様式Ｃ－１９

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成　25 年　6 月　5 日現在

機関番号：14301
研究種目：基盤研究(C)
研究期間：平成２０年度　～　平成２４年度
課題番号：20560056
研究課題名（和文）
正定値行補完を用いた準ニュートン法の実用化に関する研究
研究課題名（英文）
Implementations of the quasi-Newton method with positive definite matrix completion

研究代表者
山下信雄（YAMASHITA NOBUO）
京都大学・大学院情報学研究科・准教授
研究者番号：30293898

研究成果の概要（和文）：
制約なし最小化問題に対する正定値行列補完を用いた準ニュートン法(MCQN 法)の特性を理論的，数値的に解明した．その特性を考慮して，MCQN 法と従来の L-BFGS 法を組み合わせた手法を提案し，それを実装した．

研究成果の概要（英文）：
We showed theoretical and numerical properties of the quasi-Newton method with positive definite matrix completion (MCQN) for the unconstrained minimization problem. Taking into account of the properties, we proposed a hybrid method of MCQN and L-BFGS, and implement it for practical use.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
20 年度	800000	240000	1040000
21 年度	500000	150000	650000
22 年度	500000	150000	650000
23 年度	900000	270000	1170000
24 年度	800000	240000	1040000
総　計	3500000	1050000	4550000

研究分野：工学
科研費の分科・細目：工学基礎
キーワード：数理工学，数理最適化

１．研究開始当初の背景
数理最適化の基本的な問題のひとつに制約なし最小化問題がある．制約なし最小化問題は，エネルギー最適化，ビッグデータサイエンスなどにも表れる重要な問題である．準ニュートン法はこの問題に対する代表的な解法である．準ニュートン法は，目的関数の近似ヘッセ行列を用いて探索方向を求める反復法である．計算しやすい近似ヘッセ行列を用いることから，真のヘッセ行列を用いるニュートン法と比べて実装しやすく，中小規模の問題に対しては幅広く用いられている．しかしながら，準ニュートン法には大規模な問題には適用できないという欠点があった．これは，近似ヘッセ行列が密な行列となるため，数万を超える問題に対しては，その行列を含む演算に莫大なメモリーと計算時間がかかるためである．そのような欠点を克服する手法として，L-BFGS 法がある．これは近似ヘッセ行列を数本のベクトルで構成する手法

であり，各反復の計算の手間が少ないため，様々な分野で利用されている．しかしながら，L-BFGS 法は問題個々の特性を利用していないため，その収束率は高々１次であり，超一次収束などの速い収束は期待できない．そこで，研究代表者は，問題の特性のひとつであるヘッセ行列のスパース性を利用することができる，正定値行列補完を用いた準ニュートン法(以下, MCQN 法)を提案した．これは，まず真のヘッセ行列の非ゼロ要素に対応した成分を従来の準ニュートン更新(DFP 法や BFGS 法)で求め, その他の成分は正定値行列補完によって計算するという手法である．研究代表者は, DFP 法を更新に用いた特別な場合において，MCQN 法が超一次収束することを証明した．しかし，DFP 法は BFGS 法と比べて理論的にも数値的にもよくないこと知られている．そのため，BFGS 法を用いた MCQN 法の収束性の理論的な解明が求められていた．さらに，MCQN 法の数値的な振る舞いが未解明であった．

２．研究の目的

正定値行列補完を用いた準ニュートン法(MCQN 法)に対して理論的な性質を解明する．特に，BFGS 法を用いた場合に，超一次収束するための条件を与える．さらに，数値実験を通して，MCQN 法の数値的な振る舞いを解明し，実用に耐えうる技術を開発する．また，プログラムコードを HP 等で公開し，開発した手法の利用促進をはかる．さらに，より大規模な問題や最小二乗問題などの特別な問題へ適用するために，L-BFGS 法，正則化ニュートン法，座標降下法，Levenberg-Marquardt 法と組み合わせた手法を考案する．

