氏名（本籍）	中山舜民（東京都）
学位の種類	博士（理学）
学位記番号	甲第1178号
学位授与の日付	2019年3月19日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
学位論文題目	**Memoryless quasi-Newton methods for large-scale unconstrained optimization (大規模な無制約最適化問題に対するメモリーレス準ニュートン法)**
論文審査委員	（主査）教授　矢部　博 教授　石渡恵美子　教授　佐藤　洋祐 教授　関川　浩　教授　加藤　圭一

論文内容の要旨

本論文は, 大規模な無制約最適化問題に対する数値解法の提案と収束性の理論的な解析，および提案法の数値実験の結果を述べたものである.

最適化問題とは, ある制約条件の下で様々な選択肢の中から一番良いものを選ぶ問題である．具体的には，n次元の実ベクトルxについて，与えられた不等式・等式などの制約条件を全て満たすものの中で, 目的関数 f(x)を最小または最大にするようなxを求める問題である．制約条件が付いている問題を制約付き最適化問題と呼び，実問題の多くがこの問題で与えられる．一方，制約条件のない問題を無制約最適化問題と呼ぶ．無制約最適化問題は実問題のモデルとして定式化されるだけではなく, 制約付き最適化問題を解く際にしばしば無制約最適化問題が扱われるので, 無制約最適化問題に対する数値解法を研究することは最適化問題に対するアルゴリズムの発展に大きく貢献するものと考えられる.

一般に，無制約最適化問題に対する数値解法として反復法が使用されている．反復法は任意の初期点から出発して，逐次的に近似解を更新して解を求める方法である．具体的に，現在の点から探索方向と呼ばれるベクトルと，その探索方向の長さを調節するステップ幅を用いて，近似解を更新する方法である．反復法では，探索方向の選択法によって様々な方法が存在し，最急降下法，ニュートン法，準ニュートン法，非線形共役勾配法などがよく知られている．最小化問題において，探索方向が降下方向（目的関数の

値が下がる方向）であることが重要であり，降下方向でなければステップ幅を決める直線探索を行うことができない．最急降下法の探索方向は降下方向であり，大域的収束性（任意の初期点に対して停留点に収束すること）が保証されているが，収束率が 1 次であり，収束が遅いという欠点がある．ニュートン法は目的関数のヘッセ行列を利用した方法であり，解の近傍においては収束が速いという利点があるが，探索方向が降下方向であるとは限らないという欠点を持つ．また，探索方向を計算するために線形方程式を解く必要があるため，1 反復あたりの計算が高価である．そのため，ニュートン法を改良した方法として準ニュートン法が提案された．準ニュートンは目的関数のヘッセ行列の近似行列を利用した方法である．正定値性を保つ近似行列の更新式として DFP 公式や BFGS 公式などがある．準ニュートン法は近似行列を逐次的に更新して，解を求める方法であり，様々な更新式の研究が行われてきた．特に，BFGS 公式を用いた準ニュートン法は非常に有効な方法として，多くのソフトウェアに組み込まれている．準ニュートン法はニュートン法と同様に解の近傍で速い収束率を誇るが，行列をメモリーに格納する必要があるため大規模な問題には向いていないという欠点がある．一方で，行列を利用しない方法として非線形共役勾配法があり，大規模な問題に対する数値解法として，盛んに研究されている．非線形共役勾配法とは，Hestenes and Stiefel (1952)によって提案された線形方程式を解くための線形共役勾配法を， Fletcher and Reeves (1964)が一般の非線形最適化問題を解くための方法に拡張した数値解法である．非線形共役勾配法は探索方向に含まれるパラメータの取り方によって数値的な振る舞いや理論的な性質が異なるという特徴を持つ．本論文は準ニュートン法と非線形共役勾配法に焦点を当てている．この二つの方法を比較したとき，以下の性質が挙げられる．

準ニュートン法の性質

- 収束率は超 1 次である．
- 探索方向を計算するために行列の保存と計算が必要である．

非線形共役勾配法の性質

- 収束率は高々1 次である．
- 探索方向の計算には行列を必要としない．

このことから，小規模または中規模の問題に対しては準ニュートン法が有効な方法であり，大規模な問題に対しては非線形共役勾配法が有効であるとされている．近年，最適化問題の規模は増加傾向にある．そこで，本論文では Shanno (1978)によって提案されたメモリーレス準ニュートン法に注目した．通常，準ニュートン法では近似行列を逐次的に更新するので，毎回の更新において行列を保存する必要がある．一方，メモリーレス準ニュートン法は，更新前の行列を対角行列に置き換えることによって，行列を保存することなく，探索方向を計算する方法である．BFGS 公式を利用したメモリーレス準ニュートン法は正確な直線探索を利用すれば非線形共役勾配法と同じ探索方向になる．このことから，メモリーレス準ニュートン法は非線形共役勾配法と密接に関連した方法であり，大規模な問題に対する準ニュートン法であるとされている．この方法は準ニュートン法の局所的な収束の速さは損なわれるため，しばらく注目を浴びることはなかっ

