数式処理を用いた新たな最適性必要条件の導出

庵　智幸

本稿では，筆者の博士論文 [1] 第 6 章の内容について解説する．ペナルティ関数法から得られる最適性必要条件を元に，数式処理を活用することで，すべての局所最適解が満たすべき条件式の導出を行う方法について述べる．ここで用いている数式処理は，代数幾何学と呼ばれる数学の一分野の成果に基づいている．代数幾何学では，多項式方程式がもつ代数的性質とその零点の集合がもつ幾何的性質が対応付けられており，この対応関係により，さまざまな幾何的な対象を数式処理によって厳密に計算することが可能となる．ここでは，直感的に理解しやすい幾何学的側面に焦点を当てて解説を行う．

キーワード：非線形最適化，最適性条件，Karush-Kuhn-Tucker 条件，数式処理，代数幾何学

1. はじめに

本稿では，筆者の博士論文 [1] 第 6 章の内容について解説する．この章の内容は，日本オペレーションズ・リサーチ学会の英文誌 “Journal of the Operations Research Society of Japan” にも掲載されている [2].

本研究成果は，問題設定がすべて多項式によって与えられる多項式最適化問題に対する，新たな最適性必要条件を導出する方法を提案するものである．代数幾何学を用いた数式処理によって，すべての局所最適解が満たすべき代数方程式を問題設定で与えられた多項式から機械的に導出することが可能である．代数幾何学は，多項式のもつ代数的な性質と，その零点集合がもつ幾何的な性質を対応付ける数学の一分野である．このため，文献 [2] で提案されているアルゴリズムの大部分は幾何的な操作として理解することが可能である．本稿では，この幾何的な側面に焦点を当てて解説を行う．

1.1 問題設定

新たな最適性必要条件の導出について述べる前に，その前提となる問題設定について述べておく．ここでは，以下の等式制約付き非線形最適化問題を対象とする．

$$\begin{aligned} &\min_{\boldsymbol{x}}\ f(\boldsymbol{x}) \\ &\text{s. t. } \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = 0 \end{aligned} \tag{1}$$

ここで，$\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n$ は n 個の決定変数からなるベクトルであり，$f\colon \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$ はコスト関数，$\boldsymbol{g} = [g_1 \ \cdots \ g_m]^\top\colon \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^m$ は等式制約を表す関数である．また，許容領域を

$$\mathcal{X} := \{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n \mid \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = 0\} \subset \mathbf{R}^n$$

とおく．なお，不等式拘束 $\tilde{g}(\boldsymbol{x}) \leq 0$ がある場合には，スラック変数 s を用いて $g(\boldsymbol{x}, s) := \tilde{g}(\boldsymbol{x}) + s^2$ とおくことで，等式制約 $g(\boldsymbol{x}, s) = 0$ に変換できる [3, 4].

非線形最適化理論において，最適性条件は最も基本的な概念の一つであり，これまでにも問題設定に応じてさまざまな最適性条件が提案されている [3, 5]．なかでも，Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 条件は，理論的な解析のみならず多くの最適化アルゴリズムの基礎ともなっている重要な最適性条件である [3, 6]．KKT 条件がこのように多くの場面で用いられる理由の一つとして，条件成立の真偽を判断するための等式・不等式が，与えられた最適化問題 (1) から容易に計算できることが挙げられる．許容方向を用いた幾何的な条件や収束点列を用いた条件 [7] なども提案されているが，ある決定変数の値が最適解候補となりうるかどうかなどを判断する際には，代入するだけで条件の成立・不成立が判断できる KKT 条件の方が便利であろう．

一方で，KKT 条件はそれ単体では最適性必要条件とはならず，追加の条件として制約想定 (CQ: Constraint qualification) が成り立つ必要がある [5]．特に，Guignard の制約想定 (GCQ: Guignard’s CQ) は，KKT 条件が最適性必要条件となるための必要十分条件を与えることが知られている [5]．これはつまり，GCQ を満たさないような局所最適解は，KKT 条件を考えるだけでは見つけられないということを示している．また，GCQ そのものは集合の包含関係という幾何学的な条件として表されており，問題の表式 (1) からはその成立を判断することは難しい．

