特別研究報告書

多次元添字集合をもつ半無限計画問題に対する αBB-切除平面法の拡張

指導教員　林　俊介　助教

京都大学工学部情報学科
数理工学コース
平成 20 年 4 月入学
平成 24 年 3 月卒業
合元　健祐

平成 24 年 1 月 31 日提出

摘要

半無限計画問題とは有限次元の決定変数と無限個の制約からなる最適化問題であり，数学，経済，工学などさまざまな分野に応用が可能であることからこれまで盛んに研究がなされてきた．半無限計画問題に対するアルゴリズムとして離散化法，交換法，局所帰着法などいくつかの手法が知られているが，最近 Shiu と Wu によって αBB 法による制約関数の部分凸近似と切除平面法とを組み合わせた新たな手法 (αBB-切除平面法) が提案された．この手法は添字集合を有限個の部分集合に分割し，それらの一部分を集めて生成された副問題を何度も解くことにより，点列を半無限計画問題の最適解へと収束させるものである．しかし Shiu と Wu の提案した手法では添字集合が 1 次元であるような半無限計画問題しか考慮されていなかった．そこで，本報告書では添字集合が多次元であるような半無限計画問題を考え，そのような問題に対して αBB 切除平面法を拡張する．具体的には，Shiu と Wu が一次元の閉区間であるような添字集合を有限個の部分区間に分割していたのに対して，本報告書では多次元添字集合を有限個のボックスとして分割することを考える．さらに，本報告書で提案したアルゴリズムをデザインセンタリング問題などの具体的な問題に適用し，その有用性を検証する．

目次

1　序論

半無限計画問題 (Semi-Infinite Program: SIP) とは有限次元の決定変数 $x \in \mathbb{R}^n$ と無限個の不等式制約を含む最適化問題である．本報告書では以下の半無限計画問題について考える．

$$\begin{aligned} \text{SIP :} \qquad & \underset{x \in X}{\text{minimize}} && f(x) \\ & \text{subject to} && g(x,y) \leq 0 \quad \forall y \in Y \end{aligned} \tag{1.1}$$

ここで，X は一般には有限個の等式制約および不等式制約で特徴づけられる集合であるが，本報告書では簡単のため $X = \mathbb{R}^n$ とする．目的関数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ は X 上で 2 回微分可能な凸関数，$Y \subseteq \mathbb{R}^t$ は空でないコンパクト部分集合，制約関数 $g : \mathbb{R}^n \times Y \to \mathbb{R}$ は (x,y) に関して 2 回微分可能であり，x に関して凸と仮定する．また，ベクトル $y \in \mathbb{R}^t$ は一般の (有限個の制約をもつ) 最適化問題における制約関数の添字に相当するので，しばしば y は添字 (添字ベクトル)，Y は添字集合と呼ばれる．なお，本稿では添字集合はボックス型の集合とする．

SIP に関しては，これまで理論面および応用面からさまざまな研究がなされてきた．最適性条件と双対理論についての研究は 1960 年代からさかんに行われており，それらは [9] などの文献にまとめられている．また，多くの問題が SIP としてモデル化されることが知られており，例えば数学におけるチェビシェフ近似問題，経済における諸問題，工学における軌道制御問題や最適制御問題，水や大気の汚染制御問題，生産計画問題などが挙げられる．

SIP を解くためのアルゴリズムに関する研究もこれまで多くなされてきた．それらの中でも特によく知られた解法として離散化法，局所帰着法，交換法の 3 つがある．これらの解法のアイデアは SIP を有限個の制約条件の問題に近似することにある．離散化法は $Y_0 \subset Y_1 \subset Y_2 \cdots \subset Y$ および，$\lim_{k\to\infty} \mathrm{dist}(Y_k, Y) = 0$[*1]となる有限添字集合の列 $\{Y_k\}$ を生成し，(1.1) において Y を Y_k に置き換えた緩和問題を何度も繰り返し解くことによって，緩和問題の最適解を SIP の最適解へ収束させていく手法である [8, 11, 13]．局所帰着法は，陰関数定理を使って局所的に無限個の制約条件を有限個の制約として等価に表し，その有限個の不等式制約をもつ非線形計画問題を SIP の代わりに解いていく手法である [3, 6, 12]．交換法は有限添字集合 Y_k を更新する際，Y_k に属する添字と $Y \setminus Y_k$ に属する添字とを上手く交換することによって，緩和問題の最適解を SIP(1.1) の最適解に収束させていく手法である [1, 5]．また，これらの解法とは別に，切除平面法という解法がある．この方法は k 回目の反復で SIP(1.1) の無限添字集合 Y を $Y_k \subset Y$ かつ $|Y_k| < \infty$ であるような有限添字集合 Y_k に置き換えた部分問題 P_k を考え，$k \to \infty$ とすることにより P_k の最適解 x^k を SIP(1.1) の最適解に収束させるものである．切除平面法では，Y_k から Y_{k+1} を生成するに当たっ

[*1] $X \subset Y$ であるような二つの集合に対して，それらの距離を $\mathrm{dist}(X,Y) = \sup_{y\in Y} \inf_{x \in X} \|x - y\|$ で定義する．

て，下位問題

$$\text{maximize } g(x^k, y) \quad \text{subject to } y \in Y \tag{1.2}$$

を解いて，その最適解 $\overline{y}^k$ に対して $Y_{k+1} := Y_k \cup \{\overline{y}^k\}$ とする．しかし，関数 g が y に関して凸でないとき (1.2) の大域的最適解を求めることは一般に容易ではない．

