博　士（情報科学）　金　光　秀　雄

学位論文題名

多峰関数の数理構造を用いた大域的最適化手法に関する研究

学位論文内容の要旨

「目的関数を制約条件のもとで最小化する」最適化問題は，理工学，情報科学，経済学など広い分野で登場し，現在は計算機により大規模な問題が解かれ，その応用範囲も広がっている。最適化問題を解く手法は，従来その局所解を求める局所最適化法（局所探索法）が主流であったが，近年探索領域全体の中で最適な解を探索する大域的最適化法が注目され，数多くの手法が提案されている。理論的観点からみると，局所探索法では目的関数が凸関数などの定義・性質（数理構造）について多くの研究が行われ，これらの数理構造を利用した効率的で理論的な保証のある手法が提案されている。一方，大域的最適化法の理論的な基盤となる非凸な目的関数（特に多峰関数）の数理構造については，これまで殆ど知られていない。そのため，非凸な関数および複数の解を有する多峰関数の最適化問題で解を見出す手法については，リプシッツ連続などの一般的な関数の条件を用いた手法が存在するが，複数解を有する多峰関数の数理構造を利用した手法は殆ど存在しない。一般に「複数解をもつ関数が多峰関数で，それ以外が単峰関数である」と考えられているが，実は「平坦な領域」をもつ関数の場合，このような直感が成立しないことが今野，山下（1978）によって指摘されていた。しかし，このような問題を解消するような「新しい最適解の概念」についての研究は，これまで行われていない。

本研究では，「有界閉集合上で多変数関数を最小化する問題」に対し「極小値集合」という新しい解概念を提案し，この解の全体集合が従来の「極小点の集合」と「狭義極小点の集合」の間に位置づけられることを示した。次に，この極小値集合の連結成分の個数を「峰数」とし，これから単峰関数や多峰関数を定義した。さらに，ある極小点を含む最大の連結レベル集合として「単峰領域」を定義し，これと関連する数理構造として「単峰領域幅」，「単峰領域半径」，「単峰領域の深さ」等の構造を定めた。また，従来の「準凸関数」や従来の「単峰関数」と本研究で定義した（極小値集合による）「単峰関数」との関係を示した。

微分を用いない局所探索法において，共役な方向群を探索に利用する「共役方向法」が知られおり，その具体的な手法としてSmith法（1962）やPowell法（1964）が提案され，その中でPowell法は探索性能が良好な手法として現在でも広く用いられている。しかし，Powell法は一般の関数に対して探索方向の次元の縮退を避ける修正を行った一方でSmith法が有していた「二次関数の解に有限回で収束する性質が失われる」といった問題を抱えている。この問題を解消する方法としてBrent法（1972）が提案されたが，探索方向を定めるときに固有ベクトルの計算を要するため，現在ではあまり用いられていない。本研究では，「二次関数に対する有限回で収束し」かつ「一般の関数に対して探索方向の縮退を避ける」といった二つの特長を維持しつつ，少ない計算量で探索方向を生成で

きる「平行超平面法」を提案した。また, 本手法が「等高線が楕円となる関数」に対して, 有限回の直線探索で解を見出せることを示した。一方,「共役方向法」より広い枠組みとして「方向集合法」があり, この具体的な方法として「軸方向探索法」や「D.S.C. 法」が知られており, 両手法は現在でも用いられているが, 解への収束性について知られていなかった。本研究では,「方向集合法」の基本アルゴリズムを構成し, この手法の収束性を与えることより「方向集合法」を含む「軸方向探索法」や「D.S.C. 法」が, 微分可能な狭義凸関数の最小点に収束することを示した。