以降では，KKT 条件からは見つけられない（すなわち，GCQ を満たさない）ような局所最適解を**非 KKT 型**局所最適解と呼ぶこととし，非 KKT 型の解すらも

いおり　ともゆき
大阪大学大学院情報科学研究科
〒 565–0871 大阪府吹田市山田丘 1–5
t-iori@ist.osaka-u.ac.jp

満たすような最適性必要条件の導出について述べる．特に，(1) 式の f や $\boldsymbol{g}$ が多項式で表されるような問題設定（多項式最適化問題）に限定して考えることで，代数幾何学に基づく数式処理を活用し，問題の表式 (1) から機械的に条件式を導出する方法を与える．与えられるアルゴリズムは数式処理を用いた一見すると複雑に見えるものであるが，その根底にある幾何的な操作は驚くほど簡単なものである．本稿では，アルゴリズムの詳細には立ち入らず，その中の各ステップが幾何的にどのような操作を行っているのかについて紹介する．

記法　ベクトル変数 $\boldsymbol{x} = [x_1 \ \cdots \ x_n]^\top$ とベクトル値関数 $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x})$ に対し，$\boldsymbol{V}$ の x_i による偏微分を $\boldsymbol{V}_{x_i}$ と書く．また，$\boldsymbol{V}$ のヤコビ行列を $\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})$ で表す．すなわち，$\boldsymbol{V}_{\boldsymbol{x}} = [\boldsymbol{V}_{x_1} \ \cdots \ \boldsymbol{V}_{x_n}]$ である．また，スカラー値 $V(\boldsymbol{x})$ に対しても同様に $V_{\boldsymbol{x}} = [V_{x_1} \ \cdots \ V_{x_n}]$ とする．

2. ペナルティ関数法

議論の出発点となるのは，文献 [8] で示されているペナルティ関数法 [3] を用いた最適性必要条件である．

定理 1.　十分大きな $r_1 > 0$ に対し，$\lim_{k\to\infty} r_k = \infty$ を満たす単調増加列を $\{r_k\}_{k=1}^{\infty}$ とおく．制約付き最適化問題 (1) の任意の局所最適解 $\boldsymbol{x}^*$ に対して，局所ペナルティ関数を

$$P^{\mathrm{loc}}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{x}^*,r) \coloneqq f(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\|^2 + \frac{r}{2}(\boldsymbol{g}^\top\boldsymbol{g})(\boldsymbol{x}) \quad (2)$$

と定義する．（$\|\cdot\|$ は通常のユークリッド距離を表す．）このとき，停留条件

$$P^{\mathrm{loc}}_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}_k;\boldsymbol{x}^*,r_k) = 0$$

を満たす点列 $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ で，$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}^*$ となる点列が存在する．言いかえれば，そのような点列の存在は点 $\boldsymbol{x}^*$ が局所最適解であるための必要条件である．

局所ペナルティ関数 $P^{\mathrm{loc}}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{x}^*,r)$ は，元の最適化問題 (1) のコスト関数に局所最適解との距離（(2) 式第 2 項）が加わった問題に対するペナルティ関数である．任意の局所最適解をその近傍で孤立局所最適解にするために導入されるもので，これによって任意の $\boldsymbol{x}^*$ に収束する $P^{\mathrm{loc}}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{x}^*,r)$ の局所最適解の列の存在が保証される [2, 9]．

以降では，本来は未知である局所最適解 $\boldsymbol{x}^*$ を新たな決定変数 $\boldsymbol{y} \in \mathbf{R}^n$ でおき換え，

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},r) = [F_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},r) \ \cdots \ F_n(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},r)]^\top \coloneqq \left\{P^{\mathrm{loc}}_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},r)\right\}^\top$$

と定義する．すなわち，

$$F_i(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},r) = f_{x_i}(\boldsymbol{x}) + (x_i - y_i) + r(\boldsymbol{g}^\top\boldsymbol{g}_{x_i})(\boldsymbol{x}) \quad (3)$$

