ペナルティ関数を用いない信頼領域逐次２次計画法

01702330　東京理科大学　＊矢部　博　YABE Hiroshi
01701240　数理システム　山下　浩　YAMASHITA Hiroshi
01308410　数理システム　壇　寛成　DAN Hiroshige

1. はじめに

以下の非線形最適化問題を考える.

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

ただし $f: \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$, $g_i: \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}, i=1,...,m$ は滑らかな関数であり, $g(x)=(g_1(x),\ldots,g_m(x))^t$ とする. この問題を解くための有力な数値解法として乗数法, 逐次２次計画法, 内点法などが知られているが, その大域的収束性の実現は, 実行可能性と最適性を一元化したペナルティ関数をメリット関数に用いた直線探索法や信頼領域法に依るものがほとんどである. しかしながらペナルティ関数の使用は, 実用的なパラメータの選び方が必ずしも容易ではないという問題点もある.

最近, 実行可能性と最適性を別々に扱って, ペナルティ関数を用いない数値解法の研究が注目されている [1],[2]. かつて山下 [3] はペナルティ関数を利用しない数値解法を提案し, 直線探索法を用いてその大域的収束性を示した. 本稿では, [3] の考え方に習って信頼領域逐次２次計画法を提案し, その大域的収束性を示す.

上記の最適化問題の KKT 条件は

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

で与えられる. ただし $w=(x,y,z)^t$, $\nabla_x L(w)$ はラグランジュ関数

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

の勾配

$$\nabla_x L(w)=\nabla f(x)-A(x)^t y-z,$$

また $A(x)$ は $g(x)$ のヤコビ行列, $X=\mathrm{diag}\,(x_1,\cdots,x_n)$, $Z=\mathrm{diag}\,(z_1,\cdots,z_n)$, $e=(1,\cdots,1)^t \in \mathbf{R}^n$ である. 以後, 記号として

$$\begin{aligned} \Delta f_q(x;s) &= \nabla f(x)^t s+\frac{1}{2}s^t \nabla^2 f(x) s, \\ \Delta f(x;s) &= f(x+s)-f(x) \end{aligned}$$

を定義する.

2. アルゴリズム

我々が提案する数値解法のアルゴリズムは, 以下の通りである.

[Main Algorithm]
(Step 0) $x_0(\geq 0) \in \mathbf{R}^n, \delta_0>0, \varepsilon>0, \tau \in (0,1)$ を与える. $k=0$ とおく.
(Step 1) Restoration Phase: $\|g(x_{k+\frac{1}{2}})\|<\delta_k$ を満たす点 $x_{k+\frac{1}{2}} \geq 0$ を求める.
(Step 2) Minimization Phase: $x_{k+\frac{1}{2}} \geq 0$ を初期点として, $\|\nabla_x L(w_{k+1})\| \leq \delta_k$, $\|g(x_{k+1})\| \leq \delta_k$, $\|X_{k+1}Z_{k+1}e\| \leq \delta_k$, $x_{k+1} \geq 0$, $z_{k+1} \geq 0$ を満たす点 $w_{k+1}=(x_{k+1},y_{k+1},z_{k+1})^t$ を求める.
(Step 3) もし $\|\nabla_x L(w_{k+1})\| \leq \varepsilon$, $\|g(x_{k+1})\| \leq \varepsilon$, $\|X_{k+1}Z_{k+1}e\| \leq \varepsilon$ ならば停止する. さもなければ, $\delta_{k+1}:=\tau\delta_k$, $k:=k+1$ とおいて Step 1 へ行く.