３．研究の方法

(1)超一次収束性の証明

DFP 法を用いた MCQN 法に対しては超一次収束性が証明されていたので，それを一般化することで，より高速な BFGS 法を用いた MCQN 法の超一次収束性を証明する．この証明には，正定値行列に対する対数障壁関数を用いる．

(2)大域的収束性の証明

MCQN 法においては，局所的な収束性しか解明していなかったので，大域的に収束するための条件を調べる．特に決定変数が少ない場合，目的関数が強凸の場合など，限定した状況から考察し，可能であればより一般的な状況に対しての証明を与える．

(3)数値的振る舞いの解明

提案手法を MATLAB 上で実装し，制約なし最小化問題のテスト問題集 CUTEr を解くことによって，提案手法の得手不得手な問題を考察する．

(4) 既存の技術と組み合わせ

提案手法の数値的な振る舞いから考察された欠点を克服するため，他の最適化技術との組み合わせを考える．

① L-BFGS 法との組み合わせ
L-BFGS 法で十分な問題には L-BFGS 法を適用すればよい．MCQN 法との得意不得意を考えて，問題に応じて適用する手法を選ぶ工夫を考える．

② 正則化ニュートン法との組み合わせ
準ニュートン法は基本的には探索方向を決めた後にステップ幅を定める直線探索法である．しかし，信頼領域法のように探索方向の長さを調節する方が速く収束するような問題例がある．そこで，正則化パラメータ（探索方向の長さに対応）を調節する正則化ニュートン法を考え，その手法と MCQN 法を組み合わせることを考える．

③ Lebenberg-Marquardt 法との組み合わせ
最小二乗問題は，制約なし最小化問題の特別な場合である．その問題特性を利用した手法を考える．

④ 座標降下法との組み合わせ
決定変数の数は数百万を超えるような場合，勾配を計算するだけでも莫大な計算時間がかかることがある．そのようなときは，各反復で一部の決定変数を更新する座標降下法が用いられる．この座標降下法と準ニュートン法を組み合わせることを考える．

４．研究成果

(1)　超一次収束性の解明

BFGS 法(を含む Broyden family)を用いた MCQN 法が超一次収束するための条件を与えた．これは，DFP 法を用いた MCQN 法が超一次収束するための条件と同等のものである．

(2)　限定的な状況での大域的収束性

BFGS 法と組み合わせた MCQN 法が，強凸な目的関数をもつ制約なし最小化問題に対して，大域的収束することを証明した．ただし，これは決定変数が２つの特別な場合においての成果である．

(3)　CUTE r に対する数値実験結果

CUTEr に含まれる数十のテスト問題に対して数値実験を行い，MCQN 法の数値的な振る舞いを解明した．特に，初期の近似ヘッセ行列を適切に選ばない場合，問題によっては，L-BFGS 法など，既存の手法と比べて，著しく

収束が遅くなることが判明した．この原因は，MCQN 法における近似ヘッセ行列の更新量が非ゼロ要素の割合に比例するためである．一方，条件数などが悪い問題に対しては，初期の近似ヘッセ行列を適切に選べば，L-BFGS 法と比べて，桁違いに速く最適解が求まることがわかった．

(4)　L-BFGS 法との組み合わせ手法の開発

(3)の項目において判明した MCQN 法の欠点，つまり近似ヘッセ行列を適切に選ばなければ収束が遅くなるという欠点を克服するために，反復の初期段階では L-BFGS 法を適用して近似ヘッセ行列を求め，その後，MCQN 法を実施するという２段階法を開発した．数値実験を通して，開発手法が，単に MCQN 法や L-BFGS 法を実施する場合に比べて，高速に最適解を求めることができることがわかった．