である．定理 1 より，ある点 $\boldsymbol{y} \in \mathbf{R}^n$ に対して方程式

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},r_k) = 0 \quad (4)$$

を満たす点列 $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ であって，$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}_\infty \coloneqq \lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}_k$ を満たすものが存在するとき，$\boldsymbol{y}$ は最適性必要条件を満たす最適解候補といえる．ある固定された r および $\boldsymbol{y}$ に対して連立方程式 (4) を解くことは容易である．しかしながら，無限列 $\{r_k\}_{k=1}^{\infty}$ のすべての要素と，任意の点 $\boldsymbol{y} \in \mathcal{X}$ すべてに対して (4) 式を解くことは現実的ではない．

ここでの問題は大きく二つに分けられる．一つ目は，無限列 $\{r_k\}_{k=1}^{\infty}$ で表される無限大への極限操作である．有限の対象しか実装できない計算機上において，無限の点列を扱うことは原理的に不可能である．条件式に $r=\infty$ を代入するということを形式的に考えることもできるが，この場合は (3) 式の第 3 項のみが残る形となり，$\boldsymbol{g}^\top\boldsymbol{g}_{x_i} = 0$ $(i=1,\ldots,n)$ という許容解すべてが満たす意味のない式が得られてしまうことに注意されたい．二つ目は，$\boldsymbol{y}$ に対して収束する点列 $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ の存在を示さなければならない点である．各 $\boldsymbol{x}_k$ は (4) 式によって r_k と $\boldsymbol{y}$ から定まる点であるが，r_k および $\boldsymbol{y}$ を用いてこれを陽に書きあらわすことは一般には不可能である．したがって，その収束先 $\boldsymbol{x}_\infty$ もまた解析的に求めることは困難である．

3. 射影空間と数式処理

前節の最後に述べた二つの問題のうち，無限大の取り扱いに際して役に立つのが，射影空間と呼ばれる幾何的概念である．射影空間とは，簡単に言えば通常のユークリッド空間に無限遠点を加えた空間である．

最も簡単な 1 次元の場合を考えてみよう．1 次元ユークリッド空間 $\mathbf{R}$ は無限に伸びる直線である．絶対値の任意に大きい実数を含んではいるが，無限遠点 $\pm\infty$ は含まない．射影空間を考えるため，この $\mathbf{R}$ を 2 次元座標平面に含まれる直線 $V \coloneqq \{(1,X_1) \in \mathbf{R}^2 \mid X_1 \in \mathbf{R}\}$ と同一視する（図 1）．すなわち，任意の $X_1 \in \mathbf{R}$ に対して，点 $(1,X_1) \in \mathbf{R}^2$ を対応付けるのである．この時点でもまだ，$X_1 \to \infty$ と極限を取った点は $(1,\infty)$ となり，2 次元ユークリッド空間 $\mathbf{R}^2$ を飛び出してしまう．

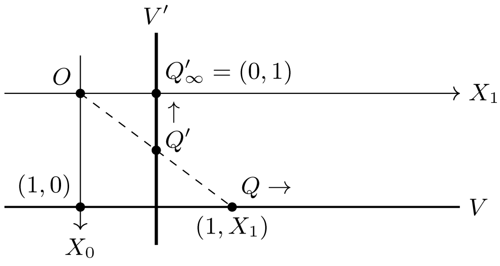

図 1　一次元射影空間 $\mathbf{P}$ の概念図

ところが，より次元の大きい空間 $\mathbf{R}^2$ を考えたことで，先程定めた直線 V とは別の直線 $V' \coloneqq \{(X_0, 1) \in \mathbf{R}^2 \mid X_0 \in \mathbf{R}\}$ を考えることが可能になる．$\mathbf{R}^2$ の原点 O および直線 V 上のある点 $Q = (1, X_1)$ を通る直線と V' との交点を Q' とすると，点 $(1,0)$ 以外の $Q \in V$ に対して $Q' \in V'$ は一意に定まる．

この対応関係を通して，もう一度 $X_1 \to \infty$ という極限操作を考えてみる．いま，点 Q が直線 V 上を X_1 軸正の方向へ動くと，対応して Q' も V' 上を動く（図 1）．このとき，線分 OQ は限りなく X_1 軸に近づき，結果として Q' は点 $Q'_\infty = (0,1)$ に収束していくことがわかるだろう．したがって，V' 上の点 Q'_∞ は V 上の点の極限値 $(1,\infty)$ および $\mathbf{R}$ の無限遠点に対応していると見なすことができる．同様の議論により，逆に V' の無限遠点は $(1,0) \in V$ と同一視される．このように，複数のユークリッド空間（ここでは，V と V'）を対応関係（ここでは Q と Q' の関係）で貼り合わせて構成されるのが射影空間と呼ばれる空間である．

