1995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

大規模非線形最適化パッケージNUOPT2.0の開発
I. アルゴリズム

01701240 数理システム　*山下浩 YAMASHITA Hiroshi
01307380 数理システム　田辺隆人 TANABE Takahito

1 はじめに

我々は，数年間にわたって大規模線形計画問題，大規模非線形計画問題を高速に解くためのアルゴリズムとソフトウェアの開発を行ってきた．その結果，線形計画問題や2次計画問題だけではなく，一般の大規模非線形最適化問題に対しても十分実用的なもの（NUOPT-νOPTと読む）が完成したのでその概略を発表する．その方法は，古くから知られている内点法に最近の主双対法の考え方を導入したものである．すなわち，主双対法の反復を基本として，大域的収束性のために新しいメリット関数（バリヤーペナルティ関数）を導入する．線形計画問題や凸2次計画問題，あるいは小規模非線形計画問題に対してはLangrange関数のHesse行列あるいはその近似行列が0あるいは非負定値であると仮定できる．したがって，そのような問題群に対しては直線探索を利用した方法が適用出来て非常に有効である．しかし，一般の大規模非線形計画問題に対してはそのような仮定をみたすことが難しいので信頼領域法を利用して大域的収束を保証する．

次の最適化問題

$$\begin{array}{lll} \text{最小化} & f(x), & x \in \mathbf{R}^n, \\ \text{条　件} & g(x)=0, & x \geq 0 \end{array}$$

を考える．この問題のラグランジュ関数を

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

としたとき，Karush-Kuhn-Tucker(K-K-T)条件は次式で与えられる：

$$\begin{aligned} \nabla_x L(x,y,z) &= 0, \\ g(x) &= 0, \\ XZe &= 0, \quad x \geq 0, z \geq 0. \end{aligned}$$

ただし，$X=\mathrm{diag}(x_1,\cdots,x_n), Z=\mathrm{diag}(z_1,\cdots,z_n)$，$e=(1,\cdots,1)^t \in R^n$である．ここで，相補性条件$XZe=0$を$XZe=\mu e$（$\mu>0$）で置き換えたものを修正K-K-T条件とする．

我々の方法はバリヤーペナルティ関数：

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

をメリット関数として採用する．ここで，$\mu>0$はバリヤパラメータ，$\rho>0$はペナルティパラメータである．バリヤーペナルティ関数のモデル1次関数近似F_lは

$$\begin{aligned} F_l(x,s) &= F(x)+(\nabla f(x)-\mu X^{-1}e)^t s \\ &+ \rho\sum_{i=1}^{m}\left(\left|g_i(x)+\nabla g_i(x)^t s\right|-|g_i(x)|\right) \end{aligned}$$

で定義され，モデル2次関数近似F_qは

$$F_q(x;s)=F_l(x;s)+\frac{1}{2}s^t(G+X^{-1}Z)s.$$

と定義される．さらに，あるステップsに対するそれぞれの関数の変化量を次のように定義する．

$$\begin{aligned} \Delta F_l(x;s) &\equiv F_l(x;s)-F_l(x;0)=F_l(x;s)-F(x), \\ \Delta F_q(x;s) &\equiv F_q(x;s)-F_q(x;0)=F_q(x;s)-F(x). \end{aligned}$$

2 直線探索を利用した方法

修正K-K-T条件に対するニュートン法は次のようになる．

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} G+X^{-1}Z & -A^t \\ -A & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \Delta x_N \\ \Delta y_N \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -r_L-X^{-1}r_C \\ r_E \end{bmatrix}, \\ \Delta z_N &= -X^{-1}Z\Delta x_N-X^{-1}r_C. \end{aligned}$$

ここで，$\{\Delta x_N,\Delta y_N,\Delta z_N\}$は各変数に対する反復ベクトルで，$n\times n$行列$G$はLagrange関数のHesse行列あるいはその近似行列である．このとき，以下のような不等式が成立する．

$$\begin{aligned} \Delta F_l(x;\Delta x_N) &\leq -\Delta x_N^t(G+X^{-1}Z)\Delta x_N \\ &- (\rho-\|y+\Delta y_N\|_\infty)\sum_{i=1}^{m}|g_i(x)|. \end{aligned}$$

したがって，行列 G が非負定値で ρ が十分大きいとき方向 Δx_N はバリヤーペナルティ関数の降下方向になっている．

この性質を利用して，直線探索を利用したアルゴリズムを構築することができる．主変数に対するステップ幅 α_x は以下のように計算される．

$$\alpha_{\max} = \min_i \left\{ \frac{-x_i}{(\Delta x_N)_i} \middle| (\Delta x_N)_i < 0 \right\},$$

$$\alpha_x = \bar{\alpha}\beta^l, \quad \bar{\alpha} = \min\{\gamma\alpha_{\max}, 1\}$$

とする．ここで，$\gamma \in (0,1), \beta \in (0,1)$ である．そして，l は

$$F(x + \bar{\alpha}\beta^l \Delta x_N) - F(x) \le \varepsilon_0 \bar{\alpha}\beta^l \Delta F_l(x; \Delta x_N)$$

