1998年度日本オペレーションズ・リサーチ学会
春季研究発表会

大規模な非線形最適化問題に対する主双対内点法について

01701240　数理システム　＊山下　浩　YAMASHITA Hiroshi
01702330　東京理科大学理学部　矢部　博　YABE Hiroshi
01307380　数理システム　田辺隆人　TANABE Takahito

1. はじめに

本稿では，非線形最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \\ \text{subject to} & g(x)=0,\ x \geq 0, \end{array}$$

を解くための主双対内点法を考える．ただし，$f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^1$，$g:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ である．Lagrange 関数を

$$L(w)=f(x)-y^t g(x)-z^t x$$

と定義したとき，Karush-Kuhn-Tucker(KKT) 条件は

$$r_0(w)=\begin{pmatrix} \nabla_x L(w) \\ g(x) \\ XZe \end{pmatrix}=0, \quad x \geq 0,\ z \geq 0,$$

で表される．ただし，$w=(x,y,z)^t$ とし，$y \in \mathbb{R}^m$ と $z \in \mathbb{R}^n$ はそれぞれ等式制約条件と非負条件に関する Lagrange 乗数であり，また，$A(x)$ はその行ベクトルが $\nabla g_i(x)^t$ からなる $m\times n$ 行列，$X=\mathrm{diag}\,(x_1,\cdots,x_n)$，$Z=\mathrm{diag}\,(z_1,\cdots,z_n)$，$e=(1,\cdots,1)^t \in \mathbb{R}^n$ である．主双対内点法では，正のパラメータμを導入して，KKT 条件を緩和した次の条件

$$r(w,\mu)=\begin{pmatrix} \nabla_x L(w) \\ g(x) \\ XZe-\mu e \end{pmatrix}=0, \quad x>0, \quad z>0,$$

を満足する $w(\mu)$ を求めることを考える．そして，最終的に μ の値をゼロに近づける．この条件は，ペナルティパラメータ$\rho > 0$ が十分に大きいときのバリヤペナルティ関数

$$F(x,\mu)=f(x)-\mu \sum_{i=1}^{n} \log(x_i)+\rho \sum_{i=1}^{m} |g_i(x)|,$$

を最小化する問題の最適性条件にも相当するので，バリヤ KKT 条件とも呼ばれる．

主双対内点法の基本的な考え方は，バリヤ KKT 条件にニュートン法を適用するもので，k回目の反復で

$$J(w_k)\Delta w_k=-r(w_k,\mu)$$

を解いてΔw_kを得る．ただし，$G=\nabla_x^2 L(w)$,

$$\Delta w_k=\begin{pmatrix} \Delta x_k \\ \Delta y_k \\ \Delta z_k \end{pmatrix},\ J(w)=\begin{pmatrix} G & -A(x)^t & -I \\ A(x) & 0 & 0 \\ Z & 0 & X \end{pmatrix}.$$

Yamashita and Tanabe[1] は，$F(x,\mu)$ をメリット関数とする信頼領域法を用いた解法の大域的収束性を示した．他方，局所的超1次・2次収束性に関しては，Yamashita and Yabe(1996) の研究がある．しかしながら，バリヤペナルティ関数に微分不可能な項（l_1型正確なペナルティ関数）が含まれているので，いわゆる Maratos 効果が生じて，このままでは大域的収束性と局所的に速い収束性が両立するとは限らない．そこで本稿では，Maratos 効果を回避する主双対内点法を提案し，その大域的収束性と超1次収束性を示す．基本的なアイデアは，[2] で提案した非単調アルゴリズムを利用することである．(なお，以下では $\|\cdot\|$ はl_2ノルムを表す)

2. 主双対内点信頼領域法

本節で提案する解法の本質的な特徴は，Step 2 の非単調手順にある．バリヤペナルティ関数の過去の値の情報を持ったパラメータλ_kに対して $F(x_k+\alpha_k\Delta x_k,\mu_k)<\lambda_k$ を満たすならば，関数値が増加しても $x_k+\alpha_k\Delta x_k$ を新しい点の候補に選び (Step 2.3 参照)，さらにバリヤ KKT 条件を近似的に満足するならば $w_k+\Lambda_k\Delta w_k$ を w_{k+1} として採用する (Step 2.5 参照)．そうでないときには信頼領域法を実行してバリヤペナルティ関数を単調に減少させる (Step 3 参照)．Step 2 のような非単調手順を利用することによって，Maratos 効果を回避することが可能になる．