より高次元の空間である方程式 (4) の解空間 $\mathbf{R}^{2n+1}$ に対しても同様に，$2n+1$ 次元射影空間が定義できる．すなわち，$\mathbf{R}^{2n+1}$ よりも 1 次元だけ次元の大きい空間 $\mathbf{R}^{2n+2}$ の超平面

$$V = \{\boldsymbol{X} = [X_0 \ \cdots \ X_{2n+1}]^\top \in \mathbf{R}^{2n+2} \mid X_0 = 1\} \tag{5}$$

と $\mathbf{R}^{2n+1}$ を同一視し，別の超平面 V' を考え，V 上の点 Q と V' 上の点 Q' の対応関係を考えることで，V の無限遠点を V' 上の有限な点 Q'_∞ として捉えることが可能となる（図 2）．

さて，以上で説明してきた超平面 V 上の点を V' 上の点へと写し取るという幾何的な操作は，(4) 式に対する代数的操作として実現できる．具体的には，変数変換

$$\phi\colon \boldsymbol{X} \mapsto [\boldsymbol{x}^\top \ \boldsymbol{y}^\top \ r]^\top = \left[\frac{X_1}{X_0} \ \cdots \ \frac{X_{2n+1}}{X_0}\right]^\top \tag{6}$$

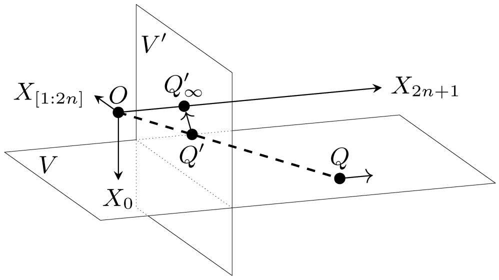

図 2　n 次元の射影空間の概念図

のもとで

$$F_i^{\mathrm{hom}}(\boldsymbol{X}) \coloneqq X_0^{d_i}(F_i \circ \phi)(X_0, X_1, \ldots, X_{2n+1}) \tag{7}$$

という方程式を考えることに相当する．これを斉次化 (Homogenization) と呼ぶ [10]．ここで，d_i は多項式 F_i の全次数（多項式に含まれる単項式の次数の中で最も大きいもの）である．定義式 (7) は一見すると複雑に見える．しかし，以下の例からもわかるとおり，斉次化とはある多項式に含まれるすべての項の次数をその内の最大のものへと揃えた斉次多項式（含まれるすべての項の次数が同じ多項式）を作り出す操作となっている．

例 1.　$n = 1$ として，多項式

$$F(x,y,r) = x^2 + x - y + r(x^2 + x)^2 \tag{8}$$

に対する斉次化を考える．F の全次数は $d_1 = 5$ であるから，(7) 式は

$$\begin{aligned}
&F^{\mathrm{hom}}(X_0, \ldots, X_3) \\
&= X_0^5 (F \circ \phi)(X_0, \ldots, X_3) \\
&= X_0^5 F\left(\frac{X_1}{X_0}, \frac{X_2}{X_0}, \frac{X_3}{X_0}\right) \\
&= X_0^3 X_1^2 + X_0^4 X_1 - X_0^4 X_2 + X_3(X_1^2 + X_0 X_1)^2
\end{aligned}$$

となる．F^{hom} に含まれるどの項も，全次数が 5 になっていることがわかる．

ここで，変数変換 ϕ は単射ではないことに注意されたい．すなわち，ある $\boldsymbol{X} \in \mathbf{R}^{2n+2}$ とそのスカラー倍 $\rho\boldsymbol{X}$ $(\rho \in \mathbf{R})$ は $\rho \neq 0$ である限り，$\phi(\boldsymbol{X}) = \phi(\rho\boldsymbol{X})$ を満たす．これはつまり，$\boldsymbol{F} = 0$ を満たす V 上の点 Q を取ったとき，$\mathbf{R}^{2n+2}$ の原点 O と点 Q を結ぶ直線上で恒等的に $\boldsymbol{F}^{\mathrm{hom}} = [F_1^{\mathrm{hom}} \ \cdots \ F_n^{\mathrm{hom}}]^\top = 0$ が成り立つことを意味している．この意味で，方程式 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{hom}} = 0$ は $\boldsymbol{F} = 0$ を射影空間上に拡張したものと見なすこと

