数理モデル化と問題解決　1－6
（１９９５．５．１８）

二変数多峰性関数の最小値探索アルゴリズム

金光秀雄* 新保 勝**
*北海道教育大学 函館校 **北海道大学 工学部

Abstract

複数の孤立極少点を矩形探索領域にもつ二変数多峰性関数の最小値を探索するアルゴリズムを提案する．本稿では，各極小点に対する強準凸領域を新たに定義し，4隣接格子点が極小点を囲むための条件を導く．さらに，この領域の極小点の近傍で，「正定値二次形式で近似でき，その主軸が座標軸と平行」を仮定したときに，極小点を囲むための条件として，中心点とその隣接格子点で成立する関数値間の関係を導く．次に，この関係を用いて，4つのステップ：(1) 探索領域の格子上に点を生成，(2) 各格子点での関数値がその8隣接格子点での関数値より小さい点を検出，(3) 検出された格子点と8隣接格子点からなる9点での関数値を用いて二次形式近似を適用し精度の高い近似極小点の計算，(4) 近似極小点が新規極小点であるかの判定，からなるアルゴリズムを提案する．

An Algorithm for Seeking a Global Minimal Value of 2-Dimensional Multimodal Functions

Hideo KANEMITSU* Masaru SHIMBO**

*Hakodate Campus, Hokkaido University of Education, Hakodate 040 Japan.
**Faculty of Engineering, Hokkaido University, Sapporo 060 Japan.

Abstract

We propose an algorithm for seeking a global minimal value of 2-dimensional multimodal functions which have multiple isolated local minima in a rectangular domain. In this paper, we newly define a strongly quasiconvex domain of each local minimum, and derive the condition such that 4-neighbour points bracket a local minimum. When we assume that a function can approximate to a positive definite quadratic function and it's main axes is parallel to coordinates in the neighbourhood of the local minimum of each strongly quasiconvex domain, we derive the relationships between function values that holds in a grid point and it's neighbour grid points as a condition for bracketing a local minimum. By using the relationships we propose an algorithm that consist of following four steps: (1) genarating grid points in search domain, (2) finding the grid point with having smaller value than values of 8-neighbour grid points, (3) caluculating the approximate local minimum with heigher degree of accuracy by applying a quadratic approximation function to the function values of 9 points that consist of the detecting grid point and it's 8-neighbour grid points, (4) checking whether the approximate local minimum is new founded local minimum.

1 はじめに

上下限制約を有する二変数多峰性関数の大域的最小値を探索するためのアルゴリズムは，多変数多峰性関数の大域的最小値を求めるアルゴリズムを構成する際の一つの礎として重要であると考えられる．大域的最小値を探索するアルゴリズムは，確率論的な手法と決定論的な手法があるが，本稿では決定論的なアルゴリズムを取り扱う．決定論的なアルゴリズムとして，関数の Lipschitz 条件を用いて最小点が存在しない領域を削除していく手法 [2,3,4,7] が中心である．しかしながら，この手法はアルゴリズムの構成が複雑で,Lipschitz 条件の与え方が難しい．一方，確率論的な手法の一つに，ランダムな点を探索領域に生成し，それぞれの点での関数値がその点の k 個の近傍点の関数値よりも小さい点を，局所最適化手法に与える初期点とする Törn らのアルゴリズム [6] がある．しかしながら，この手法は，それぞれの点での k 個の近傍点を求めるための計算時間を要する上に，最小値を見いだす条件が見い出されていない．

本研究は，二変数多峰性関数の隣接点での関数値間でどのような関係を満足すれば極小点を囲むことができるかを考察し，この関数値間の関係を利用した決定論的なアルゴリズムの構成を試みたものである．本アルゴリズムは，格子点の関数値を評価して，各格子点での関数値がその点の隣接8格子点での関数値よりも小さい点を検出する部分が，Törn らのアルゴリズムと異なる．これにより，近傍点を求める計算が不要になり，アルゴリズムの構成も非常に容易で，ある条件のもとで全ての極小点を見い出すことが保証されるという特徴を有している．

