

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 5 月 24 日現在

機関番号：12102

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2010～2012

課題番号：22651057

研究課題名（和文） 実質的にすべての非線形最適化問題を解決する確定的アルゴリズムの開発

研究課題名（英文） Developing deterministic algorithms for solving virtually all nonlinear optimization problems

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

研究成果の概要（和文）：強力なソルバーの普及により，様々な大規模最適化問題が短時間で解けるようになった。しかし，非線形最適化問題に関しては，特に凸性が仮定されない場合，この恩恵に浴しているとはいえない。この研究では，ほとんどすべての非線形最適化問題が凸集合上で凹関数を最小化する問題のクラスに帰着されることに着目し，このクラスの問題を解くためのいくつかの確定的アルゴリズムを開発した。それらのいずれもが最適解に収束することを理論的に証明し，さらにコンピュータ上でも現実的な時間で終了することを確認した。

研究成果の概要（英文）：Due to powerful solvers, a variety of large-scale optimization problems can be solved in a small amount of time. Nonlinear optimization problems are, however, excluded from this benefit, especially when the convexity is not assumed. In this research, we paid attention to the fact that almost all nonlinear optimization problems can be formulated into a class of problems of minimizing a concave function over a convex set, and developed some deterministic algorithms for solving it. We verified that each of them converges in theory to an optimal solution, and that it actually terminates in a practical amount of time on a computer.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,000,000	0	1,000,000
2011年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2012年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総計	3,000,000	600,000	3,600,000

研究分野：数理最適化

科研費の分科・細目：社会・安全システム科学・社会システム工学・安全システム

キーワード：数理最適化，アルゴリズム，非線形計画問題，大域的最適化

1. 研究開始当初の背景

かつては夢想もできなかった計算環境の高性能化に伴い，最適化アルゴリズムは飛躍的な発展を遂げ，今や平均・分散なみに様々な分野で日常的に使われるようになった。しかし，注意したいのは，これまでのアルゴリズム開発が専ら「素直な」問題に対する先行

技術の洗練に主眼を置いてきた点で，「手に負えない」問題は放置されたままといつて過言でない。

「素直な」問題と「手に負えない」問題を峻別する理論的な拠り所は時間計算量である。この解析は前者の問題クラス P に対して驚くほど便利で，時間計算量さえわかれば大

規模な問題例を実際に解くまでもなく、必要な計算時間をほぼ正確に予測することができる。ところが、「手に負えない」クラスのNP困難な問題に対しては、あまりにも悲観的な計算時間が予測されるだけで、予測的中する問題例が無視しうるほど少なく、そのほとんどが素直に解けてしまうことすら稀でない。本研究の対象である非線形最適化問題も「手に負えない」NP困難なクラスに属するが、ランダムに生成した問題例を既存のアルゴリズムで処理した場合、絶望的な計算時間がかかるのは10題中わずか1、2題のことに過ぎない。

さて、このような特徴をもつ「手に負えない」非線形最適化問題を解くため、これまでに用いられてきたアプローチは2つある。1つは、個々の問題例ごとに「素直な」特殊構造を見つけ、それを利用したテーラーメイドのアルゴリズムを設計する方法である。1990年代から研究代表者や Konno, Tuy, Bensonらは、この方法で各種の非線形最適化の問題例に対して経験的に効率のよいアルゴリズムを開発している。もう1つの方法は、実時間性の高い発見的アルゴリズムの利用で、最適化を実務に応用する現場では広く行なわれているが、残念ながら得られる解に最適性の保証はもちろん、精度の保証すら期待できない。

2. 研究の目的

本研究が非線形最適化問題に対して用いるアプローチは、問題例の構造に依存しない汎用の厳密なアルゴリズムによるもので、このアルゴリズムに用いる主なサブルーチンは列挙と局所探索の2つである。非線形最適化問題の大域的最適解は、局所解のいずれかであるので、その数が問題サイズの指数オーダーに達したとしても、結局のところ局所解をすべて列挙してしまえば必ず求めることができる。時間計算量の観点からは極めて愚直な方法であるが、前述したように多くの問題例が列挙法によって妥当な計算時間のうちに解けてしまう可能性は高い。しかも計算環境の飛躍的な性能向上により、単純な実装でもかなりの効果を期待することができる。本研究では、列挙と局所探索を精緻に実装し、実質的にすべての非線形最適化問題の現実的な解決にチャレンジする。開発するアルゴリズムは、局所最適解の中から大域的に最適なものを所与の精度で有限時間のうちに生成するだけでなく、必要な空間計算量をできるだけ小さく抑えることを最大の特徴としている。