ができる．

またこの拡張により，方程式 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{hom}}=0$ を別の超平面 V' へと制限するという操作も考えることができるようになる．たとえば，図 2 の $V'=\{\boldsymbol{X}\in\mathbf{R}^{2n+2}\mid X_{2n+1}=1\}$ に関して，代数方程式 $F_i^{\mathrm{hom}}(\boldsymbol{X})=0$ に $X_{2n+1}=1$ を代入することで，V' 上の代数方程式を得ることができる．すなわち，変数変換

$$\psi\colon [\rho\ \boldsymbol{\xi}^\top\ \boldsymbol{\eta}^\top]^\top \mapsto \boldsymbol{X}=[\rho\ \boldsymbol{\xi}^\top\ \boldsymbol{\eta}^\top\ 1]^\top \tag{9}$$

を用いて

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_i(\rho,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta}) &\coloneqq (F_i^{\mathrm{hom}}\circ\psi)(\rho,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta})\\ &=\rho^{d_i}(F_i\circ\phi\circ\psi)(\rho,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta})\end{aligned}\tag{10}$$

と定めることで，V に解をもつ方程式 $F_i=0$ から V' に解をもつ方程式 $\mathcal{F}_i=0$ を定義することができる．さらに，任意の $\boldsymbol{F}=0$ の解 $Q\in V$ に対して，二点 O と Q を通る直線と平面 V' との交点は $\mathcal{F}_i$ の定義から $\boldsymbol{\mathcal{F}}=[\mathcal{F}_1\ \cdots\ \mathcal{F}_n]^\top=0$ の解となる（図 3）．

なお，変数変換 (9) のように，$\boldsymbol{X}$ のある一つの成分に 1 を代入する操作を非斉次化 (Dehomogenization) と呼ぶ．非斉次化は斉次化の逆操作と捉えることができ，実際，F_i^{hom} に $X_0=1$ を代入すると F_i そのものが得られる．斉次多項式 F_i^{hom} に $X_{2n+1}=1$ を代入するため，得られる多項式 $\mathcal{F}_i$ は一般に斉次多項式ではなくなる（一般に，任意の $\boldsymbol{X}$ の成分への代入を考えることで $2n+2$ 通りの非斉次化を考えることができるが [10]，本稿では (9) 式だけで十分である）．

また，図 3 から，$\boldsymbol{F}=0$ の解 Q の第 $(2n+1)$ 成分（これは，V 上では変数 r に相当する）が無限に大きくなるとき，対応する $\boldsymbol{\mathcal{F}}=0$ の解 Q' はある点 Q'_∞ に収束していくことがわかる．これは，変数変換 (6) と (9) とを合成することで，点 Q と点 Q' の対応関係が

$$\begin{bmatrix} r\\ \boldsymbol{x}\\ \boldsymbol{y}\end{bmatrix}=(\phi\circ\psi)(\rho,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta})=\begin{bmatrix}1/\rho\\ \boldsymbol{\xi}/\rho\\ \boldsymbol{\eta}/\rho\end{bmatrix}\tag{11}$$

という形で与えられることからも理解できる．いま，与えられた $\boldsymbol{y}$ と単調増加列 $\{r_k\}_{k=1}^\infty$ および，それらから求まる $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},r_k)=0$ の解の列 $\{\boldsymbol{x}\}_{k=1}^\infty$ に対し，対応関係 (11) から得られる数列 $\{\rho_k\}_{k=1}^\infty$，$\{\boldsymbol{\eta}_k\}_{k=1}^\infty$，$\{\boldsymbol{\xi}_k\}_{k=1}^\infty$ を考える．すると，(11) 式第 1 成分の等式から $\lim_{k\to\infty}\rho_k\to 0$ が従い，$\boldsymbol{x}_k$ が有限の値 $\boldsymbol{x}_\infty$ に収束することおよび，$\boldsymbol{y}$ がある固定された有限の値であることから，それぞれ $\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{\xi}_k=0$ および $\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{\eta}_k=0$ が従う．したがって，Q' は以下の点

