

令和 5 年 10 月 24 日現在

機関番号：34416

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2022

課題番号：18K11185

研究課題名(和文)非線形最適化問題の求解速度の改善：最適解近傍外での数値的性質悪化の回避

研究課題名(英文)Improvement of solving speed for nonlinear optimization problems by avoiding the deterioration of numerical condition outside the neighborhood of a optimal solution

研究代表者

檀 寛成 (Dan, Hiroshige)

関西大学・環境都市工学部・教授

研究者番号：30434822

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、大規模な非線形最適化問題への適用を想定した自動微分ライブラリの実装、ならびに非線形最適化問題求解ライブラリの実装を行った。

一般に、非線形最適化問題の求解に際しては、自動微分を用いて、問題を構成する関数の偏導関数値を計算する。一方、大規模な非線形最適化問題では、問題に現れる関数が添字付けられ、同じ構造を持つことが多い。そこで本研究では、同じ構造を持つ関数を高速に扱うことができる実装を行った。また本研究では、非線形最適化問題を求解するためのライブラリを包括的に実装した。このようなライブラリを整備したことにより、今後新たな求解アルゴリズムの実装に役立てることができるようになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

非線形最適化問題に関する研究は、求解アルゴリズムの大域的な収束性や、最適解近傍での収束速度に関するものなど、理論的なものが多い。しかし本来、非線形最適化問題は、アルゴリズムの理論的な研究と、問題を実際に解くためのソフトウェアの整備が両輪となることで、そのポテンシャルを發揮することができる。

本研究では、非線形最適化問題を求解するためのライブラリを包括的に実装することに焦点を当てた研究を行った。具体的には、求解アルゴリズムそのもの、あるいはその入出力、さらには複数のアルゴリズムで共通する処理を実装した。これにより、実際に非線形最適化を解いたり、新たな求解アルゴリズムの実装に役立てることができる。

研究成果の概要(英文)：In this study, we have implemented an automatic differentiation library for large-scale nonlinear optimization problems and a library for solving nonlinear optimization problems.

In general, when solving nonlinear optimization problems, automatic differentiation is used to compute partial derivative values of the functions that compose the problem. On the other hand, in large-scale nonlinear optimization problems, functions appearing in the problem are often indexed and have the same structure. In this study, we have implemented a library that can handle functions with the same structure in a fast manner.

In addition, we have developed a comprehensive library for solving nonlinear optimization problems. This library can be used to implement new algorithms for solving nonlinear optimization problems in the future.

研究分野：数理最適化

キーワード：非線形最適化問題 最適化ソフトウェア 自動微分 モデリング言語

## 1. 研究開始当初の背景

非線形最適化問題は、工学・自然科学・社会科学などによく現れる問題であり、極めて広い応用を持つ有用性の高い問題クラスである。非線形最適化問題に関する研究は、最適解近傍でのアルゴリズムの収束速度に関するものが主であった。しかし、研究代表者のこれまでの研究により、最適解が速い収束のための仮定を満たしていたとしても、求解中に最適解の近傍外で数値的性質が悪化し、アルゴリズム全体の求解速度が低下する場合があることがわかってきた。

## 2. 研究の目的

上述の背景を受け、本研究課題は、非線形最適化問題において、最適解の近傍外での数値的性質が悪く求解速度が遅い問題に対して、求解速度を向上させるための手法を研究することを目標にスタートした。そのためには、非線形最適化問題を解くためのソフトウェア(ソルバ)を作成する必要があったが、その実装に際して作成した自動微分ライブラリの性能が想定以上によかったことから、申請時点での研究の目的を修正し、以下のことを本研究課題の目的とした。

- (1) 高速な自動微分ライブラリの実装
- (2) 非線形最適化問題求解ライブラリの実装

## 3. 研究の方法

上記 2 つの目的それぞれに対し、研究の方法を説明する。

### (1) 高速な自動微分ライブラリの実装

一般に、非線形最適化問題の求解に際しては、目的関数や制約条件に現れる関数の偏導関数値(勾配)を計算することが必要になる。そのため、非線形最適化ソルバでは、その内部で自動微分が利用されている。

一方、大規模な非線形最適化問題では、問題に現れる変数や制約が添字付けられていることがほとんどである。これは、自動微分のアルゴリズムの内部で作成する計算グラフ(計算の手順をグラフ構造で表したもの)において、同種の構造が大量に発生することを意味する。

そこで本研究では、同種の構造を持つ計算グラフの作成や計算を高速に行うべく、計算グラフ上で同種の構造をまとめて扱うことができる「メタ計算グラフ」という概念を導入し、自動計算ライブラリの実装を行う。

