様　式　C－19、F－19－1、Z－19　(共通)

科研費 KAKENHI

# 科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　元 年　 6 月 19 日現在

機関番号：１２１０２
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2016～2018
課題番号：１６Ｋ００００２８

研究課題名（和文）非凸大域的最適化のための実践的分枝限定法の構築

研究課題名（英文）Construction of practical algorithms for nonconvex global optimization

研究代表者
久野　誉人（Kuno, Takahito）

筑波大学・システム情報系・教授

研究者番号：００２０５１１３

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,400,000円

研究成果の概要（和文）：非線形凹最小化問題の大域的最適解を確定的に求めるために単体的分枝限定法の細分規則であるω細分を拡張し，単体分割の中心を単体内に限定しない拡張ω細分規則による単体的分枝限定法を提案した．アルゴリズムの大域的最適解への収束を証明し，計算機上に実装したのち，通常のアルゴリズムと比較実験を行ったところ，経験的効率が格段に向上していることを確認した．
　また，アルゴリズムの中で繰り返し解く線形計画法に対するシンプレックス法の反復回数に関しても，北原・水野による上界値の算出が理論的に困難であることを証明し，北原・水野の上界値の上界をいくつかのベンチマーク問題で実際に計算した．

研究成果の学術的意義や社会的意義
凸最小化問題に対する経験的に効率の良いアルゴリズムはこれまで数多く提案されているが，凸性を満たさない問題に対しては未だにおもちゃサイズの問題を解くのも難しい．しかし，昨今では機械学習などで凸性を満たさない最適化問題の効率のよいアルゴリズムが求められており，提案した拡張ω細分規則を用いた単体的分枝限定法はその要求に十分答えることができる．また，シンプレックス法の反復回数に関して，北原・水野の上界値は最新で有望なものと注目を集めているが，他の上界値にはない２つのパラメータを含んでいる．その値の算出が困難であることを理論的に証明したことは，この上界値の有用性を左右する重要な結果である．

研究成果の概要（英文）：　In order to find a globally optimal solution to nonlinear concave minimization problems, we extended the ω-subdivision rule for the simplicial branch-and-bound algorithm and allowed the center of subdivision to be out of each simplex.  We proved the convergence of this modified simplicial branch-and-bound algorithm to a globally optimal solution, and after programming, compared it with the usual algorithm. The numerical results indicated that our algorithm improves the empirical performance considerably.
　In our algorithm, the simplex algorithm solves linear programming problems iteratively.  We showed that Kitahara-Mizuno's bound on the number of iterations required by the simplex algorithm is theoretically hard to calculate, and instead computed an upper bound on their bound for some benchmark problems actually on a computer.

研究分野：数理最適化

キーワード：数理最適化　大域的最適化　非線形最適化　非凸最小化　アルゴリズム

## １．研究開始当初の背景

非凸大域的最適化のための最初の体系的なアルゴリズムは，1964 年に Tuy が凹最小化問題に対して提案した錐的アルゴリズムである．このアルゴリズムでは分枝限定法のアイディアに基づき，問題の実行可能領域をいくつかの錘で分割して子問題を定義し，それぞれの実行可能領域上で凹性カットと呼ばれる１次関数の最大化を行う．凹性カットの値が閾値を越えなければ，その子問題を考察の対象から棄却（限定操作），閾値を超える場合は錘をさらに分割して新たな子問題を定義する（分枝操作）．凹最小化に対するもう一つのポピュラーなアルゴリズムは，1976 年に Horst が発表した単体的アルゴリズムで，これも錐的アルゴリズムと同じく分枝限定法のカテゴリーに属する．単体的アルゴリズムでは，実行可能領域を単体で分割して子問題を定義し，それぞれの下界値計算のために目的関数の凸包絡を最小化する．この１次関数が与える下界値が暫定解の値を上まわれば子問題を棄却（限定操作），そうでなければ単体をさらに分割する（分枝操作）．