(5) その他の手法の開発

MCQN 法と組み合わせて適用することができる技術をいくつか開発した．

① 正則化ニュートン法

正則化パラメータを調整することにより，直線探索を用いないでも大域的収束するニュートン法を考え，この手法の計算量の見積もりを与えた．また，真のヘッセ行列を用いた場合の数値実験を行い，直線探索を行う場合と比べて，良い結果を得た．ただし，ヘッセ行列が正定値でないときには，最小固有値を計算しなければならないため，その計算コストによっては効率が悪くなることがある．一方，正定値となる近似ヘッセ行列を生成する MCQN 法では，最小固有値を計算する必要がないため，MCQN 法にこの正則化法を組み合わせることは有効であると考えられる．

② Levenberg-Marquardt 法

最小二乗問題を解くための Levenberg-Marquardt 法に対しても，正則化パラメータを調整することによって，大域的収束するアルゴリズムを与えた．この手法と MCQN 法を組み合わせるためには，非線形方程式に対する MCQN 法を考える必要がある．これは今後の課題である．

③ 座標降下法

近似ヘッセ行列などを用いた一般的な枠組みの座標降下法を考え，その大域的収束性，１次収束性を証明した．ただし，数値実験をしていないため，その有効性を確かめることが今後の課題となる．

５．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計６件）

① Kenji Ueda and <u>Nobuo Yamashita</u>, Global Complexity Bound Analysis of the Levenberg-Marquardt Method for Nonsmooth Equations and its Application to the Nonlinear Complementarity Problem, 査読有，Journal of Optimization Theory and Applications, Vol. 152, pp.450-467, 2012.

② Y.-H.Dai and <u>N. Yamashita,</u> Convergence Analysis of Sparse Quasi-Newton Updates with Positive Definite Matrix Completion for Two-Dimensional Functions, 査読有，Numerical Analysis, Control and Optimization, Vol. 1, pp. 61-69, 2011.

③ J. Takaki and <u>N. Yamashita</u>, A Derivative Free Trust Region Algorithm for Unconstained Optimization with Controlled Error, 査読有，Numerical Analysis, Control and Optimization, Vol. 1, pp. 117-145, 2011.

④ K. Ueda and <u>N. Yamashita</u>, Convergence Properties of the Regularized Newton Method for the Unconstrained Nonconvex Optimization, 査読有，Applied Mathematics & Optimization, Vol. 62, pp. 27-46, 2010.

⑤ K. Ueda and <u>N. Yamashita</u>, “On a Global Complexity Bound of the Levenberg Marquardt Method”，査読有，Journal of Optimization Theory and Applications, Vol. 147, pp. 443-453, 2010.

⑥ T.Seki, N. Yamashita, K. Kawamoto, "New Local Search Methods for Improving the Lagrangian Relaxation Based Unit Commitment Solution", 査読有, IEEE transaction on Power System, Vol. 25, pp. 272-283, 2010.

〔学会発表〕(計３件)

① Xiaqin Hua and Nobuo Yamashita,
An Inexact Coordinate Descent Method for the Weighted L1-regularized Convex Optimization Problem,
The 5th International Conference on Optimization and Control with Applications, Beijing, China, 2012.

① 山下信雄, 上田健詞,
リプシッツ連続性に基づく勾配法, ニュートン型手法の計算量解析,RAMP シンポジウム, 関西大学, 2011.

② 山下信雄, 大規模凸計画に対する勾配法, 情報論的学習理論(ISBIS)ワークショップ, 奈良女子大, 2011.

〔図書〕(計０件)

〔産業財産権〕
○出願状況（計 0 件）

〔その他〕
ホームページ等
http://www-optima.amp.i.kyoto-u.ac.jp/~nobuo/MLBFGS/MLBFGS.html
LBFGS 法と MCQN 法のハイブリッド法の MATLAB コード

６．研究組織
(1)研究代表者
山下信雄（YAMASHITA NOBUO）
京都大学・大学院情報学研究科・准教授
研究者番号：30293898