大域的最適化法は 1960 年代から研究され,1975 年と 1978 年に L.C.W.Dixon 等による“towards global optimisation (II)”から「大域的最適化」という分野が注目され始め,1980 年代には,1983 年の SA 法の提案や 1989 年に Goldberg による GA 法から, ヒューリスティックスな枠組みでの手法が注目された。1990 年代以降は, 自然・生命・社会の観点から DE 法 や PSO 法等の提案や, 複数の手法を組み合わせたメタヒューリスティックスな枠組みでの手法が数多く提案されるとともに, 従来からの決定論的および確率論的な枠組みの手法についても多くの手法が提案されている。本研究では, まず, 一変数多峰関数に対し探索区間上に一定間隔でサンプルし, 隣接 3 点での関数値から極小点を含む区間を見出し, 見出した区間に局所探索を適用する「複数極小点探索手法」を提案した。さらに, これらの区間の中でこれまでの最小値に達する見込みのない区間を除去した後に局所探索を適用することで, 最小点を効率的に見出す「最小点探索手法」を提案した。また, 両手法でサンプル点の間隔が「単峰領域半径」の半分以下のときに全ての極小点を含む区間を見出せることを示した。次に, 上下限制約付大域的最適化問題に対して, 複数点に対し局所探索を適用する多点局所探索法 (多スタート局所探索法) を検討した。この手法は従来確率論的な枠組みに入り古くから知られている方法であるが, 本研究では, 多峰関数の数理構造を利用し大域解を見出す理論的保証のある手法を提案した。その一つとして, 多点局所探索法が既知の解に重複収束する問題点を解消するために「同一峰上点除去」というステップを取り入れた多点局所探索法を提案する。この「同一峰上点除去」ステップは著者 (1982) により提案されたが, 最近, メタヒューリスティックスの分野で R.K.Ursem(1999) により“hill-valley function”ステップというほぼ同様の考え方を用いた手法が提案されている。しかし, 両者のステップが「どのような条件で既知解へ重複収束を回避できるか」については, これまで峰の数理構造が未知だったため, 示すことができなかった。ここではサンプル点中の最大の関数値で決まる連結レベル集合間の距離が,「同一峰上点除去」における点の間隔より大きいとき, このステップが正しく働くことを示した。さらに, この事実を用いて本研究で示した多点局所探索法がある条件のもとで最小点を必ず見出すことを示した。

一般の多峰関数での大域的最適化では全域探索が基本となるので, 問題の次元が増えると「次元の呪い」の問題が発生し, 大規模問題に適用することが困難となる。本研究では, 区間上で「極小点が単峰列」となり「各単峰領域が等しい」という特殊な構造をもつ一変数多峰関数に対して, その最小点を効率的に見出しかつ最小点を見出す理論的な保証のある手法を提案した。この方法を, 上下限制約を有する変数分離構造をもつ n 変数多峰関数に対し,n 回の直線探索の適用で最小点を見出せる手法を提案し, 本手法が従来法より大幅に効率的であることを数値例で示した。また, この制限された問題での「極小値が単峰列」,「単峰領域が等しい」および「変数分離性」の条件を緩和した問題に対して, 提案手法を改良し効率的な手法を提案し, 本手法が効率的で信頼性が高いことを数値例により示した。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 宮 腰 政 明
副 査 教 授 工 藤 峰 一
副 査 教 授 今 井 英 幸

学 位 論 文 題 名

多峰関数の数理構造を用いた大域的最適化手法に関する研究

与えられた目的関数をある制約条件のもとで最小化する問題は，最適化問題と呼ばれ，その解を求める方法は現在情報科学における基盤的な要素の一つとなっている．

最適化問題を解く手法は，その局所解を求める局所最適化法（局所探索法）が主流であったが，近年，探索領域全体の中で最適な解を探索する大域的最適化法が注目され，数多くの手法が提案されている．局所探索法では目的関数の凸性などの数理構造について多くの研究が行われ，これらの数理構造を利用し，効率的に局所解を見出す理論的な保証のある手法が提案されている．一方，大域的最適化法に関して，理論的な基盤となる非凸な目的関数（特に多峰関数）の数理構造についてこれまで殆ど知られていない．非凸関数および複数の解を有する多峰関数の最適化問題で解を見出す手法は，リプシッツ連続などの一般的な関数の条件を用いた手法が存在するが，複数解を有する多峰関数の数理構造を利用した手法は殆ど存在しない．また，従来の非凸関数や単峰関数の定義では対応できない場合があることが指摘されている．しかし，このような問題点を解消するような新しい最適解や単峰性，多峰性の概念自体についての研究も行われていないのが現状である．