た．しかしながら，メモリーレス準ニュートン法は非線形共役勾配法を加速させる方法という視点と，大規模問題を解く必要性から最近注目を浴びている．

非線形共役勾配法において，降下条件より強い条件として，“十分な降下条件”を満たすことが望ましいとされている．Gilbert and Nocedal (1992)が Property(*)という性質を定義し，十分な降下条件を満たす非線形共役勾配法の提案と，Property(*)を持つ方法の大域的収束性を示した．Gilbert and Nocedal 以降，多くの研究者によって，十分な降下条件を満たす非線形共役勾配法を提案され，Property(*)に相当する性質を用いて大域的収束性の証明がなされた．本研究においても，十分な降下条件を満たすメモリーレス準ニュートン法を提案し，Property(*)に対応する性質を考え，その大域的収束性を示す．また，数値実験を通じて，既存手法との比較を行い，有用性の検証をする．

本論文の構成は以下の通りである．

第 1 章は序章であり，無制約最適化問題の説明，凸集合と凸関数の性質，最適化問題の解であるための最適性条件の導入，本論文の構成を述べている．

第 2 章では，無制約最適化問題を解くための反復法のアルゴリズムを述べ，直線探索の説明をしている．また，反復法の大域的収束性を定義する．様々な反復法の紹介として最急降下法やニュートン法，準ニュートン法，非線形共役勾配法について述べており，本研究に関連する準ニュートン法と非線形共役勾配法については関連研究を詳しく述べている．

第 3 章では，大規模な最適化問題に対する準ニュートン法を紹介し，本研究の主題であるメモリーレス準ニュートン法について述べている．

第 4 章では，対称ランクワン(Symmetric Rank-One; SR1)公式に着目した．SR 1 公式は BFGS 公式とは異なり，正定値を保証しないため，探索方向が降下方向であることを保証できない．既存の SR1 公式に基づいたメモリーレス準ニュートン法の研究では，一般の目的関数に対して十分な降下条件が成り立ち，大域的収束性を保証するアルゴリズムは提案されていなかった．本研究では，Spectral-Scaling (SS)セカント条件に基づいた SR1 公式を提案し，その公式に基づいたメモリーレス準ニュートン法を提案した．さらにその方法が常に十分な降下条件を満たし，大域的に収束することを示した．数値実験を通じて，既存のメモリーレス準ニュートン法との比較を行った．

第 5 章では，BFGS 公式や DFP 公式を含む Broyden 公式族に注目した．Broyden 公式族はパラメータを導入し，パラメータの範囲を[0,1]とすれば DFP 公式や BFGS 公式の凸結合を表している．また特殊な値を選べば SR 1 公式に帰着される．さらに，パラメータとして preconvex と呼ばれる範囲(preconvex クラス)を考慮すれば，Broyden 公式族が BFGS 公式より数値実験の結果がよくなることが報告されている．そこで，本研究では SS セカント条件に基づいた Broyden 公式族を考え，その公式に基づいたメモリーレス準ニュートン法を提案した．その方法が十分な降下条件と大域的収束性を保証するパラメータの範囲を示した．また，数値実験を通じて，パラメータによる数値的な振る舞いの違いを報告した．さらに， Broyden 公式族の preconvex クラスが BFGS 公式を用いたメモリーレス準ニュートン法より計算効率が良い事を示した．また，本章

で与えた大域的収束性を保証する十分条件は満たさないが，計算効率が良くなるスケーリングパラメータを見つけた．

第6章では，第5章の数値実験において見つけたスケーリングパラメータを使用しつつ，十分な降下条件を満たし，大域的収束性を損なわないような修正法を提案した．具体的には，探索方向を構成するベクトルの一部に補正を加えることで，メモリーレス準ニュートン法と非線形共役勾配法のハイブリッド法を提案した．

最後に，第7章では本論文のまとめを述べている．

以上のように，第4章と第5章を通して，大域的収束性を保証するメモリーレス準ニュートン法の枠組みを考えることができた．特に，第5章の数値実験では，パラメータの違いによる数値的な振る舞いを確認した．第6章では非線形共役勾配法を意識した修正を行うことで，アルゴリズムの改良に成功した．今回の結果は，今後，新しいアルゴリズムの開発に役立つことが期待されるので，最適化の分野における数値解法のさらなる発展に寄与できると思われる．