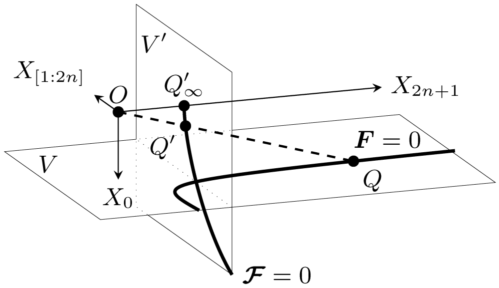

図 3　V 上の方程式と V' 上の方程式の関係

$$Q'_\infty=[\underbrace{0\ \cdots\ 0}_{2n+1}\ 1]^\top\in\mathbf{R}^{2n+2}$$

に収束する（図 3）．このとき $\boldsymbol{x}_\infty$ がどのような値であろうと，それが有限の値である限り必ず Q' は Q'_∞ に収束する．極限値 $\boldsymbol{x}_\infty$ は，関係式 $\boldsymbol{\xi}_k=\boldsymbol{x}_k\rho_k$ から

$$\boldsymbol{x}_\infty=\lim_{k\to\infty}\frac{\boldsymbol{\xi}_k}{\rho_k}\tag{12}$$

と表せる．

例 2（例 1 の続き）**.** (10) 式より，

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(\rho,\xi,\eta)&=(F^{\mathrm{hom}}\circ\psi)(\rho,\xi,\eta)\\ &=\rho^3\xi^2+\rho^4\xi-\rho^4\eta+(\xi^2+\rho\xi)^2\end{aligned}\tag{13}$$

が得られる．この方程式の解と (8) 式の解は，(11) 式により $\rho\neq 0$ かつ $r\neq 0$ である限り一対一に対応している．

4. 接錐と数式処理

前節では，射影空間を考えることで，方程式 $\boldsymbol{F}=0$ の無限遠にある解が別の方程式 $\boldsymbol{\mathcal{F}}=0$ の有限な解と対応することを見た．またこのとき，求めるべき極限値 $\boldsymbol{x}_\infty$ は (12) 式の極限値として得られる．

ここで，$\boldsymbol{\xi}_k$ を変数 ρ_k の関数と見たとき，$\rho_k\to 0$ で $\boldsymbol{\xi}_k\to 0$ であることを考えると，(12) 式は $\boldsymbol{\xi}_k$ の原点近傍での ρ 軸に対する傾きだと見なすことができる．方程式 $\boldsymbol{\mathcal{F}}=0$ で定まる曲線の原点における傾きは，陰関数定理から

$$\left.\frac{d\boldsymbol{\xi}}{d\rho}\right|_{\rho=0}=(\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\boldsymbol{\xi}})^{-1}(\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{y}+\boldsymbol{\mathcal{F}}_\rho)\tag{14}$$

と書ける．（ここで，(11) 式から得られる関係式 $\boldsymbol{\eta}_k=\boldsymbol{y}\rho_k$ を用いた．）(14) 式からもわかるように，陰関数定理を用いるためには原点近傍でヤコビ行列 $\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\boldsymbol{\xi}}$ が正則となる必要がある．これは，原点近傍で $\boldsymbol{\mathcal{F}}=0$ の