最近，Floudas と Stein [2] は下位問題 (1.2) の目的関数を αBB 法を用いて凹近似するようなアプローチを提案した．しかし，彼らの提案した手法では，各反復で均衡制約をもつ数理計画問題 (Mathematical Program with Equilibrium Constraints,MPEC) と呼ばれる解くことが困難とされるクラスの問題を部分問題として解く必要があった．そこで Shiu と Wu [10] は，Floudas と Stein の提案した手法と先程述べた切除平面法とを組み合わせた解法を提案した．ところが，彼らの解法はいずれも添字集合 Y の次元が 1 次元であるような半無限計画問題を対象としていた．そこで本報告書では Shiu と Wu の提案した手法を拡張し，添字集合 Y が多次元であるような半無限計画問題に対しても対応できるようにすることを考える．具体的には，多次元集合 Y を有限個のボックスに分割し，それらのボックス集合 (およびその一部) で特徴づけられるような部分問題に対して，αBB 法と切除平面法を適用することを考える．実際，添字集合 Y が多次元の場合は，1 次元の場合に比べて分割のパターンがかなり複雑になる．本報告書では，後に説明する「改良ステップ」において，複数の異なる分割パターンを考え，それらがアルゴリズムの性能にどのような影響を与えるのかについても観察する．

本報告書の構成を以下に記す．2 節では，アルゴリズムを構築する上で必要な数学的準備をいくつか行う．3 節では添字集合 Y が多次元であるような半無限計画問題にも対応できるようアルゴリズムの拡張を行う．4 節ではそのアルゴリズムをデザインセンタリングに適用した数値実験結果を示し，最後に 5 節で結論を述べる．

2　準備

本節では SIP (1.1) に対する αBB-切除平面法の説明をするにあたって必要な基礎事項および記号の定義をいくつか行う．

2.1　1 次の最適性条件

まず，SIP (1.1) に対する 1 次の最適性の必要条件 (Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 条件) について述べる．$x \in \mathbb{R}^n$ を SIP(1.1) の任意の実行可能解とし，

$$Y_{\mathrm{act}}(x) := \{y \in Y \mid g(x, y) = 0\}$$

を SIP (1.1) の x における有効添字集合とする．このとき，次の最適性条件が成り立つ．

命題 2.1 [4, 定理 1] $\overline{x}$ を SIP (1.1) の任意の局所的最適解とし，$Y_{\mathrm{act}}(\overline{x})$ は空でないものとする．また，点 $\overline{x}$ において Mangasarian-Fromovitz (M-F) 制約想定が成り立つ，すなわち，

$$\nabla_x g(\overline{x}, y)^\top d < 0, \quad \forall y \in Y_{\mathrm{act}}(\overline{x})$$

を満たすような $d \in \mathbb{R}^n$ が存在するとする．このとき正の整数 $m \leq n$，有効添字 $y_k \in Y_{\mathrm{act}}(\overline{x})$ $(k = 1, 2, \ldots, m)$, およびラグランジュ乗数 $\lambda_1, \ldots, \lambda_m \geq 0$ が存在して，

$$\nabla f(\overline{x}) + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \nabla_x g(\overline{x}, y_k) = 0 \tag{2.1}$$

が成り立つ．

なお本報告書では，SIP(1.1) において関数 f および $g(\cdot, y)$ は任意の $y \in Y$ に対して凸であることを仮定しているので，SIP(1.1) の任意の局所的最適解は大域的最適解でもある．さらに M-F 制約想定が成り立つことと Slater 制約想定が成り立つこと，すなわち

$$g(x^0, y) < 0, \quad \forall y \in Y$$

となる $x^0 \in \mathbb{R}^n$ が存在することとは等価である．

2.2 ボックス分割を用いた αBB 法

1 節で述べたように，関数 $g(x, \cdot)$ が凹でないとき，下位問題 (1.2) の大域的最適解を厳密に求めることは一般的に難しい．そこで，$g(x, \cdot)$ の上界値を評価するために，α 分枝限定法 (α-based Branch and Bound method, 以下，αBB 法という) を導入する．αBB 法では，対象とする関数の定義域をいくつかに分割し，それぞれの領域で部分的に凹近似することを考える．本報告書では，添字集合 Y が多次元であることを想定しているため，[2] や [10] で提案されているアプローチのように Y を部分区間に分割することはできない．そこで集合 Y を複数のボックスに分割することを考える．ボックスとは以下のように定義される集合のことである．

定義 2.1 集合 $B \subset \mathbb{R}^t$ が $l < u$ であるような二つの t 次元実ベクトル l, u を用いて $B := \{y \in \mathbb{R}^t \mid l \leq y \leq u\}$ と表されるとき，それをボックスという．さらにボックス $B \subset \mathbb{R}^t$ が与えられたとき，$B = \{y \in \mathbb{R}^t \mid l \leq y \leq u\}$ となるような二つのベクトル $l, u \in \mathbb{R}^t$ を l_B, u_B と表す．

次に，分割された各ボックス上で関数 $g(x, \cdot)$ を上から見積もるような凹関数を考える．

定義 2.2 $B \subseteq Y$ を任意のボックスとする．さらに，

$$\alpha_B > \max\left(0, \max_{(x,y) \in X \times B} \lambda_{\max}(\nabla_y^2 g(x, y))\right) \tag{2.2}$$

を満たす非負実数 α_B が与えられているとする．ただし $\lambda_{\max}(A)$ は行列 A の最大固有値を表す．このとき，関数 g_B を次のように定義する．

$$g_B(x,y) := g(x,y) + \frac{\alpha_B}{2}\left(\left\|\frac{u_B - l_B}{2}\right\|^2 - \left\|y - \frac{u_B + l_B}{2}\right\|^2\right) \tag{2.3}$$

このように定義された関数 g_B は次の命題に示されているような性質を満たす．

命題 2.2　$B \subseteq Y$ であるような任意のボックス B が与えられているとする．さらにパラメータ α_B および関数 g_B をそれぞれ (2.2), (2.3) が成り立つように定める．このとき，(a) 任意の固定された $x \in \mathbb{R}^n$ に対して関数 $g(x,\cdot)$ は B 上で狭義凹である．また，(b) 任意の $(x,y) \in X \times B$ に対して $g(x,y) \le g_B(x,y)$ が成り立つ．

証明　(2.2) 式より，任意の $(x,y) \in X \times B$ に対して

$$\begin{aligned}\lambda_{\max}(\nabla_y^2 g_B(x,y)) &= \lambda_{\max}(\nabla_y^2 g(x,y) - \alpha_B I)\\ &\le \max_{(x,y)\in X\times B} \lambda_{\max}(\nabla_y^2 g(x,y)) - \alpha_B\\ &\le \max\left(0, \max_{(x,y)\in X\times B} \lambda_{\max}(\nabla_y^2 g(x,y))\right) - \alpha_B < 0\end{aligned}$$