3. 研究の方法

大域的最適化に関するこれまでの研究から、2階連続微分可能な関数は2つの凸関数

の差として表せることが知られている。このことは、実質的にすべての非線形最適化問題が次の凹最小化問題を解くことによって解決できることを意味している：

$$(P) \quad \begin{cases} \text{最小化 } f(x) \\ \text{条件 } x \in D. \end{cases}$$

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 A とベクトル 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：

$$D = \{x \in \mathbb{R}^n | Ax \leq b\}.$$

問題(P)を解くためのアルゴリズムとして、単体分割法と錐分割法の2種類の列挙法を主に構築したが、以下では錐分割法のメカニズムを紹介する。

(1) D. c. 実行可能性問題

関数 f の実数 α に対する上位レベル集合を

$$C(\alpha) = \{x \in \mathbb{R}^n | f(x) \geq \alpha\}$$

と表すことにする。D. c. (difference of two convex set) 実行可能性問題とは、所与の許容誤差 $\varepsilon \geq 0$ に対して次のように記述される：

(DC): 点 $x \in D \setminus C(\alpha)$ があればそれを求め、なければ $D \subset C(\alpha - \varepsilon)$ であることを示せ。

凹最小化問題(P)の大域的最適解 x^* は、次のような二段階法により、(DC)を繰り返し解くことによって誤差 ε の精度で求めることができる：

問題(P)の初期実行可能解を $z^1 \in D$ とし、 $i \leftarrow 1$ とする。

[第1段階] z^i から出発し、 D の端点から f の極小点 x^i を見つける。 $(f(x^i) \leq f(z^i))$ が成り立ち、 x^i に隣接するすべての頂点 x に対しても $f(x^i) \leq f(x)$ が成り立つ。

[第2段階] 問題(DC)を $\alpha = f(x^i)$ に対して解く。もしも $D \subset C(\alpha - \varepsilon)$ ならば、 $x^* \leftarrow x^i$ として終了。そうでなければ、 $f(z) < f(x^i)$ を満たす実行可能解 $z \in D$ が得られるので、 $z^{i+1} \leftarrow z$ 、 $i \leftarrow i + 1$ として第1段階へ。

2つの段階を繰り返すことで $f(x^{i+1}) < f(x^i)$ を満たす端点列 $\{x^i\}$ が生成されるが、多面体の端点は有限個なので、この方法も有限回の繰り返しで終了する。

(2) 錐分割法

上述の二段階法で、 $\gamma = \alpha - \varepsilon$ に対して $f(v) > \gamma$ を満たす D の端点 v を見つけることは難しくない。凸多面体 D を定義するシステムが、 $x = v$ において次のように分割されるものとしよう：

$$Bv = b_B, \quad Nv < b_N.$$

ここで

$$A = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Bx \leq b_B\}$$

$$M = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Nx \leq b_N\}$$

と定義すれば

$$D = M \cap A$$

が成り立ち、端点 v の非退化を仮定すれば v は M の内点になる．説明を簡単にするため、 $v = \mathbf{0}$ としよう．錐 M の方向ベクトル d_1, \dots, d_n に対して

$$q_j = \text{ext}(d_j) \equiv \theta_j d_j, \quad j = 1, \dots, n,$$

を d_j の γ 拡張といい、 θ_j は以下で与えられる：

$$\theta_j = \sup\{\theta \mid f(\theta d_j) \geq \gamma\}.$$

この γ 拡張を用いれば、

$$Q = [q_1, \dots, q_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

として A を次のように表すことができる：

$$A = \text{con}(Q)$$

$$\equiv \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = \sum_{j=1}^n q_j \lambda_j, \lambda \geq \mathbf{0}\}.$$