本稿では準備として，問題，記法および強準凸領域等の定義を 2 節で与える．3 節で，準凸領域上にある 4 隣接格子点が極小点を囲むための条件を導く．さらに，各強準凸領域上の極小点の近傍で「二次形式で近似でき，その主軸が座標軸と平行」という仮定をしたときに，中心点とその隣接格子点が極小点を囲む条件として導びかれた関数値間の関係を示す．4 節で，3 節の関係を用いたアルゴリズムを提案し，全ての極小点を見い出すための条件を導く．最後に，5 節でまとめと今後の課題について述べる．

2 準備

2.1 問題

本論で扱う，二変数多峰性関数の最小値探索問題 (P) は，以下のように定式化される．

$$(1)\quad f(x_1, x2) = f(\boldsymbol{x}) \to min,\ \ \boldsymbol{x} \in D^2 \subseteq R^2; \quad \text{where,}\quad D^2 = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2].$$

このとき，$f : D^2 \to R$ は，連続で M 個の孤立極小点 $\overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k$ $(k = 1, 2, \ldots, M)$ を D^2 の内部に有することを仮定する．このとき，その極小点集合および極小点での関数値の集合を，それぞれ $\overset{*}{X}$, $\overset{*}{F}$ とする．なお各孤立極小点 $\overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k$ は，ある開球 $B(\overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k; \delta_k)$ が存在して，

$$(2)\quad f(\overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k) < f(\boldsymbol{x}_b), \forall \boldsymbol{x}_b \in S \cap B(\overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k; \delta_k) \backslash \overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k; \quad \text{where,}\ B(\overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k; \delta_k) = \{\boldsymbol{x} |\ \| \boldsymbol{x} - \overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k \| < \delta_k\}.$$

を満足する点をいう．また，問題 (P) の極小点集合 $\overset{*}{X}$ とその添字集合 $I(X^*)$ ，最小値 $\overset{**}{f}$ および最小点 $\overset{**}{\boldsymbol{x}}$ は，それぞれ次のようになる．

$$(3)\quad \begin{cases} \overset{*}{X} = \{\, \overset{*}{\boldsymbol{x}}_1, \overset{*}{\boldsymbol{x}}_2, \ldots, \overset{*}{\boldsymbol{x}}_M \,\};\ \ I(\overset{*}{X}) = \{\, 1, 2, \ldots, M \,\}; \\ \overset{**}{f} = \min_{k \in I(\overset{*}{X})} \{\, f(\overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k) \,\};\ \ \overset{**}{\boldsymbol{x}} = \{\, \overset{*}{\boldsymbol{x}}_m \mid \overset{*}{\boldsymbol{x}}_m = arg\min_{k \in I(\overset{*}{X})} \{\, f(\overset{*}{\boldsymbol{x}}{}^k) \,\} \,\}. \end{cases}$$

2.2 記法

(I). 有限個の要素からなる集合 B の j 番目の要素, 集合 B の添字集合および集合 B の要素の個数を, それぞれ $B_j, I(B), |B|$ で表す.

(II). x_1 成分が 1 の単位ベクトル $(1,0)$ を e^1, x_2 成分が 1 の単位ベクトル $(0,1)$ を e^2 で表す.

(III). $\boldsymbol{x}$ を中心とし, x_1 成分に関して $\pm h_1$, x_2 成分に関して $\pm h_2$ から構成される矩形領域を $D^2(\boldsymbol{x}; h_1, h_2)$ で表す. このとき, $D^2(x; h_1, h_2) = [x_1 - h_1, x_1 + h_1] \times [x_2 - h_2, x_2 + h_2]$ となる.

(IV). x_1 軸と x_2 軸の間隔をそれぞれ, h_1, h_2 としたとき, x_1 軸の i 番目, x_2 軸の j 番目の格子点およびその点での関数値を $\boldsymbol{x}^{ij}$, f^{ij} で表す. このとき, $\boldsymbol{x}^{ij} = (a_1 + ih_1, a_2 + jh_2)$, $f^{ij} = f(\boldsymbol{x}^{ij})$ となる.

