基礎となる算法

山本　芳嗣

1. はじめに

非凸最適化の難しさの理由として，局所最適解がたくさん現れることが指摘されることがある．たとえば，多面体 Dがアフィン関数 $g_i(x) = (a^i)^\mathsf{T}x - b_i$ によって $D := \{x \in R^n \mid g_i(x) \leq 0\,(i = 1, \ldots, m)\}$と定義されているとする．(制約をまとめて $Ax - b \leq 0$ と書くこともある．) この多面体の点で原点からユークリッド距離 $||\cdot||_2$ で計って最も遠い点を求める問題

$$(*) \quad \left| \begin{array}{ll} \text{最小化} & -||x||_2 \\ \text{制　約} & x \in D \end{array} \right.$$

を考えてみよう．問題を $||x||_2$の最大化と書かないのは，慣用の用語に倣うためであって他意はない．特に Dとして，2点 $a < 0, b > 0$ で挟まれる n 次元の矩形領域 $C^n := \{x \in R^n \mid a \leq x \leq b\}$ を考えると，この矩形の 2^n個のすべての端点は上の問題の局所最適解となる．しかし，だからといってこの問題が難しいわけではない．実際，最適解 $x^* = (x_1^*, \ldots, x_n^*)^\mathsf{T}$ は

$$x_i^* = \begin{cases} a_i & |a_i| \geq |b_i| \text{ の場合} \\ b_i & |a_i| \leq |b_i| \text{ の場合} \end{cases}$$

と簡単に得られる．実行可能領域が，C^nを何らかの直行変換（距離を保存する）で回転した領域として与えられている場合も同様に易しい．しかし，Dが一般の多面体となるとこの問題は NP-困難であることが知られている [5]．先の，局所最適解の多さは問題の難しさを説明していない．何が難しさの理由かに対しては満足できる回答は用意されていない．

大域的最適化あるいは非凸最適化でよく使われる手法といえば，切除平面法，分枝限定法，下包凸関数，外部近似法，内部近似法，端点列挙などであろう．この内，切除平面法，分枝限定法はよく知られているので，この報告では問題 (*) を題材として外部近似法と内部近似法，それに付随して登場する下包凸関数と端点列挙について述べようと思う．

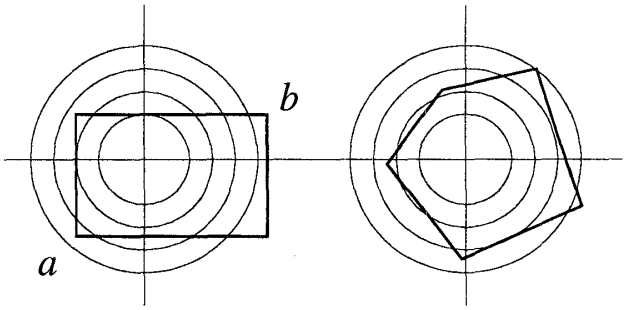

図1　易しい問題と難しい問題

2. 外部近似法

問題 (*) は凹目的関数の最小化問題なので，最適解はDの端点の中に探せばよい．従って，端点をすべて列挙してしまえばこの問題を解くことができる．しかし，この問題の困難さは，多面体Dの端点の多さに由来する．そこで Dを端点が少なくしかも容易に計算できる別の多面体で囲み，その上で問題を解いて得られた点がDに入っていることを期待する方法が外部近似法である．それを次のページに図と併せて示す．別の多面体としては初めにシンプレックス[1] がよく用いられる．この算法が Dを定義している制約の本数以下の反復で終了し，(*) の最適解を与えることは明らか．しかし悲しいかな，途中で得られる点 y^k はいずれも実行可能解ではない上，問題 (*) と同じ構造を持った問題 (Q_k) を何度も解くことが要請されている．ただし，もしも P_kの端点すべてを P_{k-1}の端点から作り出すことができれば，問題 (Q_k) を解くことができるが，この問題は後の端点列挙と関連しているのでしばし置く．前者の問題点は下包凸関数を利用すれば克服