ベクトル q_j は線形独立であり、 Q が正則なので、次の半空間 G は一意に定まる：

$$G = \{x \in \mathbb{R}^n \mid eQ^{-1}x \leq 1\}.$$

また、 $G \cap A$ は単体で、その端点 q_j 、 $\mathbf{0}$ はすべて凸集合 $C(\gamma)$ に含まれるので、次の包含関係が成立する：

$$G \cap A \subset C(\gamma).$$

したがって、 $M \cap A$ が G の部分集合ならば

$$D = M \cap A \subset G \cap A \subset C(\gamma) = C(\alpha - \varepsilon)$$

が成り立ち、(DC)は解けたと結論できる．以上の操作を限定操作とよぶ．

もしも $M \cap A$ が G の部分集合でなければ点 $x \in D \setminus C(\alpha)$ が見つかるか、あるいは A を分割して再調査する必要がある．後者の場合、 $A \setminus \{\mathbf{0}\}$ から適当な方向ベクトル u を選択し、 $u = \sum_{j=1}^n \lambda_j q_j$ を満たす $\lambda \geq \mathbf{0}$ に対して $J = \{j \mid \lambda_j > 0\}$ とすれば、 A は $|J|$ 個の錐

$$A^j = \text{con}(Q^j), \quad j \in J,$$

に分割され、 Q^j は以下で与えられる：

$$Q^j = [q_1, \dots, q_{j-1}, \text{ext}(u), q_{j+1}, \dots, q_n].$$

この結果、

$$\text{int}(A^i) \cap \text{int}(A^j) = \emptyset, \quad i \neq j$$

$$A = \cup_{j \in J} A^j$$

が成り立つが、この操作を分枝操作とよぶ．こうして錐 A から生成される各 A^j に対し、再び限定操作と分枝操作を実行する．

4. 研究成果

錐分割法が有限回で終了しなければ、次の

ような入れ子状の錐列が生成される：

$$A = A_1 \supset \dots \supset A_k \supset A_{k+1} \supset \dots$$

ここで、 A_{k+1} は A_k を u^k の方向に沿って分割して得られたものとする．各 k に対して A^k は正則行列 Q_k によって

$$A_k = \text{con}(Q_k)$$

のように張られる錐で、 Q_k の各列 q_j^k は $C(\gamma)$ の境界上の点である．前節で述べた通り、

$$G_k = \{x \in \mathbb{R}^n \mid eQ_k^{-1}x \leq 1\}$$

に対して $M \cap A_k \subset G_k$ ならば $M \cap A_k \subset C(\gamma)$ が成り立つ．その結果、錐 A^k に(DC)の解は含まれないことが分かって以降の調査対象から A^k を除外できる．この限定操作は、次の補助問題を解くことによって実行できる：

$$(P_k) \quad \begin{cases} \text{最大化} & eQ_k^{-1}x \\ \text{条件} & x \in M \cap A_k. \end{cases}$$

問題 (P_k) の最適解 ω^k は、等価な線形計画問題：

$$(PL) \quad \begin{cases} \text{最大化} & e\lambda \\ \text{条件} & NQ_k\lambda \leq b_N, \lambda \geq \mathbf{0} \end{cases}$$

を解くことで、その最適解 λ^k から $\omega^k = Q_k\lambda^k$ のように与えられる．この λ^k から次の集合を定義する：

$$A_k^+ = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x = \sum_{j \in J_k} q_j^k \lambda_j, \lambda \geq \mathbf{0}\}$$

$$J_k = \{j \mid \lambda_j^k > 0\}.$$

また、 u^k 方向の射線と G_k の境界との交点を y^k で表すことにする．

(1) 研究の主な成果

① ω 細分規則に基づく錐分割法の収束性
問題(PL)の双対問題は

$$(DL) \quad \begin{cases} \text{最小化} & \mu b_N \\ \text{条件} & \mu NQ_k \geq e, \mu \geq \mathbf{0} \end{cases}$$