### (2) 非線形最適化問題求解ライブラリの実装

非線形最適化問題を解くためのソルバを実装する際には、求解アルゴリズムが注目されがちだが(もちろんそれも大いに重要だが)、求解アルゴリズムで必要になる情報の入力(変数・パラメータの値、目的関数や制約条件の勾配など)や求解アルゴリズムからの出力(最適解や、最適解における制約条件の値、双対変数の値など)の取り扱いも重要である。また、様々な求解アルゴリズムで共通して必要になる操作(反復点の更新、最適性の条件のチェックなど)も多い。

そこで本研究では、非線形最適化問題を求解するためのライブラリを包括的に実装する。具体的には、求解アルゴリズムそのもの、あるいはその入出力、さらには複数のアルゴリズムで共通する処理を実装する。このような求解ライブラリを整備しておくことにより、今後新たな求解アルゴリズムの実装に役立てることができる。

## 4. 研究成果

### (1) 高速な自動微分ライブラリの実装

#### (1-成果 A) 大規模非線形最適化問題での利用を想定した、高速な自動微分ライブラリの実装

上述のように、「メタ計算グラフ」という概念に基づいた自動微分ライブラリ NOA\_ad を実装した。実装には C/C++ を用いた。これにより、変数や制約条件が添字付けられた、大規模な非線形最適化問題の目的関数や制約条件に現れる関数の偏導関数値(勾配)を高速に計算することが可能となった。

性能評価のために、以下のソフトウェアと計算時間の比較を行った。

- ・ADOL-C: 定評のある自動微分ライブラリ(C/C++ で実装)
- ・PyTorch: 自動微分を備えている機械学習ライブラリ(Python で実装)
- ・ReverseDiff: 近年注目されている科学技術計算言語 Julia で実装されている自動微分ライブラリ

ここでは、ベンチマーク問題集 CUTEr にある最適化問題から、問題 aug2d, mancino の目的関数・制約条件に現れる関数（図 1）の勾配を計算する時間を求めた結果を示す（図 2, 3. 横軸：問題サイズ、縦軸：計算時間）. 本研究で開発した NOA\_ad は、ADOL-C と遜色ない速度で勾配が計算できていることがわかった. また多言語で実装されている自動微分ライブラリより高速に計算ができていることが確認できた.

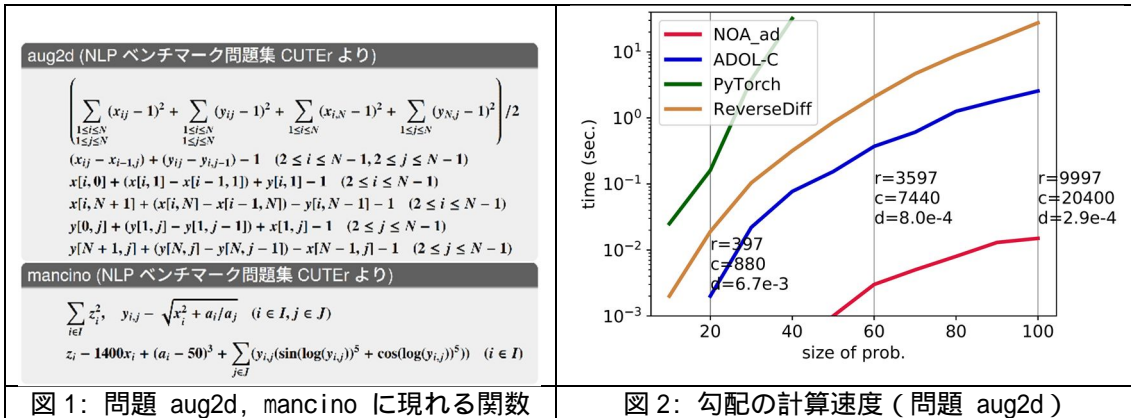


図 1: 問題 aug2d, mancino に現れる関数

図 2: 勾配の計算速度 (問題 aug2d)

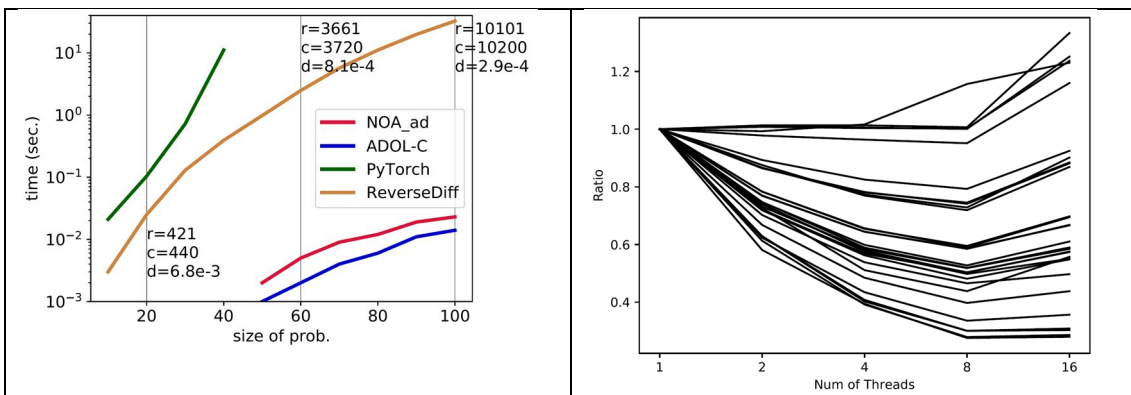


図 3: 勾配の計算速度 (mancino)