やまもと よしつぐ　筑波大学社会工学系
〒 305-8573 つくば市天王台 1-1-1

[1] 次元+1 個のアフィン独立な点の凸包，2次元なら3角形，3次元なら3角錐

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

可能である．

外部近似法 (Kelly-Cheney-Goldstein[2,9])

＜1＞（初期化）
Dを含むシンプレックス P_1を作り $k \leftarrow 1$ とする．
＜2＞（下界）
問題(Q_k): $\min -||x||_2$ s.t. $x \in P_k$を解き y^k をその最適解とする．
＜3＞（終了判定と制約の追加）
もし $y^k \in D$ であれば終了．そうでなければ y^kが満たしていない制約 g_iを見つけ，$P_{k+1} \leftarrow P_k \cap \{x \mid g_i(x) \leq 0\}$，$k \leftarrow k+1$ として＜2＞へ．

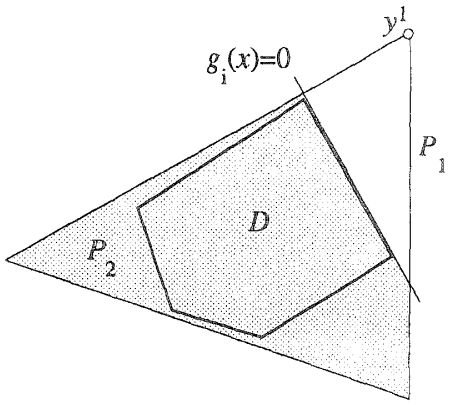

図2　外部近似法

凸集合P上の凹関数 fに対してその下包凸関数φ とは
・φ は P上で凸関数
・Pの任意の点 x で$\varphi(x) \leq f(x)$
・上の2つの性質を持つ関数の中でφ は極大
なる関数である．つまり，凹関数 fを下から最もよく近似する凸関数である．一見面倒に見えるこの関数は，Pが有界多面体でその端点，これを $v^0, \ldots, v^N$とする，が分かっているときには線形計画問題を解くことによって得られる．実際，点 $x \in P$での関数値$\varphi(x)$ は

$$\varphi(x) = \min \left\{ \sum_{i=0}^{N} \alpha_i f(v^i) \;\middle|\; \begin{array}{l} x = \sum_{i=0}^{N} \alpha_i v^i \\ \sum_{i=0}^{N} \alpha_i = 1 \\ \alpha_i \geq 0 \ (i = 0, \ldots, N) \end{array} \right\}$$

で与えられる．この区分的に線形な凸関数φ の D上での最小値は fの D上での最小値の下界を与えるが，それは$\lambda_0, \ldots, \lambda_N$を変数とする線形計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \sum_{i=0}^{N} \lambda_i f(v^i) \\ \text{制　約} & \sum_{i=0}^{N} \lambda_i A v^i - b \leq 0 \\ & \sum_{i=0}^{N} \lambda_i = 1 \\ & \lambda_i \geq 0 \ (i = 0, \ldots, N) \end{array}$$

を解くことによって計算できる．さて，関数$-||x||_2$の下包凸関数 φを使った逐次下包凸関数近似法は下のようになる．ここで P_kの端点は kによって変化するが記号を煩雑にしないために一律に $v^0, \ldots, v^N$で示す．手順＜ 2 ＞の点 vの目的関数値は問題の最適値の下界を与えることからこの算法が終了した時点で vが最適解となる．また，解$\lambda^k = (\lambda_0^k, \ldots, \lambda_N^k)^\top$ から $x^k = \sum \lambda_j^k v^j$と決まる点 x^kは問題の実行可能解となり，従ってその目的関数値は問題の最適値の上界を与える．この算法でも下包凸関数φ_kを作るために P_kの端点集合が必要になることに注意して欲しい．