(V). さらに, (IV) において, $\boldsymbol{x}^{ij}$ の 4 隣接格子点とその関数値を $x^{ij,k}(k = 1 \ldots 4)$, $f^{ij,k}(k = 1 \ldots 4)$ で表し, 4 隣接格子点の集合およびこれらの点での関数値の集合を, それぞれ次のように表す.

$$(4) \quad \begin{cases} \boldsymbol{X}^{ij}(4) &= \{\boldsymbol{x}^{ij,k} \mid \boldsymbol{x}^{ij,k} = \boldsymbol{x}^{ij} + s_k^1 h_1 e^1 + s_k^2 h_2 e^2, (k = 1 \ldots 4)\} \\ F^{ij}(4) &= \{f^{ij,k} \mid f^{ij,k} = f^{ik,jk},\ ik = i + s_k^1,\ jk = j + s_k^2,\ (k = 1 \ldots 4)\} \\ & \quad where,\ s^1 = \{1, -1, -1, 1\},\ s^2 = \{1, 1, -1, -1\}. \end{cases}$$

同様に, $\boldsymbol{x}^{ij}$ の 8 隣接格子点とその関数値を $x^{ij,k}(k = 1 \ldots 8)$, $f^{ij,k}(k = 1 \ldots 8)$ で表し, 8 隣接格子点とその関数値の集合を, それぞれ次のように表す.

$$(5) \quad \begin{cases} \boldsymbol{X}^{ij}(8) &= \{\boldsymbol{x}^{ij,k} \mid \boldsymbol{x}^{ij,k} = \boldsymbol{x}^{ij} + s_k^1 h_1 e^1 + s_k^2 h_2 e^2, (k = 1 \ldots 8)\} \\ F^{ij}(8) &= \{f^{ij,k} \mid f^{ij,k} = f^{ik,jk},\ ik = i + s_k^1,\ jk = j + s_k^2,\ (k = 1 \ldots 8)\} \\ & \quad where,\ s^1 = \{1, 1, 0, -1, -1, -1, 0, 1\},\ s^2 = \{0, 1, 1, 1, 0, -1, -1, -1\}. \end{cases}$$

また, 格子点 $\boldsymbol{x}^{ij}$ の格子点を $\boldsymbol{x}^{ij,0}$ として, その 8 隣接格子点に加えた集合を $\boldsymbol{X}^{ij}(9)$ で表し, これらの関数値の集合を $F^{ij}(9)$ で表す. すなわち, これらの集合は以下のようになる.

$$(6) \quad \begin{cases} \boldsymbol{X}^{ij}(9) &= \{\boldsymbol{x}^{ij,0}, \boldsymbol{x}^{ij,1}, \ldots, \boldsymbol{x}^{ij,8}\} \\ F^{ij}(9) &= \{f^{ij,0}, f^{ij,1}, \ldots, f^{ij,8}\} \\ & \quad where, \boldsymbol{x}^{ij,0} \equiv \boldsymbol{x}^{ij},\ f^{ij,0} \equiv f^{ij}. \end{cases}$$

(VI). 集合 A へ複数の要素 $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$ を設定するとき, $A \leftarrow (a_1, a_2, \ldots, a_n)$ で表記する. 入力変数 $(iv_1, iv_2, \ldots, iv_p)$ を与えて, $Algo\_name$ で識別されるアルゴリズムを適用し, 出力変数 $(ov_1, ov_2, \ldots, ov_q)$ が得られたことを, 次のように表記する.

$$(ov_1, ov_2, \ldots, ov_q) \leftarrow Algo\_name(iv_1, iv_2, \ldots, iv_p)$$

2.3 定義

定義 1 レベル集合, 連結レベル集合: $L(\alpha)$, $L_c(\alpha; \boldsymbol{x})$
関数 f において, その値が α より小さい点 $\boldsymbol{x}$ の集合をレベル集合と呼び, 次式

$$(7) \quad L(\alpha) = \{\boldsymbol{x} | f(\boldsymbol{x}) \leq \alpha\}$$

で表される．また，このレベル集合 $L(\alpha)$ において，点 $\boldsymbol{x}$を含む連結成分を連結レベル集合を呼び，$L_c(\alpha;\boldsymbol{x})$ で表す．

