

Study on Global Optimization for Multidimensional Continuous Functions Using Interval Analysis

(区間解析を用いた多変数連続関数の大域的最適化に関する研究)

学位論文内容の要旨

本論文は区間解析を用いた非制約大域的最適化問題について述べたものである。

我々の身の周りの種々の現象を解析する場合、ある目的関数を設定し、それを最小化 (あるいは最大化) するような最適解を求める必要性がしばしば生じる。通常、目的関数は複雑な形をしているため、最適解を解析的に求めることは困難であり、数値解析的な手法をはじめとする多くのアプローチがなされてきた。

Moore (1966) によって提唱された区間解析を利用した大域的最適化もその一つであり、以降、inclusion 関数を用いた最適化の結果が Lipschitz 関数を用いた最適化と同様の結果に帰着されることを示した Ratschek and Rokne (1988) の研究、区間関数を用いた非線形連立方程式の解法に関する Neumaier (1990, 2000) の研究等、様々な研究が行われている。

中でも、Hansen (1980) による区間ニュートン法や区間 quadratic 法 (以降これらを Hansen の手法をよぶことにする) は非線形連立方程式を解く手法として重要な役割を果たしている。Hansen の手法は、丸め誤差や近似などが生じた場合でも、得られた区間に必ず大域的最適解が存在することが保証されるという長所を有しているが、摂動をともなう最適化問題では最適解を含む区間として広い区間を与える可能性がある。言うまでも無く最適解をより正確に求めることは、より狭い区間を求めることと同値であり、その意味で Hansen の手法には改良の余地がある。

そのような背景のもと、本論文では主に、(i) 区間勾配 (interval slope) を用いた新たな最適化法の提案、(ii) 摂動をともなう場合における最適化法の提案、(iii) 統計的解析への適用の3点について論じている。

(i) については、 X を区間とし、

$$f(x); (x \in X)$$

を最小にする問題を考える。このとき、区間勾配 $f[X, x]$ を定義し、まず、それにより関数 f の単調性をチェックする。次に、 $f[X, x]$ の一階微分 $g[X, x]$ を Hansen の手法に適用し、区間の上下限を求める新たな大域的最適化法を提案している。この手法により、従来の Hansen の手法によって得られた区間と較べて、狭い区間を求めることが可能になり、最適解をより正確に得ることができる。

(ii) については、前述のとおり、摂動をともなう最適化問題において、Hansen の方法で得られた区間には最適解が存在することが保証されているが、その区間幅は大きくなる可能性がある。その短所を回避すべく、Jacobian を用いることにより、区間を分離し、摂動の影響

を受けない狭い区間内に最適解が存在するような手法を提案している。

(iii) については、多変量回帰分析において (ii) で提案した手法を適用している。従来の多変量解析で扱うデータは、身体測定における（身長、体重、胸囲、座高）のようにいくつかのスカラー変量の組として与えられるが、本論文では、データがスカラー変量ではなく区間として与えられる区間シンボリックデータに関する多変量回帰分析について考察している。この場合、区間シンボリックデータを摂動をともなう区間データをして見なすことができ、(ii) で提案した摂動を伴う最適化法を適用することが可能となる。本研究では、多変量回帰分析における回帰行列の最小二乗推定を行なっている。

このように、本論文で提案した区間解析を用いた大域的最適化法は、多変数関数の最適問題、摂動をともなう最適化問題、および統計的手法の解法に成果をもたらしている。

本論文は以下の7章から構成されている。

第1章から第3章までは従来の研究成果をレビューしている。

第1章では区間解析の基本的な定義および性質をまとめている。

第2章では区間の演算や区間関数の性質をまとめるとともに、区間線形連立方程式の定義およびその解法について述べている。この節で紹介している Gauss-Seidel 法は、Hansen の手法の基礎となっている。

第3章では、Hansen(1980) の研究成果について詳細に述べている。区間ニュートン法および区間 quadratic 法は、本論文で提案する新たな手法の核となる部分であり、アルゴリズムのみならず、長所、短所についても述べている。

第4章から第6章までが、本論文により提案された新たな研究成果について論じている。

第4章では、区間勾配を Hansen の手法に適用することにより、従来の手法と比較して、より正確で狭い区間内に最適解が存在するような手法を提案している。また、いくつかの多変数関数にこの手法を適用し、その効果について例証している。

第5章では、摂動をともなう最適化問題について議論するとともに、新たな最適化法を提案し、数値例を与えている。

第6章では、区間解析を考慮した統計的解析の背景を述べるとともに、区間シンボリックデータにおける多変量回帰分析の回帰行列の推定問題に、第5章で提案した最適化法を多変量回帰分析に適用し、その効用を論じている。

最後に第7章では、本論文の総括を行なうとともに、今後の問題を提起している。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 佐 藤 義 治
副 査 教 授 宮 腰 政 明
副 査 教 授 工 藤 峰 一
副 査 教 授 栗 原 正 仁

