

令和 4 年 5 月 26 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2017～2021

課題番号：17H01699

研究課題名（和文）一般化固有値計算による大域最適化手法の展開

研究課題名（英文）Development of Global Optimization Methods by Generalized Eigenvalue Computation

研究代表者

岩田 覚（Iwata, Satoru）

東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授

研究者番号：00263161

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 5,600,000円

研究成果の概要（和文）：一般に効率的なアルゴリズムの設計が原理的に不可能であると言われている非凸最適化問題の中でも幾何的な背景を有する問題に焦点を絞り、その構造を利用して、大域最適解を見出す効率的なアルゴリズムを設計する手法を発展させた。特に、1本の制約式のみを含む非凸2次制約2次計画問題(QCQP)に対して、一般化固有値問題に帰着することによって、効率的に最適解を得る手法を開発した。さらに、一般の非凸QCQPに対して、Lagrange 双対問題を考え、子問題としての1制約非凸QCQPを繰り返し解くことによってLagrange乗数を逐次改善して、緩和解を高速に得る手法を新たに開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

これまで厳密な最適解を効率的に計算することは殆ど不可能だろうと思われていた非凸最適化問題に対して、幾何的な背景を有する特殊な問題であれば、一般化固有値計算を用いて、大域最適化を得られることを明らかにした。特に、一般の非凸無制約最適化問題の解法として広く使われている信頼領域法の中で繰り返し解く必要が生じる信頼領域部分問題(TRS)の高速解法を発表した論文は、比較的多くの研究に引用されている。その中には、3次正則化に対して手法を拡張したドイツの研究者による論文など、興味深い後続研究が現れている。

研究成果の概要（英文）：While non-convex optimization problems are hard to solve in general, this research has focused on those problems that have geometrical backgrounds and investigated a methodology to design efficient algorithms for obtaining globally optimal solutions. In particular, we have developed an efficient algorithm for non-convex quadratic constraint quadratic programming (QCQP) with one constraint. In addition, we exploit this algorithm to obtain relaxation solutions for general non-convex QCQP with the aid of the Lagrange multipliers.

研究分野：数理工学

キーワード：数理最適化 大域最適化 一般化固有値 アルゴリズム

## 1. 研究開始当初の背景

数理最適化分野では、凸最適化問題に関する理論が整備され、各種の効率的なアルゴリズムが開発されている一方で、非凸最適化問題に対しては、効率的な解法の設計が原理的に不可能と言われてきた。本研究課題では、幾何的な背景を持つ非凸計画問題に着目し、その特殊な構造を利用することで、大域的最適解を見出す効率的なアルゴリズムの設計手法に焦点を当てた。

連続系の数理最適化問題の中でも、線形計画問題、2次錐計画問題、半正定値計画問題などの凸計画問題においては、局所最適解が大域的な最適解を与える。さらに、適切な方法で双対問題が定義され、主問題と双対問題の最適値が一致するという双対定理が成立し、内点法に代表される効率的な解法の基礎となっている。しかし、実際上の最適化問題の中には、実行可能領域や目的関数の凸性が成立しない非凸計画問題も少なくない。この場合には、一般に複数の局所最適解が存在し得る。それらの内で大域的最適解を見出すには、局所的な情報だけでは原理的に不可能となるため、非凸計画問題の大域的最適化は、一般に計算困難な問題として認識されている。そのため、非凸計画問題に対しては、局所探索によって局所最適解を見出して、近似解として採用するという手法が一般的である。この方法は、効率的に出力が得られるという利点がある反面、得られた解の最適性に関する保証がないことが難点となる。一方、切除平面法や分枝限定法等を用いて大域的最適解を厳密に計算する手法も研究されている。これらの方法の中には、有限回の反復の後に最適解が得られることが保証されるものもあるが、計算量は莫大なものとなる。

固有値問題に対する研究は、最適化問題に対する研究とは別の流れで研究が進められてきた。しかし、実対称行列に関する最大固有値が Rayleigh 商の最大値で与えられ、他の固有値も単位球面上での2次形式の極値に一致するという Courant-Fischer の定理は、固有値問題と大域的最適化の密接な関係を示唆するものである。固有値計算の様々なアルゴリズムによって、非常に特殊な非凸最適化問題が効率的に解かれたことになるという事実は、非凸最適化問題が一般に難しいと捉えて来た連続最適化の文脈においては、驚くべきことである。