非線形凹最小化に対してこれまでに提案された確定的アルゴリズムのほとんどは，多かれ少なかれ錐的アルゴリズムか単体的アルゴリズムのバリエーションとみなすことができる．２つのアルゴリズムがここまで注目されてきた理由は，整数計画問題に対する分枝限定法との類似性から高い実用性の見込まれることが第一に挙げられる．しかしそれだけでなく，分枝限定法の非線形計画問題に対する振舞いに多くの研究者が惹きつけられてきたことも大きな理由の一つである．整数計画問題とは違って非線形計画問題では，分枝操作をいくら進めていっても自明な解をもつ子問題が得られることはなく，子問題の難しさは常に元の問題と本質的に同じである．そのため，アルゴリズムの生成する暫定解の列が正しく大域的最適解に収束するかどうかが学術的議論の焦点となる．この収束性を左右するのは錘や単体の分割規則であり，例えば単体的アルゴリズムでは，単体の最長辺を二等分するような網羅的分割規則を用いれば大域的収束性の保証されることが知られている．

## ２．研究の目的

本研究の目的は，非凸関数，特に非線形凹関数の大域的最小化のための実践的なアルゴリズムの構築にある．凹最小化で有望視される確定的アルゴリズムとしては，先に述べた通り，錐的アルゴリズム，単体的アルゴリズムと呼ばれる２つの分枝限定法の研究が半世紀以上にわたって続けられている．その間，実社会に現れる最適化問題は一方で大規模化，他方で精緻化し，かつては夢想もしえなかった規模や精度の問題解決が求められている．この時代のニーズに応えるため，二つのアルゴリズムのうち，特に単体的アルゴリズムに注目し，これを再構築して収束後に精度保証のある実行可能解を生成することはもちろん，途中終了させても質の高いヒューリスティックな出力の期待できる新しいタイプの非線形分枝限定法を３年の研究期間で開発する．

## ３．研究の方法

研究の対象としたのは次の凹最小化問題である：

$$\text{(P1)}\ \left|\ \begin{array}{ll} \text{最小化} & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{条　件} & \boldsymbol{x} \in D, \end{array}\right.$$

あるいは等価であるが，

$$\text{(P2)}\ \left|\ \begin{array}{ll} \text{最大化} & g(\boldsymbol{x}) = -f(\boldsymbol{x}) \\ \text{条　件} & \boldsymbol{x} \in D. \end{array}\right.$$

ここで，$f$は凹関数，$D$は凸集合を表すが，簡単のため，適当な大きさの行列$\boldsymbol{A}$とベクトル$\boldsymbol{b}$によって次のように凸多面体で与えられるものとする：

$$D = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \le \boldsymbol{b}\}.$$

問題(P1)，あるいは(P2)の大域的最適解を確定的に求めるための標準的な単体的アルゴリズムでは，$D$を含む単体$S_1$を求め，それを複数の子単体$S_k$に逐次分割しながら，$D \cap S_k$上での関数$f$の下界値を計算したのち，暫定解$\boldsymbol{x}^*$における$f$の値よりも下界値が劣れば，$D \cap S_k$に最適解の含まれることはないので子単体$S_k$を棄却する限定操作を行う．暫定解$\boldsymbol{x}^*$における$f$の値よりも下界値が優れていれば，分子操作で単体$S_k$をさらに細分して大域的最適解の探索を行う．下界値は単体$S_k$の端点で$f$と関数値が一致する凸包絡関数$g_k$を$D \cap S_k$上で最小化することによって求めるが，$g_k$は１次関数なので次のような線形計画問題を解くことによって容易に計算できる：

$$(\mathrm{Q}_k)\left|\begin{array}{ll}\textbf{最小化} & g_k(\boldsymbol{x})\\ \textbf{条　件} & \boldsymbol{x}\in D\cap S_k.\end{array}\right.$$