各極小点 $\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k$ における強準凸領域を以下のように定義する．

定義 2 各極小点における強準凸領域： $L_{qc}(\overset{*}{\alpha};\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)$

$$
(8) \quad \begin{aligned} & L_{qc}(\overset{*}{\alpha};\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k) = \{\, \boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in L_c(\overset{*}{\alpha};\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k) \,\} \\ & \quad where,\ \overset{*}{\alpha} = max\,[\, \overline{\alpha} \mid f((1-\lambda)x^1 + \lambda x^2) < max\{f(x^1), f(x^2)\}, \\ & \qquad \forall\lambda \in (0,1),\ \forall \boldsymbol{x}^1 \neq \forall \boldsymbol{x}^2 \in L_c(\alpha;\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k),\ \alpha \in [f(\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k), \overline{\alpha}]\ ] \end{aligned}
$$

強準凸領域 $L_{qc}(\overset{*}{\alpha};\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)$ が，次の性質をもつことが知られている [1]．

性質 1). 任意の $\alpha^1 < \alpha^2 \in [f(\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k), \overset{*}{\alpha}]$ で， $L_c(\alpha^1;\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k) \subset L_c(\alpha^1;\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)$ ；

性質 2). 関数が微分可能ならば， $f(\boldsymbol{x}^1) < f(\boldsymbol{x}^2)$ を満足する任意の点 $\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{x}^2$ に対して，

$$
(9) \quad (\boldsymbol{x}^1 - \boldsymbol{x}^2)\nabla^{\mathsf{T}} f(\boldsymbol{x}^2) < 0.
$$

3 極小点を囲む条件

強準凸領域上の点が極小点を含むための条件を以下に示す．

定理 1 矩形領域 $D^2(\boldsymbol{x}^{ij};h_1,h_2) \subset L_{qc}(\overset{*}{\alpha};\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)$ を構成する 4 隣接格子点を $\boldsymbol{x}^{ij,m}(m=1\ldots4)$ とする．このとき，f が微分可能で，4 隣接格子点が極小点を含む，すなわち $\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k \in D^2(\boldsymbol{x}^{ij};h_1,h_2)$ となるための条件は次式で与えられる．

$$
(10) \quad \begin{aligned} & (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{ij,m})\nabla^{\mathsf{T}} f(\boldsymbol{x}^{ij,m}) \geq 0,\ \exists \boldsymbol{x} \in C^m (m = 1\ldots4) \\ & \quad where, C^m = \{\, \boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{ij,m} + \lambda^1 s^1_m e^1 + \lambda^2 s^2_m e^2,\ \lambda^1 > 0, \lambda^2 > 0, \\ & \qquad s^1 = \{1,-1,-1,1\},\ s^2 = \{1,1,-1,-1\}\,\}. \end{aligned}
$$

証明) $m=1$ の場合のみ証明する．
$\boldsymbol{x}^{ij,1} = \overset{*}{\boldsymbol{x}}^k$ の場合は，$\nabla^{\mathsf{T}} f(\boldsymbol{x}^{ij,1}) = 0$ より， $(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{ij,1})\nabla^{\mathsf{T}} f(\boldsymbol{x}^{ij,1}) = 0$ が成立．
$\boldsymbol{x}^{ij,1} \neq \overset{*}{\boldsymbol{x}}^k$ の場合は，背理法により (10) 式が成立しないことを仮定して矛盾を導く．背理法の仮定より，

$$
(11) \quad (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{ij,1})\nabla^{\mathsf{T}} f(\boldsymbol{x}^{ij,1}) < 0,\ \forall \boldsymbol{x} \in C^1,
$$

となる．(9) 式より，

$$
(12) \quad f(\boldsymbol{x}) < f(\boldsymbol{x}^{ij,1}),\ \forall \boldsymbol{x} \in C^1,
$$

となる．また，$C^1 = \{\, \boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{ij,0} + \lambda^1 e^1 + \lambda^2 e^2,\ \lambda^1 > 0,\ \lambda^2 > 0 \,\}$ より次式が成立する．

$$
(13) \quad \begin{cases} L_c(f(\boldsymbol{x}^{ij,1});\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k) \cap C^1 = \emptyset, \\ L_c(f(\boldsymbol{x}^{ij,1});\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k) \cap (\, C^1 + \{\boldsymbol{x}^{ij,1}\}) \neq \emptyset. \end{cases}
$$