学 位 論 文 題 名

Study on Global Optimization for Multidimensional Continuous Functions Using Interval Analysis

(区間解析を用いた多変数連続関数の大域的最適化に関する研究)

制御問題やデータ解析さらにはオペレーションズ・リサーチ等に見られる最適化問題の多くは多変数関数の大域的最適化問題に帰着する。しかし、実際には複雑な関数の大域的な最適解を得ることは困難であり、ほとんどの場合には大域的な保障のないままに得られた解を用いざるを得ないのが現状である。多変数関数の最適化問題は計算機の発達に伴って発展しつつあるが、現在なお多くの研究が必要な分野であり、様々な工夫が提案されている。一方、計算機を用いる数値計算においては丸め誤差や打ち切り誤差が発生するため、計算結果は常にある程度の誤差を含むものと考えられる。そのため、計算機を用いて大域的な最適化問題の解を得る場合には、真の解が含まれることが保障された区間として評価することが必要となる。

関数値を点で評価するのに対して、ある区間や領域で評価することにより、効率的に最適化を行う目的で区間解析の考え方が導入されて以来、多くの研究が行われている。区間解析法に基づく、多変数関数の大域的な最適化法の基本的な考え方は初期設定として十分に大きな区間またはその直積からなる領域を与え、その領域をつぎのようなステップに基づいて、分割・縮小させ、最終的にその中に大域的な最適解が存在する十分小さい領域を探索するものである。そのアルゴリズムは大きく分けてつぎの四つの部分から成る。第一は、その領域で極値を探索するための従来のニュートン法を区間解析法に拡張したステップ。第二は現在求められている関数の最小値（関数の大域的な最小値を求めるものとする）より大きな値をもつ領域を求め消去するステップ。第三は現在の領域で関数の単調性をチェックし、現在の最小値以上の値から単調増加する領域を検出し、領域の分割・縮小を行うステップ。さらに、第四のステップでは関数の凸性をもつ領域をチェックする。もし、関数がある部分領域で凸性をもたなければ、その領域内に最小値の候補となる極値は存在しないことになり、その領域をさらに探索する必要はなくなるため削除する。

このような算法に基づいて提案された、Hansenn(1980)による区間ニュートン法や区間共役勾配法は、与えられた関数に大域的な最適解が存在するならば、最終的に得られた区間に必ず大域的な最適解が存在することが保証されるという意味で重要な役割を果たしている。しかし、その精度、すなわち解区間の幅の大きさや計算量にはなお多くの改善する余地が

ある。

本論文では、これらの問題点を解決するために、いくつかの概念を導入し、新しいアルゴリズムを提案するとともに計算量の軽減を目的としたものであり、それらの成果はつぎのようにまとめられる。

- (1) 区間において定義された関数に対して、区間勾配の概念を1階および2階の導関数に適用して関数の単調性の評価を行ない、さらに、この概念に基づく区間共役勾配法および区間ニュートン法を用いて関数の凸性の評価および解の存在範囲の評価を行なうことによって、従来の Hansen の手法に比較して、計算量および解区間の改良が得られ、大域的な最適解の精度を向上した。
- (2) 第三のステップにおいて領域を分割・縮小する場合、特に高次元空間においてはどの変数軸に着目して分割するかが全体の計算量に大きな影響を与えるため、計算量を軽減するために、関数の変動が大きな変数の区間を選択するための新たな基準を提案し、従来手法と比較して有効な分割・縮小が行われることを示した。また、この基準をアルゴリズムに適用することにより、最適化に要する計算時間が削減されることを示した。
- (3) 多変数関数に含まれる係数がある摂動を伴う場合の最適化問題について考察している。ここでは摂動のある有界な区間あるいはその直積で表現される場合について、ここで提案した区間最適化法を適用することにより解の存在区間（領域）が得られ、これは係数の摂動に伴う解の感度（変動する範囲）を与える測度と捕らえることができる。一方、得られた解領域に対応する関数の取りうる値の範囲もある区間で表現され、この区間は係数の摂動に伴う関数の感度を示す測度を与えるものと考えられる。この意味において区間解析による最適化手法は関数のパラメータに関する感度分析としての特性を有することを明らかにした。
- (4) 観測される属性の値が区間で与えられるデータに（一般にはシンボリックデータと呼ばれる）対する解析手法を、従来のデータ解析における定式化を区間最適化問題として定式化し、その解法を与えたものである。すなわち、区間データに基づくモデルの当てはめを摂動を伴う関数の最適化問題として捉えることによって、その解法を導出した。

これを要するに、著者は区間解析法に基づく多変数関数の大域的最適化を行う方法に関して、区間およびその直積から成る領域の効率的な縮小法により、解の精度の向上や計算量の軽減を行ない、さらに区間データ解析への応用可能性を示したものであり、情報処理および情報解析学、計算機統計学の発展に寄与するところ大なるものがある。

よって、著者は北海道大学博士（工学）の学位を授与される資格あるものと認める。