No.17, pp.4848-4852, 2016.

§ 2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

① 「岩田」グループ

- ・研究代表者: 岩田 覚(東京大学情報理工学系研究科 教授)
- ・研究項目:
 - ・微分代数方程式モデルの最適化
 - ・統計的モデルの最適化
 - ・大規模ネットワーク
 - ・生命現象の最適モデリング
 - ・社会システムの最適モデリング

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

2015年9月～12月の期間に、Bonn大学 Hausdorf 研究センターの研究プログラム「組合せ最適化」の企画に携わった。その中では、特に、サマースクールを開いて、離散凸解析の普及に努めると共に、剛性・劣モジユラ性・離散凸性をテーマとした研究集会を開催して、関連する世界中の研究者間の交流を推進した。

2015年～2019年の毎年12月に ERATO 河原林巨大グラフプロジェクトが主催する情報系 WINTER FESTAに参加し、プロジェクトの概要に関する講演と若手研究者によるポスター発表を行い、情報系のプロジェクトとの研究交流を行った。

2016年4月～2018年3月の期間に、東京電力との共同研究を通じて、気象条件に基づく電力需要の短期予測、ならびに、ライフステージ調査に基づく家計単位での中長期的電力需要予測に関する研究を行った。これによって、実際の時系列データを解析して需要を予測する手法の経験を積み、社会の必要とするモデリング手法に関する知見を学んだ。また、調査票データから疎性モデリング手法を用いて、有用な情報をできるだけ抽出する手法を開発した。

2017年4月～5月には、Grenoble 工科大学の Zoltan Szigeti 氏を招聘して、有向ネットワーク中の根付き有向木の詰込みに関する共同研究を行った。

2017年11月には、Melbourne 大学の Thomas Quella 氏を招聘し、量子可積分系に関する共同研究を行った。

2018年8月には, Bonn 大学 Hausdorf 研究センターの研究プログラムの延長で研究集会を企画し, 関連分野の研究者間の交流を推進した.

2018年9月には, FIT におけるイベント企画として最適モデリングをテーマとする特別セッションを企画し, 岩田, 山口, 横井の3名が講演を行った.

2019年5月には, 最適モデリング手法の基礎を支える離散的手法を主たるテーマとして日本・ハンガリーの2国間での国際シンポジウムを東京大学で4日間にわたり開催した. ハンガリーからの参加者37名を含んで, 全部で117名の参加者があった.

2019年9月には, CREST 高木チームが主催している国際会議 MQC に参加し, 招待講演を行った.