逐次下包凸関数近似法 (Falk-Hoffman[4])

＜1＞（初期化）
Dを含むシンプレックス P_1 を作り，$k \leftarrow 1$とする．
＜2＞（下包凸関数 の最小化）
$-||x||_2$の P_k上での下包凸関数φ_kを作り，その D上での最小化問題を解く．その最適解を$\lambda^k = (\lambda_0^k, \ldots, \lambda_N^k)$ として，vを $\min_j \{ f(v^j) \mid \lambda_j^k > 0 \}$ を達成する点とする．
＜3＞（終了判定と制約の追加）
もし vが Dに属していれば，終了．そうでなければ，vが満たしていない制約 g_iを選び，$P_{k+1} \leftarrow P_k \cap \{x \mid g_i(x) \leq 0\}$，$k \leftarrow k+1$ として＜2＞へ．

3.　包含問題

いま我々の問題 (*) の実行可能解，つまり Dの点$\tilde{x}$が得られているとしよう．このとき目的関数値 $-||x||_2$が $-||\tilde{x}||_2$以上の点の全体，つまり関数$-||\cdot||_2$のアッパーレベルセット，を

$$L(\tilde{x}) := \{ x \mid -||x||_2 \geq -||\tilde{x}||_2 \}$$

と書くことにすると，$\tilde{x}$が最適解であることと，この超球 $L(\tilde{x})$ が Dを含んでいることとは明らかに等価である．$L(\tilde{x})$ が Dを含んでいない場合には Dの端点で $L(\tilde{x})$ に含まれていないものがある．なぜなら，もし

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

も Dの端点がすべて $L(\tilde{x})$ に属していれば，Dの端点全体の凸包がDに等しいことと，凸包を作る演算の単調性から Dが $L(\tilde{x})$ に含まれてしまうことになるからである．今，そのような場合には $L(\tilde{x})$ に属しない Dの端点の1つを求めることができると仮定すると，次の算法が考えられる．

＜1＞（初期化）
Dの端点を求めて，w^1とし，$k \leftarrow 1$とする．
＜2＞（終了判定）
$D \subseteq L(w^k)$ が成り立っていれば，終了．
＜3＞（新しい端点）
$D \setminus L(w^k)$ に属する Dの端点を1つ求め，それを w^{k+1}とし，$k \leftarrow k+1$ として＜2＞へ．

図3のように，超球 $L(w^k)$ の半径は単調に増加すること，Dの端点の個数は有限であることからこの算法は明らかに有限回の反復で終了し，問題の最適解を与える．従って手順＜2＞と＜3＞がどのように実行できるかが残された課題である．以下の2節で手順＜2＞と＜3＞のための内部近似法を説明する．

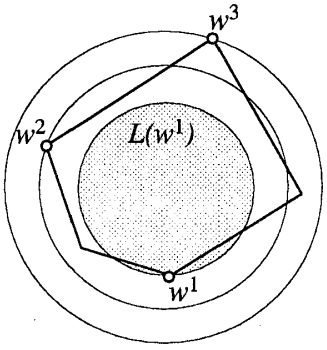

図3　D と $L(w^k)$

4. ポーラー

R^nの集合 Pに対して

$$P^o := \{y \in R^n \mid P\text{の全点 } x \text{ について } y^\mathsf{T}x \leq 1\}$$

と定義される P^oを Pのポーラーと呼ぶ．$y^\mathsf{T}x$ が x の関数として線形であることから，Pが有界な多面体であれば，P^oは Pの端点集合によって

$$P^o = \{y \in R^n \mid P\text{の全端点 } v \text{について } y^\mathsf{T}v \leq 1\}$$

と書くこともできる．さらに，記述を簡単にするため若干の仮定

・P は $\{x \in R^n \mid x \geq 0;\ (a^i)^\mathsf{T}x \leq b_i\ (i = 1\ldots, m)\}$と表現されていおり，原点は Pの非退化端点である