が成り立つ．よって，(a) が成り立つ．また，任意の $y \in B$ に対して $l_B \le y \le u_B$ であることと，

$$\begin{aligned}g_B(x,y) - g(x,y) &= \frac{\alpha_B}{2}\left(\left\|\frac{u_B - l_B}{2}\right\|^2 - \left\|y - \frac{u_B + l_B}{2}\right\|^2\right)\\ &= \frac{\alpha_B}{2}(y - l_B)^\top (u_B - y)\end{aligned}$$

であることより，(b) が成り立つ．■

2.3　部分問題とその KKT 条件

次節で導入する αBB-切除平面法では，添字集合 Y に含まれるボックスをいくつか用いて表現された半無限計画問題を部分問題として解く必要がある．そこで本節では，そのような半無限計画問題，およびそれを特徴づけるボックスの集合や添字集合の定義を行う．さらに，それらの定義を用いて，部分問題として解くべき半無限計画問題の KKT 条件を導く．

まず，αBB-切除平面法における部分問題を以下で定義する．

定義 2.3　有限個のボックスを要素にもつ集合 $\mathcal{E} := \{B_1, B_2, \ldots, B_p\}$ が与えられており，各ボックス $B_i \in \mathcal{E} (i = 1, 2, \ldots, p)$ に対して (2.2) を満たす非負実数 α_{B_i}，および (2.3) で定義される関

数 g_{B_i} が対応づけられているとする．このとき，以下の半無限計画問題を $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E},\alpha)$ と表す．

$$\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E},\alpha): \quad \begin{array}{ll} \underset{x\in X}{\text{minimize}} & f(x) \\ \text{subject to} & g_{B_1}(x,y) \le 0 \quad (\forall y \in B_1) \\ & \vdots \\ & g_{B_p}(x,y) \le 0 \quad (\forall y \in B_p) \end{array} \tag{2.4}$$

また，このような問題に対して，Y の部分集合をいくつか定義する．

定義 2.4 $\mathcal{E} = \{B_1, B_2, \ldots, B_p\}$ および $\alpha = \{\alpha_{B_1}, \alpha_{B_p}, \ldots, \alpha_{B_p}\}$ が与えられており，$\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E},\alpha)$ が (2.4) で定義されているとする．また $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E},\alpha)$ の最適解を $\overline{x}$ とする．このとき以下を定義する．

(a) $\mathcal{E}$ によって定まる Y の部分集合を，$Y(\mathcal{E}) := \bigcup_{i=1}^{p} B_i$ とする．

(b) $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E},\alpha)$ の $\overline{x}$ における有効添字集合を $Y_{\mathrm{act}}^{\alpha\mathrm{BB}}(\overline{x}) := \{y \in Y(\mathcal{E}) | g_B(\overline{x}, y) = 0\}$ とする．

(c) あるボックス $B \in \mathcal{E}$ が有効添字を含むとき，すなわち $\max_{y\in B} g_B(\overline{x}, y) = 0$ が成り立つとき，そのボックスを有効ボックスという．

$\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E},\alpha)$ の各制約関数 $g_B(B \in \mathcal{E})$ は変数 y に対して狭義凹であるので，各ボックスに含まれる有効添字の数は高々 1 つであることに注意する．

以上の定義を用いて $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E},\alpha)$ の KKT 条件を導く．

定理 2.1 半無限計画問題 $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E},\alpha)$ の最適解を $\overline{x}$ とし，$\overline{x}$ において M-F 制約想定が成り立つものとする．さらに各ボックス $B \in \mathcal{E}$ における最大制約添字を $\overline{y}_B := \mathrm{argmax}_{y\in B}\, g_B(\overline{x}, y)$ とする．このとき各 $B \in \mathcal{E}$ に対してラグランジュ乗数 $\lambda_B \ge 0$ が存在し，次の式を満たす．

$$\nabla f(\overline{x}) + \sum_{B\in\mathcal{E}} \overline{\lambda}_B \nabla_x g_B(\overline{x}, \overline{y}_B) = 0 \tag{2.5}$$

$$\overline{\lambda}_B \ge 0,\ g_B(\overline{x}, \overline{y}_B) \le 0,\ \overline{\lambda}_B g_B(\overline{x}, \overline{y}_B) = 0 \quad (B \in \mathcal{E}) \tag{2.6}$$

証明 命題 2.1 より正の整数 $m \le n$，有効添字 $\overline{y}_k \in Y_{\mathrm{act}}^{\alpha\mathrm{BB}}(\overline{x})$ $(k = 1, 2, \ldots, m)$，およびラグランジュ乗数 $\lambda_1, \ldots, \lambda_m \ge 0$ が存在して，

$$\nabla f(\overline{x}) + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \nabla_x g_{B^{(k)}}(\overline{x}, y_k) = 0$$

と書ける．ただし，$B^{(k)} \in \mathcal{E}$ は有効添字 $\overline{y}_k$ を含むブロックである．($\overline{y}_k$ が 2 つ以上のブロックに含まれるときはその中から任意のブロックを選ぶものとする．) ここで，g_B の狭義凹性より各ボックスに含まれる有効添字の数が高々一つであることに注意すると, 任意の $k \ne j$ に対して $B^{(k)} \ne B^{(j)}$ であることがわかる．よって，各 $k = 1, 2, \ldots, m$ に対して $B = B^{(k)}$ のとき

$\overline{\lambda}_B := \overline{\lambda}_k$ とし，$B \in \mathcal{E} \setminus \{B^{(1)}, B^{(2)}, \ldots, B^{(m)}\}$ のとき，$\overline{\lambda}_B := 0$ とすれば，(2.5), (2.6) が成立する． ■