であるが、この問題の最適解 μ^k に対して

$$\|\mu^k N\| \leq L, \quad k = 1, 2, \dots,$$

を満たす定数 L が存在する．このことを用いて次の定理を証明することができる：

定理 1. 錐列 $\{A_k\}$ では、 $u^k \in A_k^+$ に沿って A_k を分割し、 A_{k+1} が得られているものとする．このとき、次の等式が成り立つ：

$$\liminf_{k \rightarrow +\infty} \|\text{ext}(u^k) - y^k\| = 0.$$

□

明らかに $\omega^k \in A_k^+$ であるので、通常の ω 細分規則に基づく錐分割法の収束は定理 1 の系として導かれる：

系 2. 錐列 $\{A_k\}$ では、 $u^k = \omega^k$ に沿って A_k を分割し、 A_{k+1} が得られているものとする．このとき、 $\{y^k\}$ には $f(y^0) = \gamma$ を満たす集積点

$y^0 \in C(\gamma)$ が存在する。 □

② ω 二分に基づく錐分割法の提案

錐 Λ_k の分割を $u^k = \omega^k$ に沿って行う ω 細分規則に従えば、最悪の場合、 Λ_k は n 個もの錐に分割されるため、アルゴリズムの収束前に組合せ的な爆発が起こり、問題(DC)が正しく解けない可能性がある。そこで、関数 f が狭義凹関数であることを仮定し、新たな錐分割規則を提案する。

集合 J_k に含まれる任意の添字対 $\{i, j\}$ に対し、

$$y_{ij}^k = (\lambda_i^k q_i^k + \lambda_j^k q_j^k) / (\lambda_i^k + \lambda_j^k)$$

とし、線分 $[q_i^k, y_{ij}^k]$ と $[y_{ij}^k, q_j^k]$ の短い方の長さ

$$\delta_{ij}^k = \|q_i^k - q_j^k\| \min\{\lambda_i^k, \lambda_j^k\} / (\lambda_i^k + \lambda_j^k)$$

を求める。錐 Λ_k の分割方向 u^k は、 y_{ij}^k の中で δ_{ij}^k が最大のもの、つまり

$$\{s, t\} \in \arg \max\{\delta_{ij}^k \mid \{i, j\} \in J_k\}$$

によって定まる y_{st}^k を用いる。実際に $u^k = y_{st}^k$ に沿って Λ_k を分割すると

$$\Lambda_k^j = \text{con}(Q_k^j), \quad j = s, t,$$

の2つに分割され、行列 Q_k^j は以下で与えられる：

$$Q_k^j = [q_1^k, \dots, q_{j-1}^k, \text{ext}(y_{st}^k), q_{j+1}^k, \dots, q_n^k].$$

この ω 二分規則に従う錐分割法の収束性は、いくつかの補題を用いて以下のように示すことができる：

定理 3. 許容誤差を $\varepsilon = 0$ とする。このとき、 ω 二分規則に従う錐分割法が終了すれば、点 $z \in D \setminus C(\alpha)$ が生成されるか、 $D \subset C(\alpha - \varepsilon)$ であることが示される。終了しなければ、点列 $\{\omega^k\}$ には $f(\omega^0) = \alpha$ を満たす集積点 $\omega^0 \in D$ が存在する。 □

系 4. 許容誤差が $\varepsilon > 0$ ならば、 ω 二分規則に従う錐分割法は有限回の反復で終了し、点 $z \in D \setminus C(\alpha)$ が生成されるか、 $D \subset C(\alpha - \varepsilon)$ であることが示される。 □

(2) 成果の位置づけとインパクト

錐分割規則として ω 細分を用いたときのアルゴリズムの収束性は、98年に Jaumard と Meyer, 99年には Locatelli によって証明されている。したがって、(1)の①に紹介した結果は決して新しいものではない。Jaumard と Meyer, Locatelli よりも10年ほど前に Tuy は、任意の k に対して (P_k) の収益ベクトル eQ_k^{-1} のノルムを上から抑える定数が存在すれば錐分割法が収束することを証明している。Tuy は、この条件を満たす錐列 $\{\Lambda_k\}$ を非退化列と名づけたが、残念ながら ω 細分規則によって生成される $\{\Lambda_k\}$ が非退化かどうかは未だ解決されていない課題である。本研究では、 (P_k) が問題

$$\begin{array}{|l} \text{最大化 } \mu^k N x \\ \text{条件 } x \in M \cap \Lambda_k \end{array}$$