図 4: 並列計算でのスレッド数と計算速度

(図 2, 3 内の表記 ... r: 式の数, c: 変数の数, d: ヤコビアンにおける非ゼロ要素の密度)

### (1-成果 B) 並列計算の導入効果の検証

計算グラフの形によっては、勾配の計算が並列に実行可能なケースがある. そこで、並列計算を可能にする OpenMP を用いて、NOA\_ad に並列計算を導入した場合の効果の検証を行った.

図 4 は、ベンチマーク問題集 COCONUT Benchmark のうち 29 題の目的関数・制約条件に現れる関数の勾配を計算した結果である (横軸：並列スレッド数、縦軸：スレッド数 1 の場合の計算時間を 1 とした場合の比の値). 多くの問題例で並列化の効果があるが、関数の数が少ないケースでは効果がない、もしくは悪影響があることがわかった. またスレッド数を増やすぎると、オーバーヘッドが大きく、計算時間が遅くなることが確認できた.

### (2) 非線形最適化問題求解ライブラリの実装

#### (2-成果 A) 非線形最適化問題の求解に広く利用できるライブラリの実装

上で述べたように、非線形最適化問題の求解に際しては、求解アルゴリズムの入出力を扱う処理や、アルゴリズムによらず共通して利用可能な処理がある. 本研究では、これらを再利用可能な形で実装した. 具体的には、以下のライブラリを実装した.

- ・NOA\_ml: 問題を入力するためのモデリング言語を処理するライブラリ (広く使われているモデリング言語 AMPL のサブセットを処理可能)
- ・NOA\_base: 本研究で実装しているソフトウェア群 NOA の基本ライブラリ (任意精度計算用のプログラムを含む)
- ・NOA\_nlpbase: 非線形最適化問題求解時に使うことのできるライブラリ (自動微分ライブラリとのやりとり、最適性の条件のチェック、ステップサイズルール等を含む)

#### (2-成果 B) 内点法に基づく最適化ソルバの実装

非線形最適化問題の有力な求解アルゴリズムとして、内点法が挙げられる. 本研究では、目的関数や制約条件に現れる関数の、「1 階微分を必要とする内点法」と「2 階微分を必要とする内

点法」を実装した。前者は準ニュートン法に基づく内点法であり、後者は、ニュートン法と信頼領域法を組合せた内点法である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 檀 寛成, 楠木 祥文
2. 発表標題 非線形最適化用ライブラリの整備
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2022 年春季研究発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 檀 寛成, 野口 将嗣
2. 発表標題 OpenMP による自動微分ソフトウェアの高速化
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2021 年春季研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiroshige Dan, Koei Sakiyama
2. 発表標題 Automatic Differentiation Software for Large-scale Nonlinear Optimization Problems
3. 学会等名 International Conference on Continuous Optimization of the Mathematical Optimization Society (ICCOPT2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 崎山 皓瑛, 檀 寛成
2. 発表標題 非線形最適化問題に対する任意精度計算可能な内点法の性能評価
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2019 年秋季研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koei Sakiyama, Masashi Noguchi, Hiroshige Dan
2. 発表標題 Implementation of Interior Point Method for Nonlinear Optimization Problems with Arbitrary Precision Arithmetic
3. 学会等名 The 2019 INFORMS Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroshige Dan, Masashi Noguchi, Koei Sakiyama
2. 発表標題 Automatic Differentiation Software for Indexed Optimization Problems
3. 学会等名 The 23rd International Symposium on Mathematical Programming (ISMP2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masashi Noguchi, Hiroshige Dan
2. 発表標題 Implementation of Automatic Differentiation Program for Indexed Nonlinear Optimization Problems
3. 学会等名 The 13th International Symposium in Science & Technology at Cheng Shiu University 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 野口 将嗣, 檀 寛成
2. 発表標題 自動微分ソフトウェアの API 整備と性能調査
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2018 年秋季研究発表会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 野口 将嗣, 檀 寛成
2. 発表標題 自動微分ソフトウェアの機能追加と性能比較
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2019 年春季研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 崎山 皓瑛, 野口 将嗣, 檀 寛成
2. 発表標題 非線形最適化問題に対する任意精度計算可能な内点法の実装
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2019 年春季研究発表会
4. 発表年 2019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
研究協力者	楠木 祥文  (Kusunoki Yoshifumi)  (30588322)	大阪公立大学・大学院情報学研究科・講師    (24405)	

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
---------	---------