[Restoration Phase のアルゴリズム]
(Step 0) $x_0(\geq 0) \in \mathbf{R}^n, \delta>0, \Delta_0>0, \varepsilon_0 \in (0,1)$, $\beta \in (0,1)$ を与える. $k=0$ とおく.
(Step 1) もし $\|g(x_k)\|<\delta$ ならば停止する.
(Step 2) 行列 G_k を計算する. (G_k はヘッセ行列 $\nabla_x^2 L(w_k)$ もしくはその近似である)
(Step 3) 次の QP 部分問題を解いて探索方向 s_k を求める

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \frac{1}{2}s^t G_k s+\nabla f(x_k)^t s \\ \text{subject to} & g(x_k)+A(x_k)s=0, \\ & x_k+s \geq 0, \quad \|s\|_\infty \leq \Delta_k. \end{array}$$

(必要ならば, 信頼半径 Δ_k は QP 部分問題が実行可能になるように調整される.)
(Step 4) 直線探索を行って次式を満たす非負整数 l_k を求めて, $\alpha_k=\beta^{l_k}$ とおく.

$$\|g(x_k+\beta^{l_k}s_k)\|<\max\{\delta,(1-\varepsilon_0\beta^{l_k})\|g(x_k)\|\}.$$

(Step 5) $x_{k+1}=x_k+\alpha_k s_k$ とおく.
(Step 6) $k:=k+1$ として Step 1 へ行く.

注意: Step 3 では，制約条件 $\|s\|_\infty \leq \Delta_k$ は線形制約 $-\Delta_k e \leq s \leq \Delta_k e$ として扱われる．(以下の問題でも同様)

[Minimization Phase のアルゴリズム]

(Step 0) $w_0 \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m \times \mathbf{R}^n$, $\delta > 0, \Delta_0 > 0$, $\Delta_{T_0} > 0$, $\beta \in (0,1)$ を与える．ただし，$x_0 \geq 0$, $\|g(x_0)\| < \delta$, $\Delta_{T_0} \leq \Delta_0$ である．$k = 0$ とおく．

(Step 1) もし点 w_k が $\|\nabla_x L(w_k)\| \leq \delta$, $\|g(x_k)\| \leq \delta$, $\|X_k Z_k e\| \leq \delta$, $x_k \geq 0$, $z_k \geq 0$ を満たすならば停止する．

(Step 2) 次の 2 つの QP 部分問題を解いてステップ s_{T_k}, s_k を求める．ただし $\Delta_{T_k} \leq \Delta_k$ である．(Δ_k は $QP(x_k)$ が実行可能になるように調整される)

$(\mathbf{QP_T(x_k)})$

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \Delta f_q(x_k; s_T) \\ \text{subject to} & A(x_k)s_T = 0, \\ & x_k + s_T \geq 0, \quad \|s_T\|_\infty \leq \Delta_{T_k} \end{array}$$

$(\mathbf{QP(x_k)})$

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \Delta f_q(x_k; s) \\ \text{subject to} & g(x_k) + A(x_k)s = 0, \\ & x_k + s \geq 0, \quad \|s\|_\infty \leq \Delta_k \end{array}$$

次の LP を解いてステップ d_k と対応する乗数 $(y_{k+1}, z_{k+1})^t$ を求める．

$(\mathbf{LP(x_k)})$

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \nabla f(x_k)^t d \\ \text{subject to} & A(x_k)d = 0, x_k + d \geq 0, \|d\|_\infty \leq 1 \end{array}$$

(Step 3) $\bar{s}_k = \left(\min\left\{\dfrac{\|s_{T_k}\|_\infty}{\|s_k\|_\infty}, 1\right\}\right) s_k$ とおいて，

$$\Delta f_q(x_k; (1-\beta^{l_k})s_{T_k} + \beta^{l_k}\bar{s}_k) \leq \frac{1}{2}\Delta f_q(x_k; s_{T_k})$$

を満たす最小の非負整数 l_k を求める．このとき $\rho_k = \beta^{l_k}$ として，$s_{\rho_k} = (1-\rho_k)s_{T_k} + \rho_k \bar{s}_k$ とおく．