3 アルゴリズム

本節では Shiu と Wu [10] によって提案された αBB-切除平面法を拡張し，添字集合が多次元であるような半無限計画問題に適用することを考える．

αBB-切除平面法では，各反復 $\nu = 1, 2, \ldots$ において，ブロックを要素とする集合 $\mathcal{E}^\nu, \mathcal{N}^\nu$ を $Y = Y(\mathcal{E}^\nu) \cup Y(\mathcal{N}^\nu)$ および $\mathrm{intY}(\mathcal{E}^\nu) \cap \mathrm{intY}(\mathcal{N}^\nu) = \emptyset$ が成り立つように生成する．ここで，$\mathcal{E}^\nu$ は部分問題を解く際に用いるブロック集合であり，実際適当な凹化パラメータ集合 $\alpha^\nu = \{\alpha_B^\nu\}$ に対して $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E}^\nu, \alpha^\nu)$ を解くことにより，ν 回目の反復点 x^ν を生成する．また $\mathcal{E}^\nu$ から $\mathcal{E}^{\nu+1}$ を生成する際には，$\mathcal{E}^\nu$ に属するブロックを分割する改良ステップと呼ばれるステップを実行し，さらに x^ν が SIP(1.1) の実行可能解でなければ，$\mathcal{N}^\nu$ の中からブロックを一つ選びそれを $\mathcal{E}^\nu$ に加える．具体的なアルゴリズムは以下のように記述できる．

アルゴリズム 3.1　(**αBB-切除平面法**)

Step 0: 多次元添字集合 Y を N 個のボックス $B_1^0, B_2^0, \ldots, B_N^0 \subseteq Y$ に分割し，$\mathcal{I} := \{B_1^0, B_2^0, \ldots, B_N^0\}$ とする．各ボックス $B \in \mathcal{I}$ に対して，パラメータ α_B を (2.2) が成り立つように与え，$\overline{\alpha} := \max_{B \in \mathcal{I}} \alpha_B$ とする．さらに，$\mathcal{I}$ の部分集合 $\mathcal{E}^1 \subset \mathcal{I}$ を選び，残りを $\mathcal{N}^1 := \mathcal{I} \setminus \mathcal{E}^1$ とする．小さな正数 $\varepsilon, \gamma > 0$ を選ぶ．$\nu := 1$ とする．

Step 1: $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E}^\nu, \alpha^\nu)$ を解き，最適解を x^ν とする．さらに，各ボックス $B \in \mathcal{E}^\nu$ に対して，KKT 条件 (2.5), (2.6) を満たすようなラグランジュ乗数 $\overline{\lambda}_B^\nu \geq 0$ および最大制約添字 $\overline{y}_B^\nu \in B$ を求める．

Step 2: 各ボックス $B \in \mathcal{N}^\nu$ に対して $\zeta_B := \max_{y \in B} g_B(x^\nu, y)$ を計算し，$B^\nu := \mathrm{argmax}_{B \in \mathcal{N}^\nu} \zeta_B$ とする．以下の 2 つの条件を満たせば，x^ν を近似解として出力して終了．さもなくばステップ 3 へ．

$$\text{(i)}\ \zeta_{B^\nu} \leq \gamma \quad \text{(ii)}\ -\lambda_B^\nu \varepsilon \leq \lambda_B^\nu g(x^\nu, y_B^\nu) \leq 0 \ \ (\forall B \in \mathcal{E}^\nu)$$

Step 3: ボックス集合 $\mathcal{E}^\nu$ およびパラメータ集合 α^ν に対して改良ステップ (後述) を行い，$\mathcal{E}^\nu$ に属するいくつかのボックスを分割する．それによって得られた新しいボックス集合および凹化パラメータ集合をそれぞれ $\tilde{\mathcal{E}}^\nu, \tilde{\alpha}^\nu$ とする．

Step 4: $\zeta_{B^\nu} > \gamma$ ならば，$\mathcal{E}^{\nu+1} := \tilde{\mathcal{E}}^\nu \cup \{B^\nu\}$, $\mathcal{N}^{\nu+1} := \mathcal{N}^\nu \setminus \{B^\nu\}$ とする．さもなくば，$\mathcal{E}^{\nu+1} := \tilde{\mathcal{E}}^\nu$, $\mathcal{N}^{\nu+1} := \mathcal{N}^\nu$ とする．同様に凹化パラメータ集合も更新し，$\alpha^{\nu+1}$ を得る．

$\nu := \nu + 1$ として Step 1 へ．

Step 2 では終了条件として 2 つの条件を課しているが，条件 (i) は x^ν の実行可能性が十分満たされていることを意味し，条件 (ii) は $\lambda_b^\nu > 0$ であるようなブロック B において $g(x^\nu, y_B^\nu)$ と $g_B(x^\nu, y_B^\nu)$ が十分近い値を持つことを意味する．実際，条件 (i) を γ-緩和実行可能性条件といい，条件 (ii) を ε-緩和相補性条件という．

次に，αBB-切除平面法の Step 3 における改良ステップについて述べる．本研究で用いる改良ステップでは，定義 2.4(c) で定義される有効ボックスの中でも特に以下で定義されるような $\varepsilon_\cup$-有効ボックスに対してのみ分割を行う．

定義 3.1 パラメータ $\varepsilon_\cup > 0$, および半無限計画問題 $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E}, \alpha)$ が与えられているとする．また，$\overline{x}$ を $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E}, \alpha)$ の最適解であるとする．このとき，ボックス B が有効ボックスでかつ以下の式を満たすならば，ボックス B を $\varepsilon_\cup$-有効ボックスであるという．

$$\max_i \left(\frac{\min((\overline{y}_B - l_B)_i, (u_B - \overline{y}_B)_i)}{(u_B - l_B)_i} \right) > \varepsilon_\cup$$

ただし，$(\cdot)_i$ はベクトルの i 番目の成分を表す．また，$\overline{y}_B := \mathrm{argmax}_{y \in B}\, g_B(\overline{x}, y)$ は有効ボックス B における有効添字を表す．