本研究は，このような背景から，複数解を有する多峰関数の最適化問題の解を見出す手法を構成するために新しい解概念を導入し，この解概念をもとに多峰関数の定義とその数理構造を解明する研究，これらの数理構造を踏まえた局所最適化問題に関する新しい手法を構成する研究，大域的最適化に関する新しい手法を構成する研究に関わる三つの研究成果を集約したものである．

第一の研究では，有界閉集合上で多変数関数を最小化する問題に対し局小値集合という新しい解概念を提案し，この解の全体集合が従来の局小点の集合と狭義局小点の集合の中間にあることを示している．次に，この局小値集合の連結成分の個数を峰数とし，これから単峰関数や多峰関数を定義し，ある局小点を含む最大の連結レベル集合として単峰領域を定義し，これと関連する数理構造として単峰領域幅，単峰領域半径，単峰領域の深さ等の概念を定義し，従来の準凸関数や単峰関数と本研究で定義した局小値集合による単峰関数との関係を明らかにしている．

第二の研究では，微分を用いない局所探索法において，共役な方向群を探索に利用する共役方向法が知られているが，幾つかの従来法は二次関数の解に有限回で収束する性質が失われるという問題があった．本研究では，二次関数に対し有限回で収束し，かつ，一般の関数に対して探索方向の縮退を避けるという二つの特長をもち，少ない計算量で探索方向を生成できる平行超平面法を提案し，等

高線が楕円となる関数に対して本手法が有限回の直線探索で解を見出すことを示している. 一方, 共役方向法より広い枠組みである方向集合法を用いた軸方向探索法や D.S.C. 法に関し, 解への収束性について知られていなかった. 本研究では, 方向集合法の基本アルゴリズムを構成し, この手法の収束性を与えることより軸方向探索法や D.S.C. 法が, 微分可能な狭義凸関数の最小点に収束することを示している.

第三の研究では, 大域的最適化法に関し, まず, 一変数多峰関数に対し探索区間上に一定間隔でサンプルし, 隣接 3 点での関数値から局小点を含む区間を見出し, その区間に局所探索を適用する複数局小点探索手法を提案し, さらに, 最小点を効率的に見出す最小点探索手法を提案している. また, 両手法で全ての局小点を含む区間を見出せる多峰関数の数理構造に関わる条件を明らかにしている. 次に, 多変数の上下限制約付大域的最適化問題に対して, 複数点に対し局所探索を適用する多点局所探索法を検討している. この手法は従来確率論的な枠組みの中で知られているが, 本研究では, 多峰関数の数理構造を利用し大域解を見出す理論的保証のある手法を提案している. この手法が既知の解に重複収束する問題点を解消するために同一峰上点除去という手順を提案している. これまで峰の数理構造が未知なため, この手順がどのような条件で既知解へ重複収束を回避できるかを示すことができなかったが, この手順が有効となる多峰関数の数理構造に関わる条件を明らかにし, この事実を用いて本研究で示した多点局所探索法がある条件のもとで最小点を必ず見出すことを示している.

これを要するに, 著者は, 複数解を有する多峰関数に関わる数理構造を解明し, これらの数理構造を踏まえた局所最適化問題や大域的最適化に関する新しい手法を提案し, これらの手法が最小点を必ず見出すことができる条件を各手法に対して明らかにしており, 多峰関数の数理構造を用いた大域的最適化手法に新知見を得たものであり, 情報科学, 特に, 情報数理学に貢献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 (情報科学) の学位を授与される資格あるものと認める.