よって，$C^1 + \boldsymbol{x}^{ij,1}$ と $L_c(f(\boldsymbol{x}^{ij,1});\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)$ は $\boldsymbol{x}^{ij,1}$ で接している．一方性質 1) より，任意の$\varepsilon > 0$ で，

$$
(14) \quad L_c(f(\boldsymbol{x}^{ij,1});\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k) \subset L_c(f(\boldsymbol{x}^{ij,1} + \varepsilon);\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k),
$$

が成立する．(13) 式より，

(15) $\quad L_c(f(\boldsymbol{x}^{ij,1}+\varepsilon);\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)\cap C^1\neq\emptyset$

となるが，これは (12) 式に反し，矛盾. $\qquad$ *Q.E.D.*

以上の定理は，極小点を囲むための必要条件であるため，(10) 式の条件が成立したからといって，極小点を囲んでいるとは限らない.

そこで，各強擬凸領域上の最小点の近傍で次のような二次形式近似ができることを仮定し，その領域を $L_{qd}(\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)$ で表しておく.

$$(16)\quad \begin{cases} f_q(\boldsymbol{x};\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k) & \equiv\ f_q(x_1,x_2;\overset{*}{x}{}_1^k,\overset{*}{x}{}_2^k) \\ & \equiv\ a(x_1-\overset{*}{x}{}_1^k)^2+2b(x_1-\overset{*}{x}{}_1^k)(x_2-\overset{*}{x}{}_2^k)+c(x_2-\overset{*}{x}{}_2^k)^2+f(\overset{*}{x}{}_1^k,\overset{*}{x}{}_2^k). \end{cases}$$

このとき，$L_{qd}(\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)$ 上にある矩形領域 $D^2(\boldsymbol{x}^{ij};h_1,h_2)$ が極小点を囲む条件を以下に示す.

定理 2 矩形領域 $D^2(\boldsymbol{x}^{ij};h_1,h_2)\subset L_{qd}(\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)$ を構成する i,j 番目の格子点 $\boldsymbol{x}^{ij,0}$ とその 4 隣接格子点を合わせて，$\boldsymbol{x}^{ij,m}\in \boldsymbol{X}^{ij}(8)$, $(m=0,1,3,5,7)$ とし，f_q が (16) 式において $b=0$ とする．このとき，次式を満足すれば，4 隣接格子点が極小点を含む，すなわち $\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k\in D^2(\boldsymbol{x}^{ij};h_1,h_2)$ となる.

(17) $\quad f(\boldsymbol{x}^{ij,0})<f(\boldsymbol{x}^{ij,m}),\ (m=1,3,5,7).$

証明) $m=1,5$ の場合は

(18) $\quad f(\boldsymbol{x}^{ij,0})<f(\boldsymbol{x}^{ij,1})$ かつ $f(\boldsymbol{x}^{ij,0})<f(\boldsymbol{x}^{ij,5}),$

となる．(6) 式より，

(19) $\quad \boldsymbol{x}^{ij,1}=(x_1^{ij,0}+h_1,\ x_2^{ij,0});\ \boldsymbol{x}^{ij,1}=(x_1^{ij,0}-h_1,\ x_2^{ij,0}),$

だから，これを二次形式関数 f_q で $b=0$ として (16) 式に代入して整理すると，(17) 式は

(20) $\quad \overset{*}{x}{}_1^k<x_1^{ij,0}+\dfrac{h_1}{2}<x_1^{ij,1}$ かつ $\overset{*}{x}{}_1^k>x_1^{ij,0}-\dfrac{h_1}{2}>x_1^{ij,5}.$

よって，$\overset{*}{x}{}_1^k\in[x_1^{ij,5},\ x_1^{ij,1}]$.