添字集合 Y が 1 次元の場合は $\varepsilon_\cup$-有効ボックス ($\varepsilon_\cup$-有効区間) B を分割する際に，有効添字 $\overline{y}_B$ の左右で 2 分割すればよかった．しかし Y が多次元の場合，分割の方法がいくつか考えられる．そこで本研究では異なる 3 つの分割方法を考え，それらを組み込んだ 3 つの改良ステップを提案する．いずれの改良ステップも $\mathcal{E}, \alpha$ を入力とし，$\tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\alpha}$ を出力としていることに注意する．

改良ステップ A ボックス集合 $\mathcal{E} := \{B_1, B_2, \ldots, B_p\}$ およびパラメータ集合 $\alpha = \{\alpha_{B_1}, \alpha_{B_2}, \ldots, \alpha_{B_p}\}$ が与えられているとする．

Step 0: $\tilde{\mathcal{E}} = \emptyset, \tilde{\alpha} = \emptyset$ とする．$k = 1$ とする．

Step 1: B_k が $\varepsilon_\cup$-有効ボックスであるならばステップ 2 へ．そうでなければ $\tilde{\mathcal{E}} := \tilde{\mathcal{E}} \cup \{B_k\}, \tilde{\alpha} := \tilde{\alpha} \cup \{\alpha_{B_k}\}$ としてステップ 3 へ．

Step 2: $\{0,1\}^t \subset \mathbb{R}^t$ に属する 2^t 個の 0-1 ベクトルを v^j $(j = 1, 2, \ldots, 2^t)$ とおき，各 $j = 1, 2, \ldots, 2^t$ に対してベクトル $l^j, u^j \in \mathbb{R}^t$ を

$$l_i^j := \begin{cases} (l_{B_k})_i & (v_i^j = 0) \\ (\overline{y}_{B_k})_i & (v_i^j = 1) \end{cases}, \quad u_i^j := \begin{cases} (\overline{y}_{B_k})_i & (v_i^j = 0) \\ (u_{B_k})_i & (v_i^j = 1) \end{cases} \quad (i = 1, 2, \ldots, t)$$

で定義する．ここで，$\overline{y}_{B_k} \in \mathbb{R}^t$ はブロック B_k における有効添字ベクトルである．[*2]さらに

[*2] アルゴリズム 3.1 においては Step 1 で求めた $\overline{y}_B^\nu (B \in \mathcal{E}^\nu)$ を用いればよい

各 $j=1,2,\ldots,2^t$ に対して

$$B_k^j := \{y \in \mathbb{R}^t \,|\, l^j \le y \le u^j\}$$

とし，パラメータ $\alpha_{B_k}^1,\ldots,\alpha_{B_k}^{2^t}$ を (2.2) を満たすように与える．

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{E}} &:= \tilde{\mathcal{E}} \cup \{B_k^1,\ldots,B_k^{2^t}\}\\ \tilde{\alpha} &:= \tilde{\alpha} \cup \{\alpha_{B_k}^1,\ldots,\alpha_{B_k}^{2^t}\}\end{aligned}$$

とし，ステップ 3 へ．

Step 3: $k=p$ ならば反復を終了して $\tilde{\mathcal{E}},\tilde{\alpha}$ を出力する．そうでなければ $k=k+1$ としてステップ 1 へ

改良ステップ A の Step 2 は一見複雑に見えるが，言い換えると，有効添字ベクトル $\overline{y}_{B_k} \in B_k$ を通り，各座標軸に垂直となるような t 個のすべての超平面でもってブロック B_k を分割しているということである．したがって，1 つの $\varepsilon_\cup$-有効ボックスは 2^t 個のボックスに分割されることとなる．

一方，以下の改良ステップ B では各 $\varepsilon_\cup$-有効ボックスは 2 つのボックスのみに分割される．

改良ステップ B ボックス集合 $\mathcal{E} := \{B_1,B_2,\ldots,B_p\}$ およびパラメータ集合 $\alpha = \{\alpha_{B_1},\alpha_{B_2},\ldots,\alpha_{B_p}\}$ が与えられているとする．

Step 0: $\tilde{\mathcal{E}}=\emptyset, \tilde{\alpha}=\emptyset$ とする．$k=1$ とする．

Step 1: B_k が $\varepsilon_\cup$-有効ボックスであるならばステップ 2 へ．そうでなければ $\tilde{\mathcal{E}} := \tilde{\mathcal{E}} \cup \{B_k\}, \tilde{\alpha} := \tilde{\alpha} \cup \{\alpha_{B_k}\}$ としてステップ 3 へ．

Step 2: 有効添字ベクトル $\overline{y}_{B_k} \in B_k$ に対して，$i_k \in \mathrm{argmax}_i\{\min((\overline{y}_{B_k} - l_{B_k})_i, (u_{B_k} - \overline{y}_{B_k})_i)\}$ を求める．さらにベクトル $u'_{B_k}, l'_{B_k} \in \mathbb{R}^t$ をそれぞれ

$$(u'_{B_k})_i := \begin{cases} (u_{B_k})_i & (i \ne i_k) \\ \dfrac{(l_{B_k})_i + (u_{B_k})_i}{2} & (i = i_k) \end{cases}, \quad (l'_{B_k})_i = \begin{cases} (l_{B_k})_i & (i \ne i_k) \\ \dfrac{(l_{B_k})_i + (u_{B_k})_i}{2} & (i = i_k) \end{cases}$$

とし，$B_k^1 := \{y | l_{B_k} \le y \le u'_{B_k}\}, B_k^2 := \{y | l'_{B_k} \le y \le u_{B_k}\}$ とする．パラメータ $\alpha_{B_k}^1, \alpha_{B_k}^2$ を (2.2) を満たすように与え，

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{E}} &:= \tilde{\mathcal{E}} \cup \{B_k^1, B_k^2\}\\ \tilde{\alpha} &:= \tilde{\alpha} \cup \{\alpha_{B_k}^1, \alpha_{B_k}^2\}\end{aligned}$$

とする．ステップ 3 へ

Step 3: $k=p$ ならば反復を終了して $\tilde{\mathcal{E}},\tilde{\alpha}$ を出力する．そうでなければ $k=k+1$ としてステップ 1 へ

