2版

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　４ 年　６ 月 ２４ 日現在

機関番号：１２１０２
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2019～2021
課題番号：１９Ｋ１１８３７
研究課題名（和文）DC/DM大域的最適化のための実用的なアルゴリズムの構築

研究課題名（英文）Construction of practical algorithms for DC/DM 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）　3,300,000円

研究成果の概要（和文）：すべての２回連続微分可能な関数は２つの凸関数の差，つまりDC関数として表すことが可能であり，しかもその一方の凸関数は１変数関数の和にできることが知られている． こうした特殊構造を持つDC関数が、分離可能な非凸最適化のための矩形分枝限定法を用いて大域的に最適化できることを示した．また，アルゴリズムの中でサブルーチンとして繰り返し呼び出される凸最適化法をウォームスタートさせ，実用化を向上させたアルゴリズムの改訂版を開発した．アルゴリズムの収束性を証明するとともに，改訂の有効性を数値実験によって確認した．

研究成果の学術的意義や社会的意義
２つの凸関数の差の最適化であるDC最適化は，97年にDCAと呼ばれる強力な局所最適化法が発表されて以来，特に機械学習の分野で盛んに用いられている．ところが，DC最適化問題の大域的な最適化となると，理論的には優れたアルゴリズムも提案されているものの，実用性に関しては数変数の問題を解くことすらままならない状況にあった．この研究で提案されたアルゴリズムは，DC関数を定める一方の凸関数が１変数関数の和として表すことができれば，100変数を超える問題に対しても10分程度で大域的に最適な解の出力が可能で，これは既存の大域最適化法の性能をはるかに凌駕するものである．

研究成果の概要（英文）：It is known that every twice continuously differentiable functions can be represented as a difference between two convex functions, that is a DC function, and that one convex function can be a sum of univariate functions. We showed that DC functions with such a special structure can be globally optimized using the rectangular branch-and-bound algorithm designed for separable non-convex optimization problems. We also modified the algorithm to warm-start the convex optimization algorithm, which is repeatedly called as a subroutine in the algorithm, and developed a revised version of the algorithm for practical application. We proved the convergence of the algorithm and confirmed the effectiveness of the revision by numerical experiments.

研究分野：数理最適化

キーワード：数理最適化　非線形最適化　大域的最適化　非凸関数　DC関数

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1．研究開始当初の背景

実数空間 $\mathbb{R}^n$ で定義された関数 f は，任意の点 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して $f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) - h(\mathbf{x})$ を満たす２つの凸関数 g，h が存在するとき，DC 関数 (Difference of two Convex functions) であるという．DC 最適化問題は，そうした DC 関数を目的関数や制約条件に含む最適化問題の総称であり，２回連続微分可能な関数はすべてコンパクトな凸集合上で DC である [6] ため，応用上重要な問題の多くがこのクラスに属している．DC 関数 $f = g - h$ の最小化問題では，h が１次関数のときには，f は凸関数なので局所最適化アルゴリズムによって容易に大域的最適解を求められるが，f には一般に複数の極小点があり，その中から大域的に最適な解を見つけ出すことは難しい．

DC 最適化に関連するトピックスの一つに，単調関数の差として表記できる DM 関数 (Difference of two Monotonic functions) に関する最適化がある．多項式関数は増加関数の差として自明に表記できるので，DM 最適化は DC 最適化と同様に広汎な分野での応用を期待できるが，最適化のための手掛かりはさらに乏しく，収束の保証されるアルゴリズムとしてはポリブロックアルゴリズムと名付けられた大域的最適化アルゴリズム [7] など二三が知られるのみである．

DC 最適化問題に対しては DCA [4] と呼ばれる強力な局所最適化アルゴリズムが機械学習などですでに広く使われている．創薬など厳密さの求められる分野では機械学習にも大域的な最適性が必要であると推察されるが，大域的最適化手法としては DC/DM 最適化とも分枝限定法 [5] や切除平面法 [1] がわずかに提案されているだけで，それらの実用性も未だ定かにはできていない．