$m=3,7$ の場合も同様にして，

(21) $\quad \overset{*}{x}{}_2^k<x_2^{ij,0}+\dfrac{h_2}{2}<x_1^{ij,3}$ かつ $\overset{*}{x}{}_2^k>x_2^{ij,0}-\dfrac{h_1}{2}>x_1^{ij,7},$

よって，$\overset{*}{x}{}_2^k\in[x_2^{ij,7},x_2^{ij,3}]$. 以上から，$\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k\in D^2(\boldsymbol{x}^{ij};h_1,h_2)=[x_1^{ij,5},x_1^{ij,1}]\times[x_2^{ij,7},x_2^{ij,3}]$. $\qquad$ *Q.E.D.*

定理 2 は二次形式関数 f_q において，$b=0$ とおいた条件で成立しているが，これは近似した二次形式関数 f_q の主軸が x_1,x_2 軸と平行であることを意味している．なお，i,j 番目の格子点 $\boldsymbol{x}^{ij,0}$ とその隣接 8 格子点が，次の条件

(22) $\quad f(\boldsymbol{x}^{ij,0})<f(\boldsymbol{x}^{ij,m}),\ \ (m=1\ldots,8).$

を満足すれば，$f_q(\boldsymbol{x};\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k)$ の主軸が x_1,x_2 軸となす角度が 45 度の場合にも，矩形領域 $D^2(\boldsymbol{x}^{ij};h_1,h_2)$ が極小点 $\overset{*}{\boldsymbol{x}}^k$ を囲むことを同様に示すことができる.

4 アルゴリズム

4.1 二次形式近似による極小点の計算

前節で中心となる格子点(以下中心格子点と呼ぶ)とその格子点の隣接格子点が極小点を囲む条件を導いた．これにより,(17) 式や (22) 式の条件を満足する中心格子点が極小点の近似点として与えることができる．しかし,この近似点は (20) 式や (21) 式で示されたように,各座標軸で $\pm\frac{h_1}{2}, \pm\frac{h_2}{2}$ の誤差をもつため,あまり良い近似とはなっていない．そこでより精度の高い近似極小点を計算するために,中心格子点とその 8 隣接格子点の関数値を用いて二次形式近似する方法を以下に示す．(5) 式と (6) から，$\boldsymbol{X}^{ij}(9)$ と $F^{ij}(9)$ は次式で与えられる．

$$(23)\quad \begin{cases} \boldsymbol{X}^{ij}(9) & \equiv & \{\boldsymbol{x}^{ij,k} \mid \boldsymbol{x}^{ij,k} = \boldsymbol{x}^{ij} + s_k^1 h_1 \mathbf{e}^1 + s_k^2 h_2 \mathbf{e}^2, (k = 0 \ldots 8)\} \\ F^{ij}(9) & \equiv & \{f^{ij,k} \mid f^{ij,k} = f^{ik,jk},\ ik = i + s_k^1,\ jk = j + s_k^2,\ (k = 0 \ldots 8)\} \\ & & where,\ s^1 = \{0,1,1,0,-1,-1,-1,0,1\},\ s^2 = \{0,0,1,1,1,0,-1,-1,-1\}. \end{cases}$$

また，近似する二次形式関数 f_{qa} を

$$(24)\quad f_{qa}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{x}^{ij,0}) \equiv f_{qa}(x_1, x_2; x_1^{ij,0}, x_2^{ij,0}) \equiv ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2 + dx_1 + ex_2 + f^{ij,0}.$$

とすると,係数 a, b, c, d, e は次式で与えられる．

$$(25)\quad \begin{cases} a = (\ f^{ij,1} - 2f^{ij,0} + f^{ij,5}\ )/2h_1^2, \\ b = (\ f^{ij,2} - f^{ij,4} - f^{ij,8} + f^{ij,6}\ )/8h_1h_2, \\ c = (\ f^{ij,3} - 2f^{ij,0} + f^{ij,7}\ )/2h_2^2, \\ d = (\ f^{ij,1} + f^{ij,5}\ )/2h_1 - 2ax_1^{ij,0} - 2bx_2^{ij,0}, \\ e = (\ f^{ij,3} + f^{ij,7}\ )/2h_2 - 2bx_1^{ij,0} - 2cx_2^{ij,0}. \end{cases}$$