提案する解法のアルゴリズムは以下の通りである．

[アルゴリズム IPTR]

Step 0. (初期設定) パラメータ $\rho>0$, $M_c>0$，$\varepsilon>0$ を与える．$\|r(w_0,\mu_{-1})\| \leq M_c\mu_{-1}$ を満足する初期点 $w_0 \in \mathbb{R}_+^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}_+^n$ と正のバリヤ・パラメータ μ_{-1} を与える (実際は，任意の初期点で良い)．また，$\lambda_0=F(x_0,\mu_{-1})$，$k=0$ とおく．

Step 1. (収束判定) もし $\|r_0(w_k)\| \leq \varepsilon$ ならば停止する．さもなければ，$\mu_k \in (0,\mu_{k-1})$ を選ぶ．

Step 2. (非単調手順)

Step 2.1 $J(w_k)\Delta w_k = -r(w_k, \mu_k)$ の解Δw_kを求める．もし $J(w_k)$ が正則でないならば，$\lambda_{k+1} = \lambda_k$ とおいて Step 3 へ行く．

Step 2.2 $x_k + \alpha_{xk}\Delta x_k > 0$，$z_k + \alpha_{zk}\Delta z_k > 0$ を満たすステップ幅$\Lambda_k = \mathrm{diag}(\alpha_{xk}I_n, \alpha_{yk}I_m, \alpha_{zk}I_n) > 0$ を求める．

Step 2.3 もし $F(x_k + \alpha_{xk}\Delta x_k, \mu_k) \geq \lambda_k$ ならば，$\lambda_{k+1} = \lambda_k$ とおいて Step 3 へ行く．

Step 2.4 $\lambda_{k+1} \in [\max\{F(x_k, \mu_k), F(x_k + \alpha_{xk}\Delta x_k, \mu_k)\}, F(x_0, \mu_{-1})]$ を選ぶ．

Step 2.5 もし $\|r(w_k + \Lambda_k \Delta w_k, \mu_k)\| \leq M_c \mu_k$ ならば，$w_{k+1} = w_k + \Lambda_k \Delta w_k$ とおいて Step 4 へ行く．さもなければ Step 3 へ行く．

Step 3. (信頼領域法) $F(x, \mu_k) \leq \lambda_k$ を満たす点を初期点とした信頼領域法を実行して，$\|r(w_{k+1}, \mu_k)\| \leq M_c \mu_k$ を満足する点 w_{k+1} を求める．

Step 4. $k = k + 1$ とおいて Step 1 へ行く．□

大域的収束性を示すために，次の条件を仮定する．

仮定 G (大域的収束性)

(G1) f と $g_i, i = 1, ..., m$, は２回連続的微分可能である．

(G2) $\mu > 0$ に対して，初期点 $x_0 \in \mathbf{R}^n_+$ におけるバリヤペナルティ関数の準位集合はコンパクトである．

(G3) 行列 $A(x)$ は上記の準位集合上でフルランクである．

(G4) 行列 D は一様正定値でかつ一様有界である．行列 Q と G は一様有界である．

(G5) $\|\Delta x_k\| \leq M \|\Delta x_{SDk}\|$，$\|s_k\| \leq M \|\Delta x_{SDk}\|$ を満足する数 $M > 0$ が存在する．ただし，Δw_{SD} は $J(w)$ で G を D で置き換えたニュートン方程式の解である．

(G6) ペナルティ・パラメータ ρ は，各 k に対して$\rho \geq \|y_k + \Delta y_{SDk}\|_\infty$ を満たす．□

以上の仮定のもとで，固定したμに対して Step 3 の信頼領域法が大域的収束することと $\mu_k \to 0$ であることを考慮すれば，次の定理が得られる．