2．研究の目的

この研究の目的は，DC/DM 最適化問題それぞれに対し，大域的な最適解への収束が理論的に保証される実用的なアルゴリズムを構築することにある．具体的には，減数項が１変数関数の和に分離可能な DC 関数の凸多面体上での最適化に対し，大域的最適解への収束を保証でき，なおかつ実用性の高いアルゴリズムを構築する．この DC 関数のもつ構造は一見特殊ではあるが，すべての２回連続微分可能な関数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ は，任意の凸集合 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ に対し，$\rho \geq -(1/2)\min\{\mathbf{y}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x})\mathbf{y} \mid \mathbf{x} \in \Omega,\ \|\mathbf{y}\| = 1\}$ とおくことで $g(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \rho\|\mathbf{x}\|^2$ が凸関数となり，

$$f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) - \rho\|\mathbf{x}\|^2$$

のように減数項が分離可能な DC 関数にできる．したがって，実用上重要な非線形関数のほとんどが，このクラスの DC 関数には含まれる．また，DM 最適化に関しても，その特殊ケースとして１次関数と低ランク単調関数との合成関数の凸多面体上での大域的最適化を試みる．

3．研究の方法

DC 最適化:　解決に取り組んだ DC 最適化問題を具体的に記述すると以下のようになる：

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) - \displaystyle\sum_{j=1}^{n} h_j(x_j) \\ \text{条　件} & \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b}. \end{array}\right. \tag{1}$$

ここで，g は $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ の凸関数，$h_1, \ldots, h_n$ はすべて $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ への狭義凸関数であり，また $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ である．簡単のため，実行可能集合

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b}\}$$

は内点をもつ有界集合と仮定すると，

$$s_j^1 = \min\{x_j \mid \mathbf{x} \in D\}, \quad t_j^1 = \max\{x_j \mid \mathbf{x} \in D\}, \quad j = 1, \dots, n,$$

を定めることができ，$s_j^1 < t_j^1$ が成り立つ．非凸最適化の矩形分枝限定法を (1) に適用すれば，以下が満たされるように矩形 $M^1 = [\mathbf{s}^1, \mathbf{t}^1] = \prod_{j=1}^n [s_j^1, t_j^1]$ はいくつかの子矩形 M^i（$i \in I$）に細分される：

$$M^1 = \bigcup_{i \in I} M^i, \quad \mathrm{int}(M^i) \bigcap \mathrm{int}(M^\ell) = \emptyset \text{ if } i \neq \ell.$$

任意の $i \in I$ に対して $M = [\mathbf{s}, \mathbf{t}] = M^i$ とおくことにしよう．もしも $D \cap M = \emptyset$ ならば，M には (1) の最適解が含まれることはないので考察の対象から除外する．そうでなければ，(1) の子問題

$$\text{(P)} \left| \begin{array}{ll} \text{最小化} & f(\mathbf{x}) \\ \text{条　件} & \mathbf{x} \in D \cap M \end{array} \right.$$

に対して**限定操作**を行う．目的関数 f の各減数項 h_j を 1 次関数

$$c_j^M(x) = \frac{h_j(t_j) - h_j(s_j)}{t_j - s_j}(x - s_j) + h_j(s_j)$$

で置き換えれば，(P) は次の凸最適化問題に近似される：

$$\text{(R)} \left| \begin{array}{ll} \text{最小化} & \overline{f}^M(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) - \displaystyle\sum_{j=1}^n c_j^M(x_j) \\ \text{条　件} & \mathbf{x} \in D \cap M. \end{array} \right.$$

関数 c_j^M の定義から，$x \in \{s_j, t_j\}$ ならば $c_j^M(x) = h_j(x)$ であり，さらに

$$c_j^M(x) > h_j(x) \iff x \in (s_j, t_j)$$

の成り立つことがわかる．このことから，

$$\mathbf{x} \in M \implies \overline{f}^M(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}),$$

ただし，等号の成り立つのは $\mathbf{x}$ が M の端点のときであり，また

$$\mathbf{x} \notin \mathrm{int}(M) \implies \overline{f}^M(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x})$$