二次形式関数 f_{qa} の極小点 $\overset{*}{\boldsymbol{x}}^{a} = (\overset{*}{x}_1^{a}, \overset{*}{x}_2^{a})$ は,x_1, x_2 で偏微分したものを 0 とおいて解くことより,次式が得られる．

$$(26)\quad \begin{cases} \overset{*}{x}_1^{a} = (\ cd - be\ )\ /\ 2(\ b^2 - ac\ ), \\ \overset{*}{x}_2^{a} = (\ ae - bd\ )\ /\ 2(\ b^2 - ac\ ). \end{cases}$$

一般の関数では,鞍点等でも (17) 式や (22) 式の条件を満足する場合がある．これを避けるために,以上で求められた二次形式関数の係数 a, b, c から，$\Delta = ac - b^2$ を求め，$\Delta > 0$ のときだけ,極小点として取り扱う必要がある．このことから,二次形式関数近似による極小点の近似計算アルゴリズムは以下のようになる．

Algorithm1 : $(\ \overset{*}{\boldsymbol{x}}^{a}, \Delta\ ) \leftarrow Quada2v(\ F^{ij}(9), h_1, h_2\ );$

[Input] : $F^{ij}(9)$: i, j 番目の中心格子点と 8 隣接格子点での関数値 ;
h_1, h_2 : x_1, x_2 軸の格子点の間隔．
[Output] : $\overset{*}{\boldsymbol{x}}^{a}$: 近似極小点 ; Δ : 正定値性の判定値

Step.1 (Calculate coefficient (a, b, c, d, e) by equation (25))

Step.2 (Calculate $\overset{*}{\boldsymbol{x}}^{a} = (\overset{*}{x}_1^{a}, \overset{*}{x}_2^{a})$ from coefficient (a, b, c, d, e) by equation (26))

Step.3 (Let $\Delta \leftarrow ac - b^2$)

4.2 最小値探索アルゴリズム

ここでは, 次の4つの主要ステップ：(1) 全ての格子点上での関数値の計算, (2) 全ての格子点に対して, その i,j 番目の中心格子点と8隣接格子点での関数値が (22) 式を満足する点の検出, (3) 検出された中心格子点とその8隣接格子点の関数値に, アルゴリズム *Quada2v* を適用して二次形式近似により極小点を計算, (4) 求められた極小点が新規極小点であるかの判定, によって得られる極小点集合 $\overset{*}{X}$ の中で最大の関数値とその最小点を求めるアルゴリズム *Gopt2v* を以下に示す.

Algorithm2 : $(\overset{**}{f}, \overset{**}{x}) \leftarrow Gopt2v(f, a_1, b_1, a_2, b_2, h_1, h_2)$;

[Input] : f : 最小化する関数 ; a_1, b_1 : x_1 軸の上限下限 ;

a_2, b_2 : x_2 軸の上限下限 ; h_1, h_2 : x_1, x_2 軸の格子点の間隔.

[Output] : $\overset{**}{f}$: 最大値 ; $\overset{**}{x}$: 最大点 ;

Step.0 (Initialize and Calculate the Number of Division)

$\overset{*}{X} \leftarrow \emptyset$; $\overset{*}{F} \leftarrow \emptyset$;

$s^1 \leftarrow \{1,1,0,-1,-1,-1,0,1\}$; $s^2 \leftarrow \{0,1,1,1,0,-1,-1,-1\}$;

$N_1 \leftarrow (b_1 - a_1)/h_1$; $N_2 \leftarrow (b_2 - a_2)/h_2$;

Step.1 (Generate Grid Points and Evaluate it's Function Value)

for $i \leftarrow 0$ **to** N_1 **do** ; **for** $j \leftarrow 0$ **to** N_2 **do**

$x_1^{ij} \leftarrow a_1 + ih_1$; $x_2^{ij} \leftarrow a_2 + jh_2$; $f^{ij} \leftarrow f(x_1^{ij}, x_2^{ij})$