代表者等は、この事実に着目し、一般化固有値問題を含む最新の行列計算アルゴリズムを活用することで、より広範囲の実用的な非凸最適化問題に対する効率的な厳密解法の設計を目指した研究を平成25年度から開始した。特に、平成26年度から今年度までは、科学研究費補助金挑戦的萌芽研究の支援を受け、2楕円体間の符号付き距離を効率的に計算する初めての厳密解法を設計した。さらに、ここで用いた手法を拡張して、2本の制約を有する2次制約2次計画問題全般に対する効率的な厳密解法を開発した。

楕円体間の符号付き距離とは、二つの楕円体の離れ方・重なり方を表す量である。両楕円体が重なりを持たない場合は正の値を取り、その絶対値は両楕円体上の点対間の最小距離に等しい。一方、両楕円体が重なりを持つ場合には負の値を取り、その絶対値は両楕円体の共通部分を挟む2枚の平行な超平面間の距離の最小値に等しい。正の値を取る場合には、凸最適化問題に定式化され、効率的なアルゴリズムが知られていた。対照的に、負の値を取る場合には、非凸最適化問題となり、効率的なアルゴリズムの存在は知られていなかった。

## 2. 研究の目的

本研究課題では、一般に効率的なアルゴリズムの設計が原理的に不可能であると言われている非凸最適化問題の中でも幾何的な背景を有する問題に焦点を絞り、その構造を利用して、大域最適解を見出す効率的なアルゴリズムを設計する手法を確立することを目的とした。具体的には、一般化固有値計算を用いて、制約条件数が定数で抑えられる2次制約2次計画問題に対する実装可能な多項式時間厳密解法を開発することを目標とした。さらに、一般化固有値計算を利用した非凸最適化問題の解法を、できるだけ一般的な枠組みに拡張することを目指した。

## 3. 研究の方法

非線形関数の無制約最適化を中心に広く使われる信頼領域法では、反復毎に信頼領域と呼ばれる楕円体の中で、2次目的関数を最小化する問題を解く。この問題は、信頼領域部分問題 (TRS) と呼ばれ、非凸最適化問題であるが、半正定値計画緩和が常に最適解を与えるために、多項式時間で解けることが知られている。萌芽研究の成果として2017年に論文発表した一般化固有値問題を經由してTRSを解く手法は、半正定値計画緩和による従来の解法よりも格段に高速で、高い精度を達成している。一方、TRSに多数の線形不等式制約が付加された一般化TRSに対して、半正定値計画緩和による手法を中心に、多くの研究がなされている。特に、付加する不等式条件数が定数の場合には多項式時間が得られることが報告されている。

本研究課題では、この方向性の延長線上で、多数の線形制約条件が付加された一般化TRSを解く効率的な解法を検討した。また、重み付きプロク拉斯テス解析に関して、半正定値計画緩和が厳密な最適解を与えるための十分条件を解析すると共に、KKT条件を満たすLagrange乗数を固有値として抽出できる行列束の設定を試みた。

## 4. 研究成果

2次制約2次計画問題(QCQP)に対して、半正定値計画緩和を用いて緩和解を得る手法が盛んに研究されている。しかし、半正定値計画問題を解くには多大な計算時間が必要とされるため、より高速に緩和解を得る手法の開発が望まれている。1本の制約式のみを含む非凸2次制約2次計画問題(QCQP)に対して、一般化固有値問題に帰着することによって、効率的に最適解を得る手法を開発した。この手法は、信頼領域部分問題に対して以前に開発した高速解法の拡張に当たる。さらに、一般の非凸QCQPに対して、Lagrange双対問題を考え、子問題としての1制約非凸QCQPを繰り返し解くことによってLagrange乗数を逐次改善して、緩和解を高速に得る手法を新たに開発した。また、一般化プロク拉斯テス解析において、半正定値緩和が実用上有効であることの構造的な背景を明らかにした。

