# 区間計算を利用した大域的最適化

3D−10

藤井康雄　市田浩三
京都大学総合情報メディアセンター　京都産業大学経済学部

## 1．はじめに

我々は、区間計算を最適化問題[1]、多目的最適化問題[2]に適用して、多峰性多変数関数の大域的最適解を求めるアルゴリズムを検討してきた。この結果区間計算あるいは精度保証付数値計算は、関数の大域的最適化問題を解く有効な数値計算の方法の一つであることが確認された[3]。ここでは、区間計算を利用して最適化問題を解くとき問題となる探索領域の縮小化について検討した。

## 2．区間計算による最適化

これまでに検討した最適化の手法は、区間計算では、変数領域の分割と区間関数値の比較、制約条件の判定及び区間に拡張したニュートン法を用いて、大域的な最適解が存在しない領域を捨てていくことによって、最適解を求めるものである。

[アルゴリズム]

（1）多次元空間の超直方体として与えられた初期領域（ボックス）を順次分割していく。

（2）各ボックスにおける関数値を比較して、大域的な最適解が存在し得ないボックスを捨てる。

（3） 残された各ボックスについて、ニュートン法が適用できればその解を保存し、適用できなければさらに分割する。

（4）予め定めた終了条件が満たされれば終了する。

本アルゴリズムには、次のような問題点が存在する。

(1) 制約条件がない場合、最初の変数領域は極めて大きな領域とする必要がある。

(2) 目的関数によっては区間乗除算を多用する結果、区間幅が拡大し、最適解を含まないボックスがなかなか除去されない。

(3) ニュートン法で極値を計算するのに、ヘシアン行列、またはその近似行列の区間行列式の値が0を含む場合、区間ニュートン法が適用できない。

(4) 目的関数の評価回数が多くなる。

## 3．アルゴリズムの例示

前記のような問題を解決するのに、ランダム法を併用した手法を採りいれる。

いま、次の Rosenbrock 関数の最小値を求めることを考える。

$$f(x_1,x_2)=100(x_2-x_1{}^2)^2+(1-x_1)^2$$

この式を、区間変数を用いて評価する。この時の目的関数を評価する各ステップは、以下の順序になる。

$$X_1=(-\infty,\infty),$$
$$X_2=(-\infty,\infty),$$
$$X_3=X_1\times X_1=[0,\infty),$$
$$X_4=1-X_1=(-\infty,\infty),$$
$$X_5=X_2-X_3=(-\infty,\infty),$$
$$X_6=X_5\times X_5=[0,\infty),$$
$$X_7=100\times X_6=[0,\infty),$$

---

Global Optimization using Interval Computation.
Yasuo FUJII*, Kozo ICHIDA**.
*) Center for Information & Multimedia Studies, Kyoto University, Kyoto 606-8501
**)Faculty of Economics,Kyoto Sangyo University, Kamigamo, Kyoto 603-8555.

$$X_8 = X_4 \times X_4 = [0,\infty),$$
$$F = X_7 + X_8 = [0,\infty).$$

次に、任意の 1 点を乱数で選びその点を出発点として関数値を計算する。得られた結果が例えば原点とすると、関数値は1であるから、最小値を含む区間変数の各ステップを逆順に計算し、前ステップの領域と比較し縮小させる。

$F = [0,1]$,
$X_7 = F - X_8 = ([0,1]-[0,\infty)) \cap [0,\infty) = [0,1]$,
$X_8 = F - X_7 = [0,1]$,
$X_6 = X_7 / 100 = [0,0.01]$,
$X_5 = [-0.1,0.1]$,
$X_4 = [-1,1]$,
$X_1 = [0,2]$,
$X_3 = [0,4]$,
$X_2 = [-0.1,4.1]$.

この結果探索区間は $X_1 \times X_2 = [0,2]\times[-0.1,4.1]$ に狭められ、この区間内で再度乱数を発生させて計算した関数値(いくつかの点における関数値を計算して、その中の最小の関数値を採るのがよい)によって計算を繰り返すと探索区間はさらに縮小される。探索区間が小さくなれば、区間に拡張したニュートン法が適用できる可能性が高くなり、精度のよい解を得ることができる。

もし、探査区間の領域が小さくならなければ、変数の領域を分割して、本アルゴリズムを両者の部分領域に適用する。

## 4．数値実験例

$X_1 = [-100,100], X_2 = [-100,100]$, の範囲で Rosenbrock 関数の最小値を求める。このときの逆計算時における変数領域の縮小状況を示す。

1回目：$X_1$ =[ −0.10253902657219491d+02,
0.12253902657219491d+02],
$X_2$ =[ −0.11253902657219492d+01,
0.10000000000000000d+03],
$F$ =[ 0.0, 0.22887970107876388d+7].

2回目：$X_1$ =[ −0.27407994073006581d+00,
0.22740799407300658 5d+01],
$X_2$ =[ −0.12740799407300660d+00,
0.52988475709038667d+01],
$F$ =[ 0.0, 0.28940183766275 19d+4].

3回目：$X_1$ =[ 0.84321410663153795d+00,
0.11567858933684620d+01],
$X_2$ =[ 0.84321410663153795d+00,
0.13538321924331171d+01],
$F$ =[ 0.0, 0.41346615116421248d+2].

さらに逆順の計算を進めてもよいが、区間に拡張した Newton 法により、最適解を得てもよい。

## 5．おわりに

ランダム法を併用した区間計算による大域的最適化の方法を示した。本手法は、比較的目的関数の評価回数が少なくて最適解に到達する。

目的関数が多峰性で複雑であれば、ランダム法に代えて Newton 法を利用して得た極値を使い、関数値を求め、逆順のアルゴリズムを適用する手法の方が有効である。

## 参考文献

[1]Y.Fujii and K.Ichida:Maximization of multi-variable functions using interval analysis, Interval Mathematics 1985(K.Nickel, ed), Springer-Verlag,Lecture Notes in Computer Sciences. 212, PP.17-26(1986).

[2]K.Ichida and Fujii:Multicriterion optimization using interval analysis,Computing,44,pp.47-57 (1990).

[3]Kearfott, R. B.: Rigorous Global search: Continuous Problems, Kluwer , 1996.