を置くと，原点が等号で満たしている Pの不等式は非負条件だけとなる．他の不等式の両辺に適当な定数を掛ければ右辺定数をすべて1にそろえることができ，

$$P = \{x \in R^n_+ \mid (v^i)^\mathsf{T}x \leq 1\ (i = 1\ldots, m)\}$$

と書くことができる．ここで R^n_+ は R^n の非負象限を表す．このとき

ファセット-端点双対定理

v^iが Pのファセットを決める必要十分な条件は
v^iが P^oの端点であることである

が成り立つ．ただし，v^iがファセットを決めるとは等式 $(v^i)^\mathsf{T}x = 1$ を満たしている Pの点の集合 $P \cap \{x \mid (v^i)^\mathsf{T}x = 1\}$が Pのファセットであることである．

5. 内部近似法

我々の問題 (*) に戻ろう．多面体 Dに非退化端点があると仮定すると適当な正則アフィン変換を施すことによって，前節で Pに対して仮定した2つの仮定を Dが満たすようにできる．ただし，目的関数$-||x||_2$も変換され，その等高線は円（超球）ではなく，図4のように楕円（体）となる．この変換された凹目的関数を

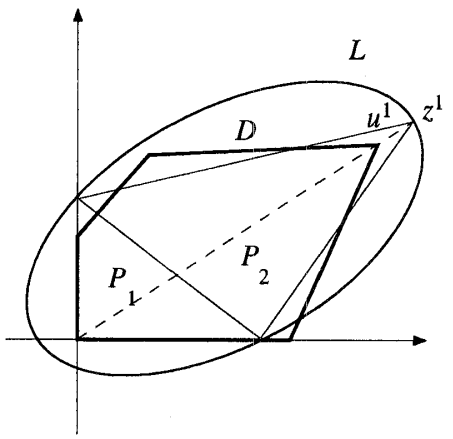

図4　変換された問題に対する内部近似法

$f(x)$ と書く．内部近似法の骨子は，ある探索点 wの決める関数 fのアッパーレベルセット $L_f(w)$ が多面体 Dを含んでいるかどうかの判定を，$L_f(w)$ を内部から近似する構造の簡単な多面体を作って行おうというものである．以下，$L_f(w)$ を単に L と表し，原点がその

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

内点であることを仮定し，内部近似法を下に示す．この算法を3節の算法が作り出す探索点 w^k の決めるレベルセット $L_f(w^k)$ と D に対して用いれば，w^k が問題(*)の最適解であるかどうか判定し，そうでないときには目的関数を改良する D の端点を見つけることができる．

内部近似の多面体 P_ℓ を定義している線形不等式が既知であるとして，非負条件以外のその不等式を $(v^i)^\top x \leq 1\,(i=1,\ldots,m)$ とすると，下の手順<2><3>は線形計画問題

$$\mu(v^i) := \max\{(v^i)^\top x \mid x \in D\}$$

を解くことによって実行できる．実際すべての i について $\mu(v^i) \leq 1$ であれば，D は P_ℓ に含まれ，そうでない場合にはこの線形計画問題の最適解として P_ℓ に含まれない D の端点が得られる．初期の P_1 はシンプレックスなので，その線形不等式表現を作ることは易しい．

内部近似法

<1>（初期化）
n 本の座標軸と L の境界が交わる点と原点との凸包を P_1 とし，$\ell \leftarrow 1$ とする．
<2>
D が P_ℓ に含まれるかどうかを判定し，含まれれば終了（D は L に含まれる）．
<3>（新しい端点）
D が P_ℓ に含まれない場合には $u^\ell \in D \setminus P_\ell$ なる D の端点 u^ℓ を求める．もし $u^\ell \notin L$ なら終了（D は L に含まれない）．
<4>（多面体接続）
原点から u^ℓ に伸びる半直線が L の境界と交わる点を z^ℓ とし，$P_{\ell+1}$ を $P_\ell \cup \{z^\ell\}$ の凸包とする．
$\ell \leftarrow \ell+1$ として，<2>へ．