(Step 4) もし $\|g(x_k + s_{\rho_k})\| \geq \delta$ ならば $\Delta_{T_{k+1}} = \dfrac{1}{2}\Delta_{T_k}$ とおく．さもなければ次のように信頼半径を更新する．

$$\begin{cases} \Delta f(x_k; s_{\rho_k}) > \frac{1}{4}\Delta f_q(x_k; s_{\rho_k}) \text{ ならば} \Delta_{T_{k+1}} = \frac{1}{2}\Delta_{T_k} \\ \Delta f(x_k; s_{\rho_k}) \leq \frac{3}{4}\Delta f_q(x_k; s_{\rho_k}) \text{ ならば} \Delta_{T_{k+1}} = 2\Delta_{T_k} \\ \text{さもなければ} \Delta_{T_{k+1}} = \Delta_{T_k}. \end{cases}$$

(Step 5) もし $\Delta f(x_k; s_{\rho_k}) \leq 0$, $\|g(x_k + s_{\rho_k})\| < \delta$ ならば，$x_{k+1} = x_k + s_{\rho_k}$, $w_{k+1} = (x_{k+1}, y_{k+1}, z_{k+1})^t$ とおく．さもなければ $w_{k+1} = w_k$ とおく．

(Step 7) $k := k+1$ とおいて Step 1 へ行く．

3. 大域的収束性

前節で提案したアルゴリズムの大域的収束性を示すために，次の仮定をする．

[仮定 G]

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

(G2) 集合 $\{x \in \mathbf{R}^n \,|\, f(x) \leq f(x_0)\} \cap \{x \in \mathbf{R}^n |\, x \geq 0\}$ はコンパクトである．

(G3) 行列 G_k は一様有界である．

[Restoration Phase] では探索方向が $\|g(x)\|^2$ の降下方向になることが示せるので，通常の Armijo の直線探索の場合と同様にしてその大域的収束性を証明することができる．

また，[Minimization Phase] に関して次の補助定理を得る．

[補助定理] 仮定 G の下で次のことが成り立つ．

(1) もしある k 回目で $\Delta f_q(x_k; s_{T_k}) = 0$ が成り立つならば，点 w_k は Step 1 の停止条件を満たす．

(2) Step 3 では常に $\Delta f_q(x_k; s_{\rho_k}) \leq \frac{1}{2}\Delta f_q(x_k; s_{T_k})$ を満たす ρ_k を見つけることができる．さらに，十分に小さい Δ_{T_k} に対して $\|g(x_k + s_{\rho_k})\| < \delta$ が成り立つ．

(3) もし $\liminf_{k\to\infty} |\Delta f_q(x_k; s_{T_k})| = c > 0$ ならば $\liminf_{k\to\infty} \rho_k > 0$ が成り立つ．さらに，k に無関係な正定数 $\bar{\Delta}_T$ が存在して，任意の $\Delta_{T_k} \in (0, \bar{\Delta}_T)$ に対して s_{ρ_k} は $\|g(x_k + s_{\rho_k})\| < \delta$ を満たす．

このとき次の定理を得る．

[定理] 仮定 G が成り立つとき，与えられた $\delta > 0$ に対して，[Minimization Phase] のアルゴリズムは有限回の手順で終了するか，もしくは $\|g(x_\infty)\| \leq \delta$, $\nabla_x L(w_\infty) = 0$, $X_\infty Z_\infty e = 0$, $x_\infty \geq 0$, $z_\infty \geq 0$ を満たす集積点 $w_\infty = (x_\infty, y_\infty, x_\infty)^t$ が存在する．

以上より，[Restoration Phase] と [Minimization Phase] は実現可能となる．さらに [Main Algorithm] において δ_k が零に近づくので，結局，[Main Algorithm] で生成される点列 $\{w_k\}$ がもとの最適化問題の KKT 点に収束することが示される．

なお，予備的な数値実験結果を発表当日に報告する．

[参考文献]

[1] R.Fletcher and S.Leyffer, Nonlinear programming without a penalty function, *Mathematical Programming*, 91 (2002), pp.239-269.

[2] M.Ulbrich and S.Ulbrich, Non-monotone trust region methods for nonlinear equality constrained optimization without a penalty function, *Mathematical Programming*, 95 (2003), pp.103-135.

[3] H.Yamashita, *A globally convergent quasi-Newton method for equality constrained optimization that does not use a penalty function*, Technical Report, Tokyo, June 1979 (revised September 1982).