上記改良ステップ B の Step 2 では，各座標ごとに有効添字ベクトル $\overline{y}_{B_k}$ とボックス B_k の境界面との距離を測り，それが最大となるような座標軸 (第 i_k 座標軸) に対して垂直な超平面で B_k を 2 等分している．

以下の改良ステップ C でも各 $\varepsilon_\cup$-有効ボックスは 2 つのボックスのみに分割されるが，分割のされ方が改良ステップ B とは異なる．

改良ステップ C ボックス集合 $\mathcal{E} := \{B_1, B_2, \ldots, B_p\}$ およびパラメータ集合 $\alpha = \{\alpha_{B_1}, \alpha_{B_2}, \ldots, \alpha_{B_p}\}$ が与えられているとする．

Step 0: $\tilde{\mathcal{E}} = \emptyset, \tilde{\alpha} = \emptyset$ とする．$k = 1$ とする．

Step 1: B_k が $\varepsilon_\cup$-有効ボックスであるならばステップ 2 へ．そうでなければ $\tilde{\mathcal{E}} := \tilde{\mathcal{E}} \cup \{B_k\}, \tilde{\alpha} := \tilde{\alpha} \cup \{\alpha_{B_k}\}$ としてステップ 3 へ．

Step 2: 有効添字ベクトル $\overline{y}_{B_k} \in B_k$ に対して，$i_k \in \mathrm{argmax}_i \{\min((\overline{y}_{B_k} - l_{B_k})_i, (u_{B_k} - \overline{y}_{B_k})_i)\}$ を求める．さらにベクトル $u'_{B_k}, l'_{B_k} \in \mathbb{R}^t$ をそれぞれ

$$(u'_{B_k})_i := \begin{cases} (u_{B_k})_i & (i \neq i_k) \\ \left(\overline{y}_{B_k}\right)_i & (i = i_k) \end{cases}, \quad (l'_{B_k})_i = \begin{cases} (l_{B_k})_i & (i \neq i_k) \\ \left(\overline{y}_{B_k}\right)_i & (i = i_k) \end{cases}$$

とし，$B_k^1 := \{y | l_{B_k} \leq y \leq u'_{B_k}\}, B_k^2 := \{y | l'_{B_k} \leq y \leq u_{B_k}\}$ とする．パラメータ $\alpha^1_{B_k}, \alpha^2_{B_k}$ を (2.2) を満たすように与え，

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{E}} &:= \tilde{\mathcal{E}} \cup \{B_k^1, B_k^2\} \\ \tilde{\alpha} &:= \tilde{\alpha} \cup \{\alpha^1_{B_k}, \alpha^2_{B_k}\} \end{aligned}$$

とする．ステップ 3 へ

Step 3: $k = p$ ならば反復を終了して $\tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\alpha}$ を出力する．そうでなければ $k = k + 1$ としてステップ 1 へ

上記改良ステップ C の Step 2 では，改良ステップ B と同様，各座標ごとに有効添字ベクトル $\overline{y}_{B_k}$ とボックス B_k の境界面との距離を測っているが，有効添字ベクトル $\overline{y}_{B_k} \in B_k$ を通り，それが最大となるような座標軸 (第 i_k 座標軸) に対して垂直な超平面で B_k を 2 分割しているという点で改良ステップ B と異なっている．

最後にアルゴリズム 3.1 の Step 1 において $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E}^\nu, \alpha^\nu)$ を解くための手法を述べる．実際そのような手法はいくつか考えられるが，本論文では次の古典的な切除平面法を用いる．

アルゴリズム 3.2 (切除平面法) ボックス集合 $\mathcal{E} := \{B_1, B_2, \ldots, B_p\}$ およびパラメータ集合 $\alpha = \{\alpha_{B_1}, \alpha_{B_2}, \ldots, \alpha_{B_p}\}$ が与えられているとする．

Step 0: 各ボックス $B_k(k=1,2,\ldots,p)$ に対して，$|T^1_{B_k}|<\infty$ かつ $T^1_{B_k}\subseteq B_k$ を満たすような有限添字集合 $T^1_{B_k}$ を決定する．$j:=1$ とする．

Step 1: 以下の問題を解いて最適解 $\tilde{x}^j$ を得る．

$$
\begin{aligned}
\underset{x\in X}{\text{minimize}} \quad & f(x) \\
\text{subject to} \quad & g_{B_1}(x,y)\le 0 \quad (y\in T^j_{B_1}) \\
& \vdots \\
& g_{B_p}(x,y)\le 0 \quad (y\in T^j_{B_p})
\end{aligned}
\tag{3.1}
$$

Step 2: 各ボックス $B_k(k=1,2,\ldots,p)$ に対して以下の問題の最適解 $\tilde{y}_{B_k}$ を求める．

$$
\text{maximize } g_{B_k}(\tilde{x}^j,y) \quad \text{subject to}\, y\in B_k \tag{3.2}
$$

すべての $k=1,2,\ldots,p$ に対して $g_{B_k}(\tilde{x}^j,\tilde{y}_{B_k})\le 0$ が成り立つならば，$\tilde{x}^j$ を $\mathrm{SIP}_{\alpha\mathrm{BB}}(\mathcal{E},\alpha)$ の最適解として出力し，反復終了．そうでなければ，$k=1,2,\ldots,p$ に対して

$$
T^{j+1}_{B_k}:=\begin{cases} T^j_{B_k}\cup\{\tilde{y}_{B_k}\} & \text{if} \quad g_{B_k}(\tilde{x}^j,\tilde{y}_{B_k})>0 \\ T^j_{B_k} & \text{if} \quad g_{B_k}(\tilde{x}^j,\tilde{y}_{B_k})\le 0 \end{cases}
$$

とおく．$j:=j+1$ としてステップ 1 へ．

上記アルゴリズムにおいて問題 (3.1) は高々有限個の不等式制約しか持たないので，逐次二次計画法といった既存の非線形計画問題に対するアルゴリズムが適用できる．また，問題 (3.2) は目的関数が狭義凹で制約領域が凸かつコンパクトであるため，最適解が一意に存在することが保証される．