[**定理１**] (アルゴリズム IPTR の大域的収束性)
$\{\mu_k\}$ を $\mu_k \downarrow 0$ となるバリヤ・パラメータの列としたとき，アルゴリズム IPTR によって生成される点列を $\{w_k\}$ とする．点列 $\{x_k\}$ と $\{y_k\}$ を有界であると仮定する．このとき点列 $\{z_k\}$ は有界になり，かつ，$\{w_k\}$ の任意の集積点は最適化問題の KKT 条件を満足する．□

次にアルゴリズム IPTR の超１次収束性を示す．そのために，次の条件を仮定する．

仮定 L (超１次収束性)

(L1) 点列 $\{w_k\}$ は w^* に収束する．

(L2) f と gの２階導関数は x^* で Lipschitz 連続である．

(L3) 解 w^* において，効いている制約条件の法線ベクトルは１次独立であり，最適解であるための２次の十分条件と狭義の相補条件が成り立つ．

(L4) 各反復で $\rho \geq \|y_k\|_\infty + \zeta$ が成り立つ．ただし，ζ は正の定数である．

(L5) パラメータ μ_k と γ_k は$\mu_k = \xi_k \|r_0(w_k)\|^{1+\tau_1}$，$1 - \gamma_k = \xi'_k \|r_0(w_k)\|^{\tau_2}$ を満たすように更新される．ただし，τ_1 と τ_2 は $\min(1, \tau_2) > \tau_1 > \sqrt{2} - 1$ かつ $\tau_2 \geq 1$ を満たす正の定数であり，ξ_k と ξ'_k は$\frac{1}{M'} \leq \xi_k \leq M'$，$\frac{1}{M'} \leq \xi'_k \leq M'$ を満たす正の数である（M' は正の定数）．

(L6) $0 < M_c < 1$.

(L7) $(x^*)_{\hat{i}} = 0$ となる $\hat{i}$ が存在する．□

なお，Step 2.2 のステップ幅は次のように選ばれる．

$$\alpha_{xk} = \min\left\{1,\ \gamma_k \min_i \left\{ -\frac{(x_k)_i}{(\Delta x_k)_i} \middle| (\Delta x_k)_i < 0 \right\}\right\},$$

$$\alpha_{zk} = \min\left\{1,\ \gamma_k \min_i \left\{ -\frac{(z_k)_i}{(\Delta z_k)_i} \middle| (\Delta z_k)_i < 0 \right\}\right\},$$

$$\alpha_{yk} = 1,\ \text{または}\ \alpha_{xk},\ \text{または}\ \alpha_{zk},\quad \gamma_k \in (0, 1).$$

結局，仮定 L のもとで，次の定理が証明される．

[**定理２**] (アルゴリズム IPTR の超１次収束性)
十分に大きな k に対して $w_{k+1} = w_k + \Lambda_k \Delta w_k$ が採用され，点列 $\{w_k\}$ と $\{x_k\}$ は超１次収束する．□

3. 数値実験

数値実験は，最適化問題を解くためのコード NUOPT 3.0 を利用して行った [3]．テスト問題は，Hock and Schittkowski(1981) の全問 114 題，CUTE(1993) から選んだ 164 題（20 変数以上，20 制約以上，ヘッセ行列が解析的に求まる問題）を用いた．実験結果は，前者の全問を，後者の 164 題中 150 題を解くことに成功し，実験的にも超１次収束の振る舞いが観測された．

参考文献

[1] H.Yamashita and T.Tanabe, A primal-dual interior point trust region method for large scale constrained optimization, *Optimization – Modeling and Algorithms 6*, Cooperative Research Report 73, The Institute of Statistical Mathematics, March (1995), pp.1-25.

[2] H.Yamashita and H.Yabe, Nonmonotone SQP methods with global and superlinear convergence properties, *Optimization – Modeling and Algorithms 8*, Cooperative Research Report 84, The Institute of Statistical Mathematics, March (1996), pp.10-29.

[3] H.Yamashita, H.Yabe and T.Tanabe, *A globally and superlinearly convergent primal-dual interior point trust region method for large scale constrained optimization* Technical Report, Mathematical Systems, Inc., Tokyo, Japan, July 1997 (revised December 1997).