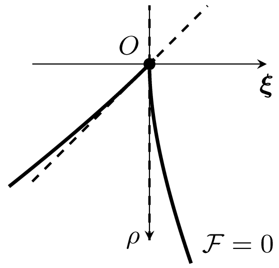

図 4　複数の解軌道が原点で交わる図

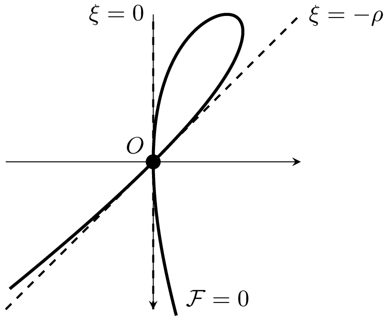

図 5　方程式 $\mathcal{F}=0$ の解曲線

解曲線が一意に定まることと同義である．

ところが，$\boldsymbol{\mathcal{F}}=0$ の解曲線が原点近傍で一意に定まるということは，方程式 $\boldsymbol{F}=0$ が $r\to\infty$ で収束する解を一つしかもたないということであり，さらに定理 1 によればこれは元の最適化問題が高々一つの局所最適解しかもたないということを意味する．このため，複数の局所最適解をもつ非線形最適化問題に対しては，複数の $\boldsymbol{\mathcal{F}}=0$ の解曲線が原点で交わる状況，すなわち，原点が特異点 [10] となる状況を考えなければならないことがわかる（図 4）．このとき，ヤコビ行列 $\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\boldsymbol{\xi}}$ は正則にならず，(14) 式は利用できない．

そこで必要になるのが，接錐と呼ばれる概念である．接錐は，正則点（特異点ではない点）における接空間を，特異点に対して拡張した概念であり，ここでは原点で交わる各解曲線（図 4 実線）の接線の和集合（図 4 破線）と一致する．したがって，接錐の定義式を求めることができれば，それに $\rho=1$ を代入して得られる方程式を解くことで各解曲線の原点における傾きを求めることができる．

与えられた多項式方程式 $\boldsymbol{\mathcal{F}}(\rho,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta})=0$ に対して，その解集合の原点における接錐は，また別の斉次多項式方程式 $\boldsymbol{\mathcal{G}}(\rho,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta})=0$ の解として書き表すことができる [10]．また，斉次多項式ベクトル $\boldsymbol{\mathcal{G}}$ は元の方程式を定める多項式ベクトル $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ から数式処理によって計算することが可能である（アルゴリズムの詳細については文献 [10, 11] などを参考にされたい）．

例 3.　例 2 で得られた方程式 (13) に対し，$\eta=\rho$ ($y=1$) とした場合を考えよう．方程式 $\mathcal{F}_1(\rho,\xi,\rho)=0$ の解曲線は図 5 にあるように，原点で自身と交差する．したがって，原点は特異点となり，(14) 式によって傾きを計算することはできない．ここで，多項式 $\mathcal{F}(\rho,\xi,\rho)$ に含まれる項の中で最も次数の低い項のみを取り出すと，$\mathcal{G}=(\xi^2+\rho\xi)^2$ という多項式が得られる．この多項式の零点は $\xi=-\rho,\xi=0$ の和集合となり，交差する 2 つの曲線それぞれの原点での接線に対応していることが確認できる（図 5 破線）．実際，$\mathcal{G}=0$ は接錐の定義式であることが示せる．この例からわかるように，原点における接錐の定義式の計算は，大まかに言えば，元の方程式から次数の最も小さい項を選んで方程式を作る操作に対応している．これは，滑らかな曲線の傾きを計算する際に，その点での Tayler 展開の最小次数（すなわち 1 次）の項を考えることの拡張と見なすこともできる．

代数方程式 $\boldsymbol{\mathcal{F}}=0$ を満たしながら原点を通る曲線の，原点における接線は必ず $\boldsymbol{\mathcal{G}}=0$ を満たす．したがって，$\boldsymbol{\mathcal{G}}$ に $\boldsymbol{\eta}=\boldsymbol{y}\rho$ および $\rho=1$ を代入することで，極限値 (12) が満たすべき式を $\boldsymbol{\mathcal{G}}(1,\boldsymbol{x}_\infty,\boldsymbol{y})=0$ として得ることができる．任意の局所最適解 $\boldsymbol{x}^*$ に対して，定理 1 は $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}^*$ と選んだときの $\boldsymbol{x}_\infty=\boldsymbol{x}^*$ を満たす点列 $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^\infty$ の存在を保証しているから，結局，以下のように最適性必要条件が得られる．

定理 2.　制約付き最適化問題 (1) の任意の局所最適解 $\boldsymbol{x}^*$ は方程式

$$\boldsymbol{\mathcal{G}}(1,\boldsymbol{x}^*,\boldsymbol{x}^*)=0 \tag{15}$$

を満たす．すなわち，(15) 式は多項式最適化問題の任意の局所最適解が満たすべき最適性必要条件である．

定理 2 は定理 1 に基づいているため，制約想定に関係なく，あらゆる局所最適解が満たすべき方程式を与えている．また，方程式 (15) は (1) 式中の多項式 f および $\boldsymbol{g}$ から，数式処理により機械的に導出することが可能である．