4 数値実験

この節では前節で提案したアルゴリズムの有用性を示すため，デザインセンタリング問題に対してアルゴリズムを適用した数値実験の結果を示す．

4.1 デザインセンタリング問題

デザインセンタリング問題では $x\in X\subseteq\mathbb{R}^n$ でパラメータ化された図形 $B(x)$ とある与えられた領域 C を考え，$B(x)$ が C に収まるという条件のもと目的関数 f(例えば $B(x)$ の体積など) を最大化する問題である [7]．例えばカットされる前のダイアモンドの領域が C で表されているとし，その中から最も体積の大きい図形 $B(x)$ $(x\in X)$ を取り出すという問題がデザインセンタリング問題の一例である．この問題は以下のように定式化される．

$$\underset{x\in X}{\text{maximize}}\ \ f(x)\ \ \text{subject to}\ \ B(x)\subseteq C$$

本実験では，3 次元実空間の部分集合 C に含まれる半径最大の球を求めるデザインセンタリング問題を考える．$B(x)\subset\mathbb{R}^3$ を点 (x_1,x_2,x_3) を中心とした半径 x_4 の球，すなわち，$B(x):=\{z\in\mathbb{R}^3\,|\,\|z-(x_1,x_2,x_3)\|\le x_4\}$ とし，$C\subseteq\mathbb{R}^3$ を関数 $c:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}^l$ を用いて

$$C:=\{z\in\mathbb{R}^3\,|\,c(z)\le 0\}$$

で与えられる領域とする．ただし，関数 c は

$$\partial B(x)\subseteq C\iff B(x)\subseteq C$$

が任意の $x\in\mathbb{R}^4$ に対して成り立つように選ぶものとする．[*3] ここで，

$$z(x,y):=\left(\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}+x_4\begin{pmatrix}\sin y_1\cos y_2\\\sin y_1\sin y_2\\\cos y_1\end{pmatrix}\right)$$

とすると，$\partial B(x)=\{z(x,y)\,|\,y\in[0,\pi]\times[0,2\pi]\}$ であるので，

$$g(x,y):=c(z(x,y)),\quad Y:=[0,\pi]\times[0,2\pi] \tag{4.1}$$

とおくことにより，以下の関係を得る．

$$B(x)\subseteq C\iff\partial B(x)\subseteq C\implies g(x,y)\le 0,\ \forall y\in Y$$

したがって，本節で解くべきデザインセンタリング問題は次の半無限計画問題に定式化できる．

$$\underset{x\in X}{\text{maximize}}\ x_4\ \ \text{subject to}\ \ g(x,y)\le 0,\ \forall y\in Y \tag{4.2}$$

ただし，本実験では $X=\mathbb{R}^4$ とし，関数 g および集合 y は（4.1）式で与えられるものとする．

4.2　実験結果

本実験は CPU が Intel(R)Core(TM)i5 2.27GHz であり，メモリが 4GB であるような計算機上で行い，アルゴリズムは MATLAB 7.10.0 (R2010a) を用いて実装した．また αBB-切除平面法の Step 2，および切除平面法の Step 1，Step 2 では部分問題を解くために Matlab Optimization Toolbox の fmincon ソルバーを用いた．

本実験では，集合 C を構成する関数 c として

$$c(z)=\frac{1}{2}z^\top Mz+p^\top|z|^{\frac{3}{2}}+q^\top z+r$$

[*3] 集合 C が単連結 (simply connected) であれば，この関係は常に成り立つ [2]．また任意の凸集合は単連結であることが知られている．

を用いた．ただし，

$$M := \begin{bmatrix} 14 & -4 & 3 \\ -4 & 15 & -1 \\ 3 & -1 & 9 \end{bmatrix},\ p := \begin{pmatrix} 0.4 \\ 0.3 \\ 0.1 \end{pmatrix},\ q := \begin{pmatrix} -56 \\ -83 \\ -78 \end{pmatrix},\ r := 700,\ |z|^{\frac{3}{2}} := \begin{pmatrix} |z_1|^{\frac{3}{2}} \\ |z_2|^{\frac{3}{2}} \\ |z_3|^{\frac{3}{2}} \end{pmatrix}.$$

である．ここで，$M \succ 0$ および $p > 0$ に注意すると，関数 c が凸であることが分かる．このように定義されたデザインセンタリング問題 (4.2) に対して 3 節で提案したアルゴリズム 3.1 と 3 通りの改良ステップ A〜C を適用し，結果を比較した．なお，初期ボックス集合およびパラメータの選び方は次のようにした．

- アルゴリズム 3.1 の Step 0 における初期ボックス集合の選び方は次のようにした．添字集合 $Y = [0, \pi] \times [0, 2\pi]$ の各辺を 7 等分し，計 49 個のボックス $B_1^0, B_2^0, \ldots, B_{49}^0$ を生成した．さらにそれらの中央に位置するボックス $B_{25}^0 = [3\pi/7, 4\pi/7] \times [6\pi/7, 8\pi/7]$ に対して $\mathcal{E}^1 := \{B_{25}^0\}, \mathcal{N}_1 := \{B_1^0, \ldots, B_{24}^0,\ B_{26}^0, \ldots, B_{49}^0\}$ とした．
- アルゴリズム 3.1 の Step 0 において，$\gamma = 10^{-5}$ とした．また，ε として 10^{-3} と 10^{-5} の 2 通りの値を選んだ．
- アルゴリズム中で生成されるすべてのボックスに対して，$\alpha_B = 17$ とした．
- 各改良ステップにおいて，$\varepsilon_\cup = 0.01$ とした．
- 各改良ステップにおいて，$|\operatorname{argmax}_{y \in B} g_B(x^\nu, y)| < 10^{-4}$ が成り立つようなブロック B を有効ブロックと判定した．