$P_{\ell+1}$ はこの P_ℓ に外部の点 z^ℓ が付け加えられている．ここで4節のポーラーの定義より

$$P^o_{\ell+1} = P^o_\ell \cap \{y \mid (z^\ell)^\top y \leq 1\}$$

となり，ファセット-端点双対定理より新しい内部近似多面体 $P_{\ell+1}$ のファセットはそのポーラー $P^o_{\ell+1}$ の端点を知ることによって得ることができる．図5に P_1, z^1, P_2 とポーラー P^o_1, P^o_2 を示しておく．同じ小さな図形（□,△等）を付したファセットと端点が対応している．なすべきことは P^o_ℓ の端点集合を元に $P^o_{\ell+1}$ の端点集合を見つけることであるが，これは，外部近似法で必要であった端点列挙と同じ仕事である．

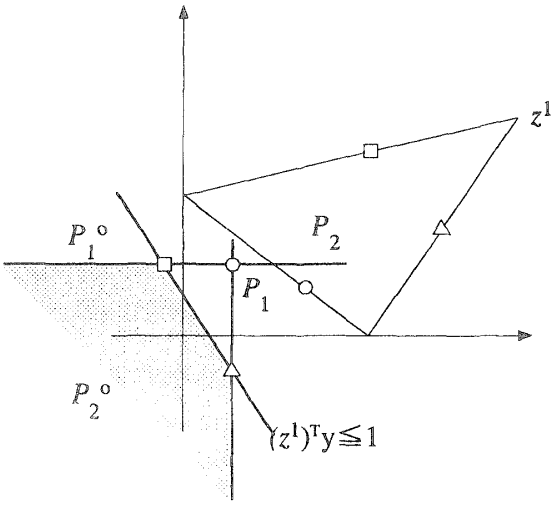

図5　$P_1, z^1, P_2, P_1^o, P_2^o$

6. 端点列挙

外部近似法，内部近似法のいずれの算法でも解く必要があったのは

端点列挙問題

$P = \{x \mid g_i(x) \leq 0\,(i=1,\ldots,m)\}$ の端点集合 $V(P)$ が既知で，$g_{m+1} = (a^{m+1})^\top x - b_{m+1}$ が与えられたとき，$\bar{P} := P \cap \{x \mid g_{m+1}(x) = 0\}$ の端点集合 $V(\bar{P})$ を求めよ

である．一般に多面体 P が与えられた個数以下の端点を持つかどうかを判定する問題は NP-完全であり [3]，上の問題も易しくはない．ただし，我々が解くことを要求されているのは，線形不等式系で与えられた多面体の端点をすべて列挙せよという問題ではなく，すでに端点が既知の多面体を超平面で切った切り口の端点を列挙する問題である．

$V^- := \{v \in V(P) \mid g_{m+1}(v) < 0\}$ とすると，$V(\bar{P})$ は V^- の各端点から伸びる D のエッジを延長した半直線と超平面 $H := \{x \mid g_{m+1} = 0\}$ の交わる点で P に属するものの全体と一致する．図6参照．もちろん V^- を $V^+ := \{v \in V(P) \mid g_{m+1}(v) > 0\}$ に置き換えても同じである．これによって次の Horst-de Vries-Thoai の算法が得られる．

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

Horst-de Vries-Thoai の算法 [8]

$\bar{V} \leftarrow \emptyset$ とする．V^-のすべての端点 u と，そこから伸びるすべてのエッジを延長した半直線について，半直線が H と交わるならその点を w とし，$w \in P$ であれば $\bar{V} \leftarrow \bar{V} \cup \{w\}$ とする．