アルゴリズムの収束を左右するのは単体$S_k$の分割の仕方で，その最長辺を２分割する網羅的な規則で収束は保証されるものの，線形計画問題$(\mathrm{Q}_k)$を解いて得られたその最適解$\boldsymbol{\omega}_k$を有効に利用することができない．そこでこの$\boldsymbol{\omega}_k$を中心に端点に向かって放射状に$S_k$を分割するω細分規則が経験的にも効率がよいとして広く使われている．この分割規則を用いる単体的アルゴリズムの収束性は，2000 年に Locatelli と Raber によって証明されているが，久野と Buckland や石濱によって$\boldsymbol{\omega}_k$を通る$S_k$の２分割や，より一般的に$p$分割する規則を用いた場合の収束証明が 2012，2016 年に発表されている．

こうしたω細分規則は，理論的にも経験的にも単純な２分割規則を凌駕するが，$\boldsymbol{\omega}_k$を与える線形計画問題$(\mathrm{Q}_k)$は$S_k$の細分化に伴い，実行可能領域の形が変化するため，$\boldsymbol{\omega}_k$は必ずしも$(\mathrm{Q}_{k+1})$の実行可能解とは限らず，そのため，$\boldsymbol{\omega}_k$から$(\mathrm{Q}_{k+1})$の最適解を探索する，いわゆるホットスタートを直ちに実行することができない．そこで本研究では，$\boldsymbol{x}\in S_k$の縛りを$(\mathrm{Q}_k)$の制約条件から外し，よりシンプルな線形計画問題：

$$(\mathrm{Q}'_k)\left|\begin{array}{ll}\textbf{最小化} & g_k(\boldsymbol{x})\\ \textbf{条　件} & \boldsymbol{x}\in D\end{array}\right.$$

の最適解$\boldsymbol{\omega}'_k$を用いて下界値計算を行うことにした. 問題$(\mathrm{Q}_k)$の実行可能領域は$(\mathrm{Q}'_k)$の実行可能領域の部分集合なので, $g_k(\boldsymbol{\omega}'_k) \le g_k(\boldsymbol{\omega}_k)$が成り立ち, したがって$g_k(\boldsymbol{\omega}'_k)$は$D\cap S_k$上での$f$の下界値として使うことができる．この$(\mathrm{Q}'_k)$では，元の問題(P1)，あるいは(P2)と同じ実行可能領域上で解の探索が行われるため，早期に上質な暫定解の得られることも期待でき，アルゴリズムのヒューリスティクな利用にも好都合である．

また，$(\mathrm{Q}_k)$や$(\mathrm{Q}'_k)$などの求解にはホットスタートとの相性のよいシンプレックス法を用いるため，単体的アルゴリズムのパフォーマンス改善に対するためのもう一つの鍵はシンプレックス法自体にある．そこで，実行可能領域$D$を定義する行列$\boldsymbol{A}$のサイズを$m\times n$としたとき，シンプレックス法が必要とするピボット演算の回数に対して北原と水野が 2013 年に与えた上界値$(m+n)\lceil(m\gamma/\delta)log(m\gamma/\delta)\rceil$がどの程度の精度なのかについても調査した.

## ４．研究成果

### (1) 錐的アルゴリズムに対する主な成果（②⑨）

上記の方法で$(\mathrm{Q}_k)$の代わりに$(\mathrm{Q}'_k)$を用いれば，下界値の劣化はやむを得ないものの，$\boldsymbol{\omega}'_k$から$(\mathrm{Q}'_{k+1})$の最適解の探索を直ちに始められるため，計算時間の大幅な短縮が期待できる．その一方，$\boldsymbol{\omega}'_k$はもはや$S_k$の点である保証はないので，$\boldsymbol{\omega}'_k$を中心に$S_k$を放射状に分割するω細分規則を用いることができない．そこで，以下の拡張ω細分規則を①で提案した：

ステップ 1．単体$S_k$の端点集合によって定義される行列$\boldsymbol{V}$に対して連立１次方程式：

$$\boldsymbol{V}\ \boldsymbol{y} = \boldsymbol{\omega}'_k,\quad \boldsymbol{e}\ \boldsymbol{y} = 1$$

を$\boldsymbol{y}$に関して解く．ただし，$\boldsymbol{e}$はすべての成分が１の行ベクトルをあらわす.