Step.2 (Detect and Check whether 8-Neighbour Points Brackting a Local Minimum)

bracket_lmin $\leftarrow$ **TRUE**;

for $k \leftarrow 1$ **to** 8 **do**

$ik \leftarrow i + s_k^1$; $jk \leftarrow j + s_k^2$; *Let* $f^{ij,k}$ *be* $f^{ik,jk}$;

if $f^{ij} \geq f^{ij,k}$ **then** *bracket_lmin* $\leftarrow$ **FALSE**; **break** ; **fi**;

od;

Step.3 (Obtain the Approximate Local Minimum and Δ by Algorithm *Quada2v*)

if *bracket_lmin* = **TRUE then**

Let $F^{ij}(9) \equiv \{f^{ij}, f^{ij,1}, \ldots, f^{ij,8}\}$;

$(\overset{*}{x}^a, \Delta) \leftarrow Quada2v(F^{ij}(9), h_1, h_2)$;

fi;

Step.4 (Check whether the Approximate Local Minimum with $(\Delta > 0)$ is Included Rectangular Domain $D^2(\overset{*}{x}^k; h_1, h_2)$ of one Local Minimum $\overset{*}{x}^k$ in the Set of Local Minima $\overset{*}{X}$)

if *bracket_lmin* = **TRUE and** $\Delta > 0$ **then** *new_lmin* $\leftarrow$ **TRUE**;

for $k \leftarrow 1$ **to** $|\overset{*}{X}|$

if $\overset{*}{x}^a \in D^2(\overset{*}{x}^k; h_1, h_2)$ **then** *new_lmin* $\leftarrow$ **FALSE**; **break** ; **fi**

if *new_lmin* = **FALSE then**

$\overset{*}{X} \leftarrow \overset{*}{X} + \{x^{ij}\}$; $\overset{*}{F} \leftarrow \overset{*}{F} + \{f^{ij}\}$; **fi**

fi;
od; od;

Step.5 (Take the Global Minimal Value $\overset{**}{f}$ and the Global Mimimum $\overset{**}{x}$)

$$\overset{**}{f} \leftarrow \min_{k \in I(\overset{\bullet}{X})} \{ f(\overset{*}{x}^{k}) \};$$

$$\overset{**}{x} \leftarrow \{ \overset{*}{x}_m \mid \overset{*}{x}_m = arg\min_{k \in I(\overset{\bullet}{X})} \{ f(\overset{*}{x}^{k}) \} \};$$

5 おわりに

本研究で得られた結果として，(1) 新たに定義した強準凸領域上で４隣接格子点が極小点を囲むための必要条件の導出，(2) 極小点の近傍で「正定値二次形式で近似でき，その主軸が座標軸と平行」を仮定したときに，極小点を囲むための十分条件として，中心格子点と隣接格子点で成立する関係を導出，(3) 中心格子点と隣接格子点で成立する関係を用いた二変数多峰性関数の最小値探索アルゴリズムの提案，があげられる．今後の課題として，(1) 数値実験による本アルゴリズムの有効性の検討，(2) 局所最適化手法を組合せ，より高精度な解を求めるアルゴリズムの構成，があげられる．

参考文献

[1] M.Avriel:*Nonlinear Programming -Analysys and Methods,* Prentice-Hall(1976).

[2] W.Baritompa:Costomizing Methods for Global Optimization - a Geometric View Point,*Journal of Global Optimization,* Vol.3, No.?, pp.193–212(1993).

[3] W.Baritompa:Accelerations for Variety of Global Optimization Methods, *Journal of Global Optimization,* Vol.4, No.?, pp.37–45(1994).

[4] 水野:分枝限定法を用いた方程式の解法と関数の最小化, *Journal of the Operations Research Sciety of Japan,* Vol.30, No.1, pp.41–58(1987).

[5] 正道寺: 多変数多峰性関数に関する最適値探索法, 日本オペレーションズリサーチ学会論文誌, Vol.20, No.4, pp.311–320(1977).

[6] A.Törn and S.Viitanen:Topographical Global Optimization, *In:C.A. Floudas and P.M. Pardalos(eds.), Recent Advandes in Global Optimization,* Princeton University Press, pp.384–398(1992).

[7] G.R.Wood:The Bisection Method in Higher Dimensions, *Mathematical Programming,* No.55, pp.319–337, 1992.