に等価なこと、この収益ベクトル $\mu^k N$ のノルムを上から抑える定数が存在することを証明し、 $\{\Lambda_k\}$ が非退化性に準ずる性質を満たすことを明らかにした。さらに、この準非退化性から錐分割法が ω 細分よりも緩やかな条件のもとでも収束することも示した。これは、未解決な課題を含む Tuy の証明を完全なものに修正する結果であり、 ω 細分の拡張の可能性まで示唆している。実際、(1)の②で説明した ω 二分は拡張の具体例となっている。収束が保証される錐分割規則は、これまで ω 細分と単純な二等分しか知られていなかった。したがって、 ω 二分が新たに収束分割規則に加えられたことは学術的に大きな意義がある。また、 ω 細分と違って1回の分枝操作で2つの錐しか生成されないため、空間計算量で ω 細分にまさるだけでなく、 ω^k の情報を錐分割に活用できるため、単純な二等分よりもはるかに優れた計算効率を実現されることも計算実験から明らかになっている。

(3) 今後の展望

本研究では、ここまで説明した錐分割法のほか、単体分割法でも凹最小化問題(P)の大域的最適解の生成を試み、錐分割法と同様な結果を導いている。しかし、錐分割法の場合と違って、生成される解 x^* が所与の許容誤差 $\sigma > 0$ に対して

$$Ax^* \leq b + \sigma e$$

を満たすことだけが保証される σ 実行可能解にすぎないという弱点を有している。これを改善し、真の実行可能解が生成されるようにすることが近々の課題である。また、この研究で提案した ω 二分と従来の ω 細分を補間する収束分割規則に関してもアイデアがあり、錐分割法、単体分割法への実装の準備を現在進めている。

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9件)

- ① Kuno, T., and T. Ishihama, “A Convergent conical algorithm with ω -bisection for concave minimization”, 筑波大学大学院システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻テクニカルレポート, 査読無, CS-TR-13-20, 2013, pp. 1-22.
- ② Kuno, T., and T. Masaki, “A practical but rigorous approach to sum-of-ratios optimization in geometric applications”, Computer Optimization

and Applications, 査読有, Vol. 54, 2013, pp. 93-109.

- ③ Kuno, T., and P. E. K. Buckland, “A convergent simplicial algorithm with ω -subdivision and ω -bisection strategies”, Journal of Global Optimization, 査読有, Vol. 52, 2012, pp. 371-390.
- ④ Ishihama, T., and T. Kuno, “On subdivision strategies in the conical algorithm for concave minimization”, 数理解析研究所講究録, 査読無, Vol. 1773, 2012, pp. 177-185.
- ⑤ Masaki, T., and T. Kuno, “Faster algorithm for computer vision”, 数理解析研究所講究録, 査読無, Vol. 1773, 2012, pp. 68-76.
- ⑥ Kuno, T., “Global optimization in computer vision”, 数理解析研究所講究録, 査読無, Vol. 1726, 2011, pp. 112-122.
- ⑦ 木幡周治, 久野誉人, 徳永隆治, 長野寛, 「ポリゴン情報の最小トライアングルストリップ化」, 数理解析研究所講究録, 査読無, Vol. 1676, 2010, pp. 209-222.
- ⑧ Kuno, T., “Linear optimization over efficient sets”, 数理解析研究所講究録, 査読無, Vol. 1676, 2010, pp. 230-237.
- ⑨ Buckland, P. K., T. Kuno, and I. Tsushima, “A rectangular branch-and-bound algorithm for solving a monotonic optimization”, 数理解析研究所講究録, 査読無, Vol. 1676, 2010, pp. 223-229.

[学会発表] (計 2 件)

- ① Kuno, T., and T. Ishihama, “A class of convergent subdivision strategies in the conical algorithm for concave minimization”, 21st ISMP, August 20, 2012, Berlin, Germany.
- ② Kuno, T., and Y. Zheng, “A branch-and-bound algorithm for a class of computer vision problems”, INFORMS 2010 Annual Meeting, December 8, 2010, Austin, USA.

[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