ステップ 2．連立１次方程式の解$\boldsymbol{y}$の正の成分の添字集合$J = \{j \mid y_j > 0\}$に対し，$j \in J$ならば$z_j = y_j / \sum_{k\in J} y_k$，そうでなければ$z_j = 0$を成分とするベクトル$\boldsymbol{z}$を求める．

ステップ 3．単体$S_k$を$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{V}\ \boldsymbol{z}$を中心に端点に向かって放射状に分割する.

残念ながら，この分割規則だけを使った単体的アルゴリズムの収束証明は未解決であるが，アルゴリズムが終了しない場合には拡張ω細分規則に加え，単純な２分割を無限回実施することでアルゴリズムの大域的最適解への収束が保証されることを証明できた.

拡張ω細分規則に基づく単体的アルゴリズムを計算機上に実装し，問題(P2)の実行可能領域$D$を定義する行列$\boldsymbol{A}$のサイズが$60\times 150$から$150\times 250$までの問題例をランダムに生成して解かせたところ，最大でも平均 10 秒程度での求解が可能なことを確認し，最大で平均 60 秒以上もかかる標準的な単体的アルゴリズムよりもはるかに経験的な効率のよいことが明らかとなった. 問題$(\mathrm{Q}'_k)$は元の問題(P1)，あるいは(P2)の制約条件の構造をそのまま受けつぐため，ネットワーク構造などが仮定されていればさらなるパフォーマンスの改善を期待できる.

### (2) シンプレックス法のピボット演算回数に関する主な成果（①）

さて，$(\mathrm{Q}_k)$や$(\mathrm{Q}'_k)$を解くためのシンプレックス法のピボット演算回数に対する北原と水野の上界値$(m+n)\lceil(m\gamma/\delta)log(m\gamma/\delta)\rceil$であるが，その算出には問題のすべて実行可能基底解の成分の中から正の最小値δと最大値γを求める必要がある．最大値γの方は，$x_j$を各$j$について問題

の実行可能領域上で最大化し，$n$個の最大値の最大値を求めればよく，内点法を使えば多項式時間で得られることがわかる．一方，最小値δを求める作業は NP 困難であることが判明し，次の NP 完全問題：

PARTITION
入力：$n$個の整数$a_j$, $j = 1, \dots, n$
質問：$\sum_{j \in S} a_j = \sum_{j \notin S} a_j$を満たす部分集合$S \subset \{1, \dots, n\}$は存在するか

が次の最適化問題：

FINDING γ
入力：整数$m \times n$行列$\boldsymbol{A}$と整数$m$ベクトル$\boldsymbol{b}$
出力：線形システム$\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0}$のすべての実行可能基底解の中から正の最小成分をもつものがあれば出力せよ

に多項式時間で還元できることの証明を②に与えた．そのため，δの代わりに容易に計算できるその上界値を用いて北原と水野の上界値の下界を各種のベンチマーク問題に対して算出したが，残念ながら，特殊な構造を持つ問題例を除き，北原と水野の上界値はシンプレックス法のピボット演算回数を事前予測するための指標としては芳しくないことが明らかとなった．

