

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 5 月 31 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2014～2016

課題番号：26540007

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

研究課題名(英文)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) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題は、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的最適解を効率的に見出す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。特に、高次元空間中の2楕円体間の符号付き距離を次元の6乗に比例する程度の時間で計算するアルゴリズムを開発した。この手法を拡張して、一般化CDT問題に対しても同程度の計算時間で厳密解が計算できることを示した。また、信頼領域法の各反復で解かれる信頼領域部分問題が一般化固有値問題に帰着され、高速高精度に解けることを示した。

研究成果の概要(英文)：Nonconvex optimization is believed to refuse any efficient algorithms in general. This project has aimed at developing a method to design efficient algorithms for nonconvex optimization problems that arises with a geometric background, exploiting their structures. In particular, we have designed an algorithm for computing the signed distance between overlapping ellipsoids. The running time is  $O(n^6)$ , where  $n$  is the dimension of the space. We have extended this approach to solve the generalized CDT problem in the same running time. We have also reduced the trust-region subproblem, which is repeatedly solved in the trust-region method, to a generalized eigenvalue problem, and shown that this reduction leads to an efficient and accurate solution method with the aid of today's highly developed solvers for the generalized eigenvalue problem.

研究分野：数理工学

キーワード：数理最適化 大域最適化 一般化固有値計算 機械学習 楕円体 信頼領域法

## 1. 研究開始当初の背景

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というのが難点となる。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、対称行列の最大固有値が 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。しかし、固有値計算を非凸最適化問題の解法に利用する研究は、殆ど発表されてこなかった。

## 2. 研究の目的

本研究課題では、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。具体的な問題設定として、統計的機械学習の文脈で現れる幾何的な背景を持った問題を対象として取り上げる。これによって、非凸最適化を利用した機械学習手法の精度の向上が期待される。さらに、一般化固有値計算を用い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。

## 3. 研究の方法

Fisher 判別分析の非凸拡張で現れる幾何的な問題を出発点として取り上げ、一般化固有値問題を用いたアルゴリズムを設計した。計算機実験によって、開発したアルゴリズムの効率性を確認した上で、ベンチマーク問題を用いて、予測精度に関する計算機実験を行った。これらの結果を 2014 年 4 月に行われた国際会議 AISTATS で発表した。

続いて、楕円体間の符号付き問題の計算に取り組み、2 パラメータ固有値問題を用いた厳密解法を開発した。この結果を SIAM Journal on Optimization で発表した。さらに、このアルゴリズムを用いて、非凸版 MPM の実装も行い、予測精度を評価した。ただし、計算量が次元の 6 乗に比例する程度となっているため、高速計算が要求される用途には、必ずしも向かないという結論に達した。

また、楕円体間の符号付き距離の計算で用いた手法を拡張して、一般化 CDT 問題を解くアルゴリズムを開発した。この成果を 2015 年 8 月に開かれた国際数理計画シンポジウム (ISMP) で発表するとともに SIAM Journal on Optimization に論文を掲載した。一般化 CDT 問題に対して全く別のアプローチで多項式時間解法の存在を証明した Daniel Bienstock 氏とも研究討論を行った。

さらに、信頼領域部分問題を単一の一般化固有値問題に帰着する方法を開発し、2015 年 8 月に開かれた国際数理計画シンポジウム (ISMP) で発表するとともに、SIAM Journal on Optimization に論文を掲載した。信頼領域部分問題に対して別の高速解法を開発している Nick Gould 氏とも研究討論を行った。

## 4. 研究成果

**拡張 Fisher 判別分析のための大域的最適化**

統計的機械学習の分野で取り上げられる 2 値判別問題に対する古典的な手法として Fisher の線形判別分析が知られている。分担者の武田等によって、この手法の拡張モデルが既に提案されていた。しかし、非凸最適化問題を解く必要があるため、厳密な解を得るのが困難であると思われ、局所最適解を得ることによって判別精度が評価されていた。

この非凸最適化問題は、与えられた楕円体の表面で原点に最も近い点を求める問題と等価であり、原点が楕円体の外部にあるときは、凸緩和問題を解くことによって大域最適解が得られるが、原点が楕円体の内部にあるときには、そのような手段が利用できない。本研究では、与えられた楕円体の情報から得られる特殊な対称行列束を導入し、その一般化固有値 (行列式が 0 になるパラメータ値) として、KKT 点の Lagrange 乗数を得られることを示した。対称行列束の固有値には、一般に複素数が表れるが、そのうちの実数が KKT

点の Lagrange 乗数に対応する．さらに，実部が最小の固有値が実数であり，これに対応する KKT 点が大域最適解であることを示した．これによって，空間の次元の 3 乗に比例する程度の計算量で大域最適解を見出すことができる．

### 楕円体間の符号付き距離の計算

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．

楕円体間の符号付き距離はグラフィクスやロボティクスなど様々な分野に現れる基本的な量であるが，統計的機械学習の文脈では，最大確率機械(MPM)を拡張した新たな手法として分担者の武田等が導入したモデルで，解く必要のある最適化問題として現れる．