の成り立つことがわかる．つまり，$\boldsymbol{\omega}^M$ を (R) の最適解とすれば，その最適値 $\overline{f}^M(\boldsymbol{\omega}^M)$ は子問題 (P) の下界値となる．したがって，$\overline{f}^M(\boldsymbol{\omega}^M) \geq f(\mathbf{x}^*)$ が暫定解 $\mathbf{x}^*$ に対して成り立てば，M には $\mathbf{x}^*$ よりも良い解が含まれないことがわかり，考察の対象から除外することができる．除外できなければ，**分枝操作**によって M をさらに細分する．細分には，M の最長辺を二分割する方法のほか，$\boldsymbol{\omega}^M$ を通る超平面で分割する ω 細分規則を用いることができる．

DM 最適化:　DM 最適化の特殊ケースとして解決に取り組んだのは次の問題である：

$$\left| \begin{array}{ll} \text{最大化} & f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{C}\mathbf{x} + \mathbf{d}) \\ \text{条　件} & \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b}. \end{array} \right. \tag{2}$$

ここで，g は $\mathbb{R}^k \to \mathbb{R}$ の単調増加関数，また $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{k\times n}$, $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^k$ である．新たに変数 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k$ を導入すれば，(2) は以下のような書換えができる：

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最大化} & g(\mathbf{y}) \\ \text{条　件} & \mathbf{y} - \mathbf{Cx} \leq \mathbf{d} \\ & \mathbf{A} \leq \mathbf{b}. \end{array}\right.$$

この問題は Tuy のポリブロックアルゴリズム [7] や矩形分枝限定法で大域的に解くことができる．

4．研究成果

DC 最適化:　矩形分枝限定法では，凸近似問題 (R) が凸最適化アルゴリズムによって繰り返し解かれることになる．そこで，前の反復で解かれた (R) の最適解を現在の (R) の初期解として凸最適化アルゴリズムをウォームスタートさせるため，(R) を次のように緩和することを提案した：

$$(\overline{\mathrm{R}}) \left|\begin{array}{ll} \text{最小化} & \overline{f}^M(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) - \displaystyle\sum_{j=1}^{n} c_j^M(x_j) \\ \text{条　件} & \mathbf{x} \in D. \end{array}\right.$$

これは，(R) の制約条件 $\mathbf{x} \in M$ を単に落としただけであり，(P) に対する下界値は劣化するものの，ウォームスタートの効果はその弱点を十二分に相殺することが計算実験によって確認された．

この修正で障害となりそうなことは，$(\overline{\mathrm{R}})$ の最適解 $\overline{\boldsymbol{\omega}}^M$ が必ずしも M に含まれない点である．実際，$\overline{\boldsymbol{\omega}}^M \notin M$ で，

$$c_j^M(\overline{\omega}_j^M) - h_j(\overline{\omega}_j^M) \leq 0, \quad j = 1, \ldots, n,$$

が成り立つとき，ω 細分規則では M を分割できない．ところが，この場合，M には $\overline{\boldsymbol{\omega}}^M$ より優れた解の含まれないことを証明できた．

同様のアイディアは，Soland が $g(\mathbf{x}) \equiv 0$ の場合に用いており，最適解が D の端点に生じることと端点の数が有限であることを使い，ω 細分規則に従うアルゴリズムの収束性を証明している [3]．しかし，(1) の最適解は一般に D の端点にあるとは限らないため，D の端点情報に頼ることなく，生成される暫定解の列を調べることでアルゴリズムの収束証明に成功した．

計算実験の結果，提案するアルゴリズムは $g(\mathbf{x}) \equiv 0$ の場合，つまり分離可能凹最小化問題に対しても優れた実用性を期待できることが判明した．また，既存の方法として Horst-Dien の単体分枝限定法 [2] との比較実験も試みたが，残念ながらその性能はこの研究で提案する改訂矩形分枝限定法とは比較にならないほど貧弱なものであった．