論文審査の結果の要旨

本論文で述べられている大規模な無制約最適化問題に対するメモリーレス準ニュートン法の研究について審査を行った。最適化問題はいろいろな応用分野で発生する重要な問題であり、近年では大規模最適化問題を解くことが強く要望されており、そのための数値計算法を開発することは実用上意義のあることである。本論文は、そうした数値解法の一つであるメモリーレス準ニュートン法に関する研究成果をまとめたものであり、７つの章から構成されている。

第 1 章と第 2 章は序章と準備であり、凸集合と凸関数の性質、最適化問題の解であるための最適性条件、無制約最適化問題を解くための反復法について紹介している。代表的な反復法である最急降下法、ニュートン法、準ニュートン法、非線形共役勾配法について述べている。ニュートン法は目的関数のヘッセ行列を利用した方法で、解の近傍において２次収束するという利点があるが、毎回の反復で連立１次方程式を解く必要があるばかりでなく、得られた探索方向が目的関数の降下方向になるとは限らないという欠点を持つ。そのため、ニュートン法を改良した方法として準ニュートン法が提案された。この解法は目的関数のヘッセ行列（もしくはその逆行列）を近似する方法であり、正定値性を保つ更新式として DFP 公式や BFGS 公式などがある。

第 3 章では、大規模な最適化問題に対する準ニュートン法を紹介し、本研究の主題であるメモリーレス準ニュートン法について述べている。第 2 章で触れた準ニュートン法はニュートン法を改良した解法であり解の近傍で速い収束性（超１次収束性）を実現してはいるが、行列をメモリーに格納する必要があるため大規模な問題には向いていない。この問題点を克服するために Shanno (1978)によって提案されたのがメモリーレス準ニ

ュートン法である。従来の準ニュートン法が行列を更新する際に前回の近似行列を保存する必要があるのに対して、メモリーレス準ニュートン法では更新前の行列を対角行列（多くの場合は単位行列）に置き換えることによって行列を保存することなく探索方向を計算することができるのが利点である。

第 4 章と第 5 章はメモリーレス準ニュートン法に関する研究成果をまとめたものである。従来のメモリーレス準ニュートン法の研究は主として BFGS 公式に関するものであったが、第 4 章では対称ランクワン(SR1)公式に基づいたメモリーレス準ニュートン法を提案している。通常の SR 1 公式は BFGS 公式とは異なり正定値性を保存しないため、探索方向が降下方向であることを保証できない。そこで本論文では Spectral-Scaling (SS)セカント条件に基づいた SR1 公式を導出し、それから得られるメモリーレス準ニュートン法が常に十分な降下条件を満たすように工夫して、提案手法が大域的収束することを証明している。また、数値実験を通じて、既存のメモリーレス準ニュートン法との比較を行った。つづいて第 5 章では、BFGS 公式、DFP 公式、SR 1 公式を含む Broyden 公式族に注目している。Broyden 公式族に含まれるパラメータの範囲を[0,1]に限定したものを凸クラスと呼んでいる。本研究では、SS セカント条件に基づいた Broyden 公式族を考え、その公式に基づいたメモリーレス準ニュートン法を提案している。そして、提案した解法の探索方向が十分な降下条件を満たし、かつ、大域的収束性を保証するためのパラメータの範囲を示している。また、数値実験を通じてパラメータの選び方による数値的な振る舞いの違いを調べると共に、Broyden 公式族の preconvex クラスが BFGS 公式を用いたメモリーレス準ニュートン法より計算効率が良いことを示しているのは大きな成果である。さらに、本章で与えた大域的収束性を保証するための十分条件は満たさないものの計算効率が良くなるスケーリングパラメータの選び方を見つけた点も評価できる。この発見は第 6 章の研究成果に結びついている。

第 6 章では、前章の数値実験で発見したスケーリングパラメータを使用しつつ、大規模最適化問題に対する非線形共役勾配法の考えを導入することによって、十分な降下条件を満たし、かつ、大域的収束性を損なわないような修正法を提案している。探索方向を構成するベクトルの一部に補正を加えることで、メモリーレス準ニュートン法と非線形共役勾配法のハイブリッド法を提案した。この考え方には新規性があり今後のメモリーレス準ニュートン法と非線形共役勾配法のどちらの分野でも研究が発展することが期待される。最後に、第 7 章では本論文のまとめを述べている。

以上のように、本論文は、大規模な無制約最適化問題に対する新しい数値解法の研究成果を得ており、非線形最適化の分野において多大な貢献をしていると考えられる。よって、本論文は博士（理学）の学位論文として十分に価値あるものと認められる。