をみたす最小の正整数として定義される（$\varepsilon_0 \in (0,1)$）．双対変数 z に対するステップ幅は以下のように決められる．

$$c_{Li} = \min\left\{\frac{\mu}{M_L}, (x_+)_i z_i\right\}, c_{Ui} = \max\{M_U\mu, (x_+)_i z_i\}$$

とする．ここで，$M_L > 1$ と $M_U > 1$ は与えられた定数である．このとき，α_z は 1 以下で，条件

$$c_{Li} \le (x_+)_i((z)_i + \alpha_z(\Delta z_N)_i) \le c_{Ui}$$

をすべての $i = 1, \cdots, n$ に対してみたす最大のステップとして定義される．変数 y に対しては $\alpha_y = \alpha_z$ とする．

このように直線探索を行い，適当に μ と ρ をコントロールしてやると大域的収束性をもったアルゴリズムを得ることができる．

3 信頼領域法

行列 G が正定値でないとき直線探索法を利用することは困難である．そこで，G が不定であるときも利用出来る方法として主変数に対する信頼領域法を採用する．

このとき，信頼領域のステップ s，サイズ $\delta > 0$，ステップ幅 α_x は次のような関係をみたす．

$$\begin{aligned} \|s\| &\le \delta, \\ \alpha_x &\le \min\left\{\frac{\delta}{\|s\|}, \gamma\alpha_{x\max}\right\}, \\ \alpha_{x\max} &= \min_i \left\{\frac{-x_i}{s_i} \middle| s_i < 0\right\}. \end{aligned}$$

信頼領域のサイズの調整は通常の方法で行う．また，双対変数のステップ幅は直線探索を利用した方法と同一である．

大域的収束性を得るために基準となる最急降下方向ベクトル $\{\Delta x_{SD}, \Delta y_{SD}, \Delta z_{SD}\}$ を

$$\begin{bmatrix} D + X^{-1}Z & -A^t \\ -A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_{SD} \\ \Delta y_{SD} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -r_L - X^{-1}r_C \\ r_E \end{bmatrix},$$

$$\Delta z_{SD} = -X^{-1}Z\Delta x_{SD} - X^{-1}r_C,$$

によって定義する．ここで $D > 0$ は対角行列である．α^* を方向 Δ_{SD} に沿って信頼領域で与えられる区間内でモデル 2 次関数を最小化するステップとして定義する．

$$\alpha^* = \arg\min\{F_q(x; \alpha\Delta x_{SD}) \mid \|\alpha\Delta x_{SD}\| \le \delta, \alpha \in [0, \bar{\alpha}]\}$$

ここで，

$$\begin{aligned} \bar{\alpha} &= \min\{1, \gamma\alpha_{\max}\}, \gamma \in (0,1), \\ \alpha_{\max} &= \min_i \left\{\frac{-x_i}{(\Delta x_{SD})_i} \middle| (\Delta x_{SD})_i < 0\right\}. \end{aligned}$$

信頼領域のステップは以下の条件をみたすようにとる．

$$\Delta F_q(x_k; \alpha_{xk}s_k) \le \frac{1}{2}\Delta F_q(x_k; \alpha^*\Delta x_{SDk}) < 0$$

$$\|\Delta x_{Nk}\| \le M\|\Delta x_{SDk}\|$$

このようにすると，やはり大域的収束を保証することができる．

本パッケージでは信頼領域ステップ s は

$$s = \nu\Delta x_{SD} + (1-\nu)\Delta x_N,$$

として計算される．ここで，パラメータ $\nu \in [0,1]$ は $\nu = 0, 0.1, 0.2, \cdots, 0.9, 1.0$ の中で条件：

$$\Delta F_q(x_k; \alpha_{xk}s_k) \le \frac{1}{2}\Delta F_q(x_k; \alpha^*\Delta x_{SDk}) < 0$$

をみたす最小の数である．ここで

$$\begin{aligned} \alpha_{xk} &= \arg\min\{F_q(x; \alpha\Delta x_N) \mid \|\alpha\Delta x_N\| \le \delta, \alpha \in [\underline{\alpha}, \bar{\alpha}]\}, \\ \bar{\alpha} &= \gamma\min_i \left\{\frac{-x_i}{(\Delta x_N)_i} \middle| (\Delta x_N)_i < 0\right\}, \\ \underline{\alpha} &= \gamma\max_i \left\{\frac{-x_i}{(\Delta x_N)_i} \middle| (\Delta x_N)_i > 0\right\}. \end{aligned}$$

参考文献

[1] H.Yamashita, *A globally convergent primal-dual interior point method for constrained optimization*, Technical Report, Mathematical Systems Institute Inc., Tokyo, Japan, April 1992 (revised May 1992).

[2] H.Yamashita and H.Yabe, *Superlinear and quadratic convergence of primal-dual interior point methods for constrained optimization*, Technical Report, Mathematical Systems Institute Inc., Tokyo, Japan, June 1993.