本研究では，双対性を用いて，符号付き距離の計算を両楕円体の Minkowski 差の表面で原点から最短距離にある点を見出す問題として定式化した．さらに，緩和問題に対する KKT 条件を満たす実行可能解 (KKT 点) を列挙することによって，大域最適解が得られることを示した．KKT 点の列挙では，2 本の制約条件に対応する Lagrange 乗数が満たすべき条件を 2 パラメータ固有値問題の形に定式化し，次元の 2 乗の大きさの行列束の一般化固有値問題を經由して解く手法を採用した．得られた固有値の中で，正実数の組となる Lagrange 乗数に対応する KKT 点を見出し，目的関数値を比較することで，大域最適解が得られる．

### 一般化 CDT 問題の解法

楕円体間の符号付き距離の計算に類似した問題に，2 楕円体の共通部分における 2 次関数の最小化を求める CDT 問題が知られている．申請者等は，CDT 問題を含んで，より一般的に 2 本の制約を有する 2 次制約 2 次計画問題に対して，一般化固有値問題を經由した大域最適化手法を拡張した．CDT 問題は，比較的簡明な非凸最適化問題でありながら，その計算複雑度が未解明であるとして，長年注目されていた．最近，Bienstock (2016) は，この問題を含め，制約条件数が定数の 2 次制約 2 次計画問題が多項式時間解法を有することを示した．ただし，その証明自体は，必ずしも解法を明示的に与えている訳ではなく，実装するのは非常に困難と言われている．これに対し，本研究の提案手法は，制約条件が 2

本に限られるものの，実装が容易であり，計算量も変数の数の 6 乗で抑えられている．実際，40 次元の問題が 3 時間で解けている．

### 信頼領域部分問題の解法

一般に非線形関数最小化問題を解く手法として，局所的に 1 本の 2 次制約条件の下で 2 次目的関数を最小化する信頼領域部分問題を繰り返し解く信頼領域法が知られている．信頼領域部分問題自体は，非凸最適化問題の形をしているが，SDP 緩和問題を解くことによって，大域最適解が得られることが知られている．しかし，信頼領域法の中で繰り返し解かれる必要性から，より効率的な解法が望まれていた．

本研究では，点と楕円体表面との最短距離計算と同様の手法を援用して，信頼領域部分問題を一般化固有値計算に帰着した．これによって，反復計算を主体とした従来手法に比べて，高速高精度に信頼領域部分問題を解くことができるようになった．

### 5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 4 件)

S. Adachi, S. Iwata, Y. Nakatsukasa, and A. Takeda: Solving the trust-region subproblem by generalized eigenvalue problem, *SIAM Journal on Optimization*, 27 (2017), 269-291.

S. Sakaue, Y. Nakatsukasa, A. Takeda, and S. Iwata: Solving generalized CDT problems via two-parameter eigenvalues, *SIAM Journal on Optimization*, 26 (2016), 1668-1694.

S. Iwata, Y. Nakatsukasa, and A. Takeda: Computing the signed distance between overlapping ellipsoids, *SIAM Journal on Optimization*, 25 (2015), 2359-2384.

S. Iwata, Y. Nakatsukasa, and A. Takeda: Global optimization methods for extended Fisher discriminant analysis, *JMLR Conference and Workshop Proceedings*, 33 (2014), 411-419.

[学会発表](計 11 件)

Y. Nakatsukasa: Global optimization via eigenvalues, The Fifth IMA Conference on Numerical Linear Algebra, Birmingham, UK, September 2016.

Y. Nakatsukasa: Global optimization via eigenvalues, The Fifth International Conference on Continuous Optimization (ICCOPT), Tokyo, Japan, September 2016.

S. Sakaue, Y. Nakatsukasa, A. Takeda, and S. Iwata: A polynomial-time algorithm for nonconvex quadratic optimization with two quadratic constraints, The 22nd International Symposium on Mathematical Programming (ISMP), Pittsburgh, USA, July 2015.

S. Adachi, S. Iwata, Y. Nakatsukasa, and A. Takeda: Solving the trust-region subproblem by generalized eigenvalue problem, The 22nd International Symposium on Mathematical Programming (ISMP), Pittsburgh, USA, July 2015.

A. Takeda: Solving nonconvex optimization problems by a generalized eigenvalue problem, IMA Workshop "Convexity and Optimization: Theory and Applications," Minneapolis, USA, February 2015.

S. Iwata, Y. Nakatsukasa, and A. Takeda: Global optimization methods for extended Fisher discriminant analysis, The 17th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS), Reykjavik, Iceland, April 2014.

[その他]

<http://www.opt.mist.i.u-tokyo.ac.jp>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

岩田 覚 (IWATA, Satoru)  
東京大学・情報理工学系研究科・教授  
研究者番号：00263161

### (2) 研究分担者

武田 朗子 (TAKEDA, Akiko)  
統計数理研究所・教授  
研究者番号：80361799

中務 佑治 (NAKATSUKASA, Yuji)  
東京大学・情報理工学系研究科・助教  
研究者番号：10723554  
(平成 28 年度より研究協力者)