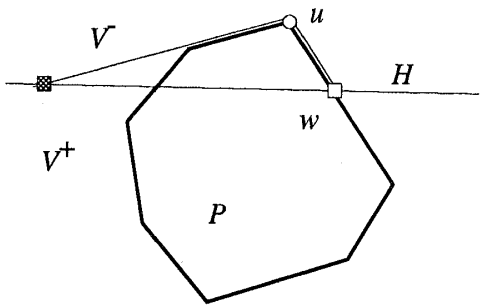

図6　Horst-de Vries-Thoai の算法

V^-の端点に対応する基底を持っていれば，この算法の仕事は大変ではない．

また，すべての端点が非退化であると仮定して，P の端点 u についてその隣接端点の全体を $N(u)$ と書く．また u が等号で満たしている制約の添え字集合を $J(u)$ と書くことにすると，次の隣接リストを用いた算法が考えられる．隣接リストの更新が面倒だが，数値実験では先の Horst-de Vries-Thoai の算法よりも優れた結果が報告されている．

隣接リスト算法 (Chen-Hansen-Jaumard [1])

＜1＞（初期化）
$\bar{V} \leftarrow \emptyset$ とする．
＜2＞（新しい端点）
V^-すべての端点 u とすべての $v \in N(u) \cap V^+$ について，エッジ $[u, v]$ と H の交わり w を求め，
$\bar{V} \leftarrow \bar{V} \cup \{w\}$,
$N(u) \leftarrow (N(u) \setminus \{v\}) \cup \{w\}$,
$N(w) \leftarrow \{u\}$,
$J(w) \leftarrow (J(u) \cap J(v)) \cup \{m+1\}$
とする．
＜3＞（隣接リストの更新）
すべての $u, v \in \bar{V}$ に関して，$|J(u) \cap J(v)| = n-1$ なら，
$N(u) \leftarrow N(u) \cup \{v\}$,
$N(v) \leftarrow N(v) \cup \{u\}$
とする．

7. おわりに

以上，非凸最適化でよく用いられる算法の概略を紹介したが，$-||\cdot||_2$ を凹関数に置き換えれば，これまでの話はほとんどそのまま凹関数最小化問題に適用できる．興味を持ってくださった読者は，この特集の他の論文に目を通していただきたい．さらに，参考文献の [6] や [7] を読まれることをお勧めする．また，[10] は一読に値する．

参考文献

[1] P.Chen, P.Hansen and B.Jaumard, "On-line and off-line vertex enumeration by adjacency list," *Operations Research Letters* 10 (1991) 403-409.

[2] E.W.Cheney and A.A.Goldstein, "Newton's method for convex programming and Tchebycheff approximation," *Numerische Mathematik* 1 (1959) 253-268.

[3] M.E.Dyer, "The complexity of vertex enumeration method," *Mathematics of Operations Research* 8 (1983) 381-402.

[4] J.E.Falk and K.L.Hoffman, "A successive underestimation method for concave minimization problems," *Mathematics of Operations Research* 1 (1976) 251-259.

[5] R.Freund and J.B.Orlin, "On the complexity of four polyhedral set containment problems, " *Mathematical Programming* 33 (1985) 139-145.

[6] R.Horst and P.M.Pardalos, Handbook of Global Optimization, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1995.

[7] R.Horst and H.Tuy, Global Optimization, Springer-Verlag, Berlin, 1993.

[8] R.Horst, J. de Vries and N.V.Thoai, "On finding new vertices and redundant constraints in cutting plane algorithms for global optimization," *Operations Reserach Letters* 7 (1988) 85-90.

[9] J.E.Kelley, "The cutting plane method for solving convex programs," *SIAM* 8 (1960) 703-712.

[10] P.T.Thach, "A nonconvex duality with zero gap and applications," *SIAM Journal on Optimization* 4 (1994) 44-64.

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．