DM 最適化:　分枝限定法以外に (2) を効率よく大域的に最適化する方法はないと目鼻をつけ，Tuy らによる矩形分枝限定法 [8] の性能を凌駕することを目標に，矩形分枝限定法はもちろん，ポリブロックアルゴリズムの分枝限定法化や錐分枝限定法など様々なアルゴリズムを設計，計算機上に実装した．ところが，Tuy らによるアルゴリズムは非常に単純な設計にもかかわらず，残念ながらこれを常に凌駕するアルゴリズムは研究期間内に構築できなかった．問題 (2) の大域的最適解を求める実用的なアルゴリズムの構築をめざし，今後も研究を継続する予定である．

参考文献

[1] Horst, R., and N.V. Thoai, “DC programming: overview”, *Journal of Optimization Theory and Applications* **103** (1999), 1–43.

[2] Horst, R., and L.V. Dien, “A solution concept for a very general class of decision problems”, in O. Opitz, and B. Rauhut (eds.), *Ökonomie und Mathematik*, Springer (Berlin, 1987), 139–149.

[3] Soland, R.M., “Optimal facility location with concave costs”, *Operations Research* **22** (1974), 373–382.

[4] Tao, P.D., and L.T. Hoai-An, “Convex analysis approach to DC programming: theory, algorithms and applications”, *Acta Mathematica Vietnamica* **22** (1997), 289–355.

[5] Tuy, H., “Convex programs with an addional reverse convex constraint”, *Journal of Optimization Theory and Applications* **52** (1987), 463–486.

[6] Tuy, H., “D.C. optimization: theory, methods and applications”, in R. Horst and P.M. Pardalos (eds.), *Handbook of Global Optimization*, Springer (Berlin, 1995), 149–216.

[7] Tuy, H., “Monotonic optimization: problems and solution approaches”, *SIAM Jounal on Optimization* **11** (2000), 464–494.

[8] Tuy, H., F. Al-Khayyal, and P.T. Thach, “Monotonic optimization: branch and cut methods”, in C. Audet, P. Hansen, and G. Savard (eds.), *Essays and Surveys in Global Optimization*, Springer (Berlin, 2005), 39–78.

5．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計3件（うち査読付論文　3件／うち国際共著　2件／うちオープンアクセス　2件）

1．著者名 Kuno Takahito	4．巻 Published online
2．論文標題 A revision of the rectangular algorithm for a class of DC optimization problems	5．発行年 2021年
3．雑誌名 Journal of Global Optimization	6．最初と最後の頁 1-14
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10898-021-01102-2	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 M.A.F. Molinetti, B.B.Gatto, M.TR.S.Neto, T.Kuno	4．巻 22
2．論文標題 A-DVM: A Self-Adaptive Variable Matrix Decision Variable Selection Scheme for Multimodal Problems	5．発行年 2020年
3．雑誌名 Entropy	6．最初と最後の頁 1004～1004
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/e22091004	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 M.A.F. Molinetti, M.TR.S.Neto, T.Kuno	4．巻 923
2．論文標題 Deterministic Parameter Selection of Artificial Bee Colony Based on Diagonalization	5．発行年 2019年
3．雑誌名 Advances in Intelligent Systems and Cmputing	6．最初と最後の頁 85-95
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/978-3-030-14347-3_9	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2件（うち招待講演　1件／うち国際学会　0件）

1．発表者名 久野誉人
2．発表標題 A Retangular Algorithm for a Class of DC Optimization Problems
3．学会等名 京都大学 数理解析研究所 共同研究（公開型）「数理計画問題に対する理論とアルゴリズムの研究」
4．発表年 2019年

１．発表者名 T.Kuno
２．発表標題 Global Optimization of a Class of DC functions over a Polytope
３．学会等名 6th International Conference on Computer Science, Applied Mathematics and Applications（招待講演）
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
研究分担者	佐野　良夫 (SANO Yoshio) (20650261)	筑波大学・システム情報系・准教授 (12102)	
研究分担者	吉瀬　章子 (YOSHISE Akiko) (50234472)	筑波大学・システム情報系・教授 (12102)	

	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	モリネチ　マルコ (Mollinetti Marco Antonio Florenzano)		

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