制約付き凸最適化問題や非凸最適化問題に対して、停留点への大域収束性の保証を有する効率的な解法を提案した。特に、複数の制約を持つシステム同定問題の定式化を行ない、その問題の特徴(各制約について射影計算が簡単であること)を利用したペナルティ法を開発して、停留点への大域収束性の保証を与えた。多レベルから成る非凸最適化問題に対して、

収束性の保証のついた解法を初めて提案し、機械学習の敵対的学習問題に適用して、解法の有用性を確認した。また、公平性を考慮した機械学習モデルを構築し、近接勾配法により効率よく解けることを示した。さらに、DC 最適化問題に対して、勾配情報に加えて2階微分の情報を利用した解法を提案し、勾配ベースのアルゴリズムに比べて高速であることを理論的、実験的に確認した。

一般化固有値計算を用いて特殊な非凸最適化問題を解くという本研究課題のアプローチは、海外の研究者にも受け入れられてきた。特に、TRS の高速解法を発表した論文は、比較的多くの研究に引用されている。その中には、3次正則化に対して手法を拡張した論文など、興味深い後続研究が現れている。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計17件（うち査読付論文 17件 / うち国際共著 8件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Ivan Markovsky, Tianxiang Liu, Akiko Takeda	4. 巻 68
2. 論文標題 Data-driven structured noise filtering via common dynamics estimation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Signal Processing	6. 最初と最後の頁 3064-3073
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/TSP.2020.2993676	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Tianxiang Liu, Ivan Markovsky, Ting Kei Pong, Akiko Takeda	4. 巻 41
2. 論文標題 A hybrid penalty method for a class of optimization problems with multiple rank constraints	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications	6. 最初と最後の頁 1260-1283
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/19M1269919	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Hikaru Ogura, Akiko Takeda	4. 巻 -
2. 論文標題 Convex fairness constrained model using causal effect estimators	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 WWW '20: Companion Proceedings of the Web Conference 2020	6. 最初と最後の頁 723-732
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3366424.3383556	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Satoru Iwata, Yusuke Kobayashi	4. 巻 -
2. 論文標題 A weighted linear matroid parity algorithm	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Computing	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/17M1141709	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Satoru Adachi, Yuji Nakatsukasa	4. 巻 173
2. 論文標題 Eigenvalue-based algorithm and analysis for nonconvex QCQP with one constraint	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Mathematical Programming	6. 最初と最後の頁 79-116
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10107-017-1206-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Daniel Andrade, Akiko Takeda, Kenji Fukumizu	4. 巻 30
2. 論文標題 Robust Bayesian Model Selection for Variable Clustering with the Gaussian Graphical Model	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Statistics and Computing	6. 最初と最後の頁 351-376
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11222-019-09879-9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Donya Rahmani, Mahesan Niranjan, Damien Fay, Akiko Takeda, Jacek Brodzki	4. 巻 131
2. 論文標題 Estimation of Gaussian Mixture Models via Tensor Moments with Application to Online Learning	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Pattern Recognition Letters	6. 最初と最後の頁 285-292
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.patrec.2020.01.001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Satoru Iwata, Yu Yokoi	4. 巻 45
2. 論文標題 Finding a Stable Allocation in Polymatroid Intersection	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Mathematics of Operations Research	6. 最初と最後の頁 63-85
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1287/moor.2018.0976	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Satoru Iwata, Yu Yokoi	4. 巻 -
2. 論文標題 A Blossom Algorithm for Maximum Edge-Disjoint T-Paths	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of the 30th Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms	6. 最初と最後の頁 1933-1944
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/1.9781611975994.119	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ivan Markovsky, Tianxiang Liu, Akiko Takeda	4. 巻 -
2. 論文標題 Subspace methods for multi-channel sum-of-exponentials common dynamics estimation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of the 58th IEEE Conference on Decision and Control	6. 最初と最後の頁 2672-2675
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/CDC40024.2019.9029261	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Satoru Adachi, Yuji Nakatsukasa	4. 巻 173
2. 論文標題 Eigenvalue-based algorithm and analysis for nonconvex QCQP with one constraint	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Mathematical Programming	6. 最初と最後の頁 79 ~ 116
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10107-017-1206-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 N. Ito, S. Kim, M. Kojima, A. Takeda, K.-C. Toh	4. 巻 72
2. 論文標題 Equivalences and differences in conic relaxations of combinatorial quadratic optimization problems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Global Optimization	6. 最初と最後の頁 619 ~ 653
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10898-018-0676-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Satoru Iwata, Mizuyo Takamatsu	4. 巻 39
2. 論文標題 Index Reduction via Unimodular Transformations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications	6. 最初と最後の頁 1135 ~ 1151
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/17M111794X	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Satoru Adachi, Yuji Nakatsukasa	4. 巻 On-line First
2. 論文標題 Eigenvalue-based algorithm and analysis for nonconvex QCQP with one constraint	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Mathematical Programming	6. 最初と最後の頁 1-27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10107-017-1206-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shinji Yamada, Akiko Takeda	4. 巻 On-line First
2. 論文標題 Successive Lagrangian relaxation algorithm for nonconvex quadratic optimization	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Global Optimization	6. 最初と最後の頁 1-38
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10898-018-0617-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yuji Nakatsukasa, Vanni Noferini	4. 巻 578
2. 論文標題 Inertia laws and localization of real eigenvalues for generalized indefinite eigenvalue problems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Linear Algebra and its Applications	6. 最初と最後の頁 272 ~ 296
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.laa.2019.05.010	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する