5.　おわりに

本稿では，筆者の博士論文第 6 章の内容である，数式処理を用いた新たな最適性必要条件の導出方法に関

して，幾何学的な視点から解説を行った．アフィン関数に比べると，非線形関数に対して実行できる機械的な演算は，実は意外と少ない．現行の数式処理ソフトウェアにおいて指数関数や三角関数などの非線形関数が自由自在に取り扱えているように見えるのは，これら個々の非線形要素が満たす恒等式を予め演算ルールとして実装しているためである．したがって，これらの非線形要素が複雑に合成された関数の計算を行うとすると，それぞれの非線形要素に対する恒等式の選び方や適用順序によって計算結果が変わるといったことが起こってしまう．

一方，非線形性を多項式の範囲に制限することで，数式処理による厳密で統一的な非線形関数の計算が可能となる．また筆者の最近の研究 [12, 13] では，多項式係数微分作用素を対象にした数式処理 [14] の応用も進めている．微分作用素を用いて計算することで，間接的にではあるものの，広いクラスの非線形関数に対して統一的な計算が可能となる．

数式処理を用いた非線形関数の統一的・機械的計算方法を研究を進めていくことで，アルゴリズム中で非線形性を系統的・機械的に取り扱う理論・アルゴリズム・ツールの開発が期待できると筆者は考えている．

謝辞　本稿で解説した内容は，筆者が京都大学情報学研究科大塚研究室に在籍していた際に得られたものである．ご指導，ご議論いただいた皆様にこの場を借りて厚く御礼申し上げる．また，同内容は，JSPS 科研費 JP15H02257 と JP18J22093 の助成による研究成果に基づくものである．

参考文献

[1] T. Iori, “*Symbolic-Numeric Approaches Based on Theories of Abstract Algebra to Control, Estimation, and Optimization*,” PhD Thesis, Graduate School of Informatics, Kyoto University, 2021.

[2] T. Iori and T. Ohtsuka, “Limit operation in projective space for constructing necessary optimality condition of polynomial optimization problem,” *Journal of the Operations Research Society of Japan*, **63**, pp. 114–133, 2020.

[3] D. Bertsekas, *Nonlinear Programming*, Athena Scientific, 2016.

[4] E. H. Fukuda and M. Fukushima, “A note on the squared slack variables technique for nonlinear optimization,” *Journal of the Operations Research Society of Japan*, **60**, pp. 262–270, 2017.

[5] 福島雅夫，『非線形最適化の基礎』，朝倉書店，2001.

[6] J. Nocedal and S. J. Wright, *Numerical Optimization*, Springer, 2006.

[7] R. Andreani, N. S. Fazzio, M. L. Schuverdt and L. D. Secchin, “A sequential optimality condition related to the quasi-normality constraint qualification and its algorithmic consequences,” *SIAM Journal of Optimization*, **29**, pp. 743–766, 2019.

[8] R. Andreani, G. Haeser and J. M. Martínez, “On sequential optimality conditions for smooth constrained optimization,” *Optimization*, **60**, pp. 627–641, 2011.

[9] A. V. Fiacco and G. P. McCormick, *Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques*, Wiley, 1968.

[10] D. コックス，J. リトル，D. オシー（落合啓之，示野信一，西山享，室政和，山本敦子訳），『グレブナ基底と代数多様体入門（下）』，丸善出版，2012.

[11] D. Eisenbud, *Commutative Algebra with a View Toward Algebraic Geometry*, Springer-Verlag, 1995.

[12] T. Iori and T. Ohtsuka, “Bayesian filtering for nonlinear stochastic systems using holonomic gradient method with integral transform,” In *Proceedings of the 60th IEEE Conference on Decision and Control*, pp. 5904–5910, 2021.

[13] 庵智幸，“ホロノミックなハミルトン関数に対するハミルトン・ヤコビ方程式の解法に関する一検討，”自動制御連合講演会講演論文集，**64**, pp. 562–567, 2021.

[14] JST CREST 日比チーム（編），『グレブナー道場』，共立出版，2011.