(3) 研究成果の位置づけとインパクト，その他の成果
機械学習などの分野では近年，DC 最適化とよばれる 2 つの凸関数の差の最適化が注目されており，DCA とよばれる局所最適化アルゴリズムが定番として使われている．この研究で得られた錐的アルゴリズムは，問題($Q'_k$)の目的関数を凸関数に置き換えるだけでほぼストレートに DC 最適化問題へ応用でき，しかもヒューリスティクスとしても使えることから，局所最適化の DCA と並んで大域的最適化の定番となるポテンシャルを備えている．錐的アルゴリズムに関する研究やシンプレックス法のピボット演算回数の研究のほか，これらに関連して，単体上での非凸関数の最小化に対する多項式時間近似スキームの設計③⑧や，矩形領域への等半径円充填問題に対する大域的最適化アルゴリズムの開発⑦，凸集合の補集合と凸多面体との積集合上での１次関数の最適化に関する研究⑥などを行い，それぞれに有益な成果を得ることもできた．これらの成果のさらなる発展が近々の研究課題である．

## ５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計 5 件）

① Kuno, T., Y. Sano, and T. Tsuruta, "Computing Kitahara-Mizuno's bound on the number of basic feasible solutions generated with the simplex algorithm", *Optimization Letters*, 査読有, Vol.12, 2018, pp.933-943.

② Kuno, T., "A modified simplicial algorithm for convex maximization based on an extension of ω-subdivision", *Journal of Global Optimization*, 査読有, Vol.71, 2018, pp.297-311.

③ Chiba, R., T. Kuno, and Y. Sano, "A polynomial-time approximation scheme for monotonic optimization over the unit simplex", 数理解析研究所講究録，査読無, Vol.2069, 2018, pp.74-83.

④ Anh., P.N., T.T.H. Anh, and T. Kuno, "Convergence theorems for variation inequalities on the solution set of Ky Fan inequalities", *Acta Mathematica Vietnamica*, 査読有, Vol.42, 2017, pp.761-773.

⑤ T. Kuno, "On an extenstion of the ω-subdivision rule used in the simplicial algorithm for convex maximization", 数理解析研究所講究録，査読無, Vol.2027, 2017, pp.167-178.

〔学会発表〕（計 4 件）

⑥ 今泉肇，久野誉人，佐野良夫，"逆凸条件付き線形計画問題に関する研究"，日本 OR 学会 2018 年秋季研究発表会，2018, 9/6-9/7，名古屋市立大学（愛知県）．

⑦ 渡邊雅弘，久野誉人，佐野良夫，"An algorithm for packing equal circles in a square"，数理解析研究所共同研究（公開型）「高度情報化社会に向けた数理最適化の新潮流」, 2018, 8/6-8/7，京都大学数理解析研究所（京都府）．

⑧ 千葉竜介，久野誉人，佐野良夫，"単位単体上での単調最適化に対する多項式時間近似スキーム"，数理解析研究所共同研究（公開型）「数理最適化の発展：モデル化とアルゴリズム」, 2017, 8/24-8/25，京都大学数理解析研究所（京都府）．

⑨ 久野誉人，"拡張ω細分規則を用いた単体アルゴリズムについて"，数理解析研究所研究集会「最適化技法の最先端と今後の展開」, 2016, 8/25-8/26，京都大学数理解析研究所（京都府）．

〔その他〕
ホームページ等
http://www.cs.tsukuba.ac.jp/~takahito/

## ６．研究組織

(1)研究分担者
研究分担者氏名：吉瀬　章子

ローマ字氏名： (YOSHISE, Akiko)

所属研究機関名：筑波大学

部局名：システム情報系

職名：教授
研究者番号（8 桁）：50234472

(2)研究協力者
研究協力者氏名：千葉　竜介
ローマ字氏名： (CHIBA, Ryusuke)
研究協力者氏名：鶴田　貴大
ローマ字氏名： (TSURUDA, Takahiro)
研究協力者氏名：今泉　肇
ローマ字氏名： (IMAIZUMI, Hajime)
研究協力者氏名：渡邊　雅弘
ローマ字氏名： (WATANABE, Masahiro)