得られた結果を表 1〜表 4 に示す．各表において A〜C はそれぞれの改良ステップ A〜C を用いて得られた結果と対応する．表 1 はアルゴリズム 3.1 の Step 2 において終了条件が満たされた際の有効ブロックと有効でないブロックの個数を表している．ただし，Step 0 において $\varepsilon = 10^{-5}$ としている．表 2，表 3 はそれぞれ $\varepsilon = 10^{-3}$ および $\varepsilon = 10^{-5}$ とした場合のアルゴリズム 3.1 の所要計算時間，および得られた解を示している．表 4 は各外部反復 $\nu = 1, 2, \ldots$ に対して Step 2 で計算された ζ_{B^ν} の値を示している．なお，$\zeta_{B^\nu} \leq 0$ のとき x^ν は SIP(1.1) の実行可能領域に入っており，$\zeta_{B^\nu} > 0$ のとき x^ν は SIP(1.1) に対して実行不可能であることに注意する．

表 1　有効ブロックと有効でないブロックの数 ($\varepsilon = 10^{-5}$)

	有効	有効でない
A	3	430
B	2	105
C	3	92

表 2　計算時間 (秒)

	$\varepsilon=10^{-3}$	$\varepsilon=10^{-5}$
A	238	770
B	140	176
C	229	418

表 3　得られた解 $(x_1,x_2,x_3,x_4)^\top$

	$\varepsilon=10^{-3}$	$\varepsilon=10^{-5}$
A	$(4.2303, 7.1145, 7.9998, 1.5353)^\top$	$(4.2312, 7.1153, 7.9996, 1.5353)^\top$
B	$(4.2300, 7.1152, 8.0025, 1.5353)^\top$	$(4.2313, 7.1153, 7.9994, 1.5353)^\top$
C	$(4.2311, 7.1153, 7.9997, 1.5353)^\top$	$(4.2314, 7.1153, 7.9998, 1.5353)^\top$

表 4　各ループにおける ζ_B の変化

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
A	89.5	3.74	0.87	1.54	0.58	0.17	-0.53	-0.58	-0.36	-0.38	-0.45	-0.45
B	89.5	3.74	0.67	1.42	0.45	0.19	-0.43	-0.63	-0.45	-0.51	-0.41	-0.45
C	89.5	3.74	0.51	1.24	0.36	0.03	-0.70	-0.61	-0.59	-0.56	-0.52	-0.52

各表から得られた結果より次のようなことが考察される．表 1 および 2 から改良ステップ A は有効でないブロックにおいて無駄な計算をより多くしているため，全体の所要時間がより大きいことが分かる．また，最も速い改良ステップ B でも 105 個の有効でないブロックを部分問題の計算に含むことからまだまだ無駄な計算が相当多いことがわかる．このような有効でないブロックをうまく破棄しながら反復を繰り返すアルゴリズムを構築することができれば，より一層の計算時間の短縮につながることが期待できる．表 3 は各改良ステップにより得られた解であるが，かなり近い値を出力していることが見て取れる．特に，目的関数 x_4 はいずれの場合もほとんど同じ値である．また，表 4 より，生成された点列は 7 回目の反復で実行可能領域に入り，その後，実行可能領域の内部から最適解に近づいていることがわかる．つまり，反復をある程度の回数で打ち切ったときに，その反復点における最適性の保証はされないものの，十分な最適性と完全な実行可能性が満たされているという点で本アルゴリズムの有用性が確認できる．実際，離散化法や交換法といったアルゴリズムでは一般に点列を実行可能性の外側に生成するため，そのような点で本アルゴリズムは

有利であることが分かる．

5　結論

本報告書では添字集合 Y が多次元であるような半無限計画問題に対して，Shiu と Wu の提案した αBB-切除平面法を拡張した．また数値実験ではデザインセンタリング問題に対して提案手法を適用し，その有効性を確認した．今後の課題としてはアルゴリズムの収束性に対する理論的保証を与えること，より高速なアルゴリズムを開発することなどが挙げられる．

謝辞

日頃から御教授下さり，本報告書の作成にあたっては細部に至るまで様々な御指摘と適切な御指導を賜った林俊介助教に深く感謝の意を表します．また，日頃からお世話になっている福嶋雅夫教授，山下信雄准教授，福嶋研究室の皆様に厚く御礼申し上げます．

参考文献

[1] Betro, B.: An accelerated central cutting plane algorithm for linear semi-infinite programming. Mathematical Programming 101, 479–495 (2004)

[2] Floudas, C. A., Stein, O.: The adaptive convexification algorithm: a feasible point method for semi-infinite programming. SIAM Journal on Optimization 18, 1187–1208 (2007)

[3] Gramlich, G., Hettich, R., Sachs, E. W.: Local convergence of SQP methods in semi-infinite programming. SIAM Journal on Optimization 5, 641–658 (1995)

[4] 林　俊介：半無限計画問題, 太田快人, 酒井英明, 高橋豊, 田中利幸, 永持仁, 福島雅夫 (編), 数理工学事典, 朝倉書店, 563–566 (2011)

[5] Kortanek, K., No, H.: A central cutting plane algorithm for convex semi-infinite programming problems. SIAM Journal on Optimization 3, 901–918 (1993)

[6] Price, C. J., Coope, C.J.: Numerical experiments in semi-infinite programming. Computational Optimization and Applications 6, 169–189 (1996)

[7] Polak, E.: An implementable algorithm for the optimal design centering, tolerancing and turning problem, Journal of Optimization Theory and Applications, 37, 45–67 (1982)

[8] Polak, E.: Optimization. Algorithms and Consistent Approximations. Springer, Berlin-Heidelberg-New York (1997)

[9] Shapiro, A.: Semi-infinite programming, duality, discretization and optimality condition. Optimization 58, 133–161 (2009)

[10] Shiu, T. J., Wu, S. Y.: Relaxed cutting plane method with convexification for solving nonlinear semi-infinite programming problems, technical report, National Cheng-Kung University, Taiwan (2011).

[11] Still, G.: Discretization in semi-infinite programming: the rate of convergence. Mathematical Programming 91, 53–69 (2001)

[12] Tanaka, Y., Fukushima, M., Ibaraki, T.: A globally convergent SQP method for semi-infinite nonlinear optimization. Journal of Computational and Applied Mathematics 23, 141–153 (1988)

[13] Teo, K. L., Yang, X. Q., Jennings, L. S.: Computational discretization algorithms for functional inequality constrained optimization. Annals of Operations Research 28, 215–234 (2000)