1. 著者名 Yuji Nakatsukasa	4. 巻 89
2. 論文標題 Sharp error bounds for Ritz vectors and approximate singular vectors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Mathematics of Computation	6. 最初と最後の頁 1843 ~ 1866
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1090/mcom/3519	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計13件 (うち招待講演 9件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 Akiko Takeda
2. 発表標題 Deterministic and Stochastic Gradient Methods for Non-Smooth Non-Convex Regularized Optimization
3. 学会等名 Variational Analysis and Optimisation Webinar series (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Satoru Iwata
2. 発表標題 Matroid Parity
3. 学会等名 The 12th Annual Meeting of the Asian Association for Algorithms and Computation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Satoru Iwata
2. 発表標題 Pfaffian and Matroid Matching
3. 学会等名 TUNGA (Theory Underlying Algorithms) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Satoru Iwata
2. 発表標題 Mader's Theorem on Edge-disjoint T-paths
3. 学会等名 Cargese Workshop on Combinatorial Optimization (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akiko Takeda
2. 発表標題 Group Lasso for Household Energy Consumption Prediction and Toward Nonconvex Regularizer
3. 学会等名 The PolyU AMA - RIKEN AIP Joint Workshop on Optimization and Machine Learning (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 kiko Takeda, Jun-ya Gotoh, Katsuya Tono
2. 発表標題 Efficient DC algorithm for nonconvex sparse optimization problems
3. 学会等名 International Conference on Optimization: Techniques and Applications (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akiko Takeda
2. 発表標題 Hyperparameter Learning via Bilevel Nonsmooth Optimization
3. 学会等名 The Workshop on Variational Analysis and Stochastic Optimization (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akiko Takeda
2. 発表標題 Nonconvex Quadratic Optimization with One or Two Constraints
3. 学会等名 National Taiwan Normal University (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Nakatsukasa
2. 発表標題 On the roles of eigenvalues in optimization
3. 学会等名 3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoru Iwata
2. 発表標題 Index Reduction via Unimodular Transformation
3. 学会等名 International Symposium on Mathematical Programmig
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuji Nakatsukasa
2. 発表標題 Global optimization via eigenvalues
3. 学会等名 Householder Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yuji Nakatsukasa
2. 発表標題 Global optimization via eigenvalues
3. 学会等名 Theory and Algorithms in Data Science Seminar, Alan Turing Institute (UK) (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akiko Takeda
2. 発表標題 Nonconvex Quadratic Optimization with One or Two Constraints
3. 学会等名 Colloquium at Department of Applied Mathematics, The Hong Kong Polytechnic University (招待講演)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	武田 朗子  (Takeda Akiko)  (80361799)	東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授   (12601)	
研究 分担者	中務 佑治  (Nakatsukasa Yuji)  (10723554)	国立情報学研究所・情報学プリンシプル研究系・准教授   (62615)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
ベルギー	ブルッセル自由大学			
中国	香港理工大学			
英国	オックスフォード大学			