日本オペレーションズ・リサーチ学会
2004年春季研究発表会

無制約最適化問題に対するハイブリッド型共役勾配法の大域的収束性について

02302940 東京理科大学 ＊富塚 博崇 TOMIDUKA Hirotaka
01702330 東京理科大学 矢部 博 YABE Hiroshi

1. はじめに

無制約最小化問題 (minimize $f(x)$, $x \in R^n$) を考える。ただし、$f : R^n \to R$ は滑らかな関数で、その勾配ベクトル $\nabla f(x)$ は利用できるものとし、それを g とおく。共役勾配法は、初期点を $x_0 \in R^n$、初期探索方向を $d_0 = -g_0$ としたとき、近似解、探索方向をそれぞれ

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \alpha_k d_k \\ d_{k+1} &= -g_{k+1} + \beta_{k+1} d_k \end{aligned}$$

と更新する方法である。ここで、ステップ幅 α_k を直線探索で求める際には次のような Wolfe 条件を課す。(ただし、$0 < \delta < \sigma < 1$)

$$\begin{aligned} f(x_k) - f(x_k + \alpha_k d_k) &\geq -\delta \alpha_k g_k^T d_k \\ g(x_k + \alpha_k d_k)^T d_k &\geq \sigma g_k^T d_k \end{aligned}$$

共役勾配法は行列を保存する必要がないため大規模な問題を解くために有効な方法である。共役勾配法は、パラメータ β_{k+1} の選び方によっていろいろな種類が考えられるが、本研究では Yabe and Sakaiwa [3] と Yabe and Takano [4] によって提案された２種類の β を組み合わせた新しい共役勾配法を提案し、その大域的収束性を示す。まず、この２種類の方法を紹介する際に必要となる修正セカント条件について述べておく。

$s_k = x_{k+1} - x_k$, $y_k = g_{k+1} - g_k$ とおいたとき、準ニュートン法におけるセカント条件は $H_{k+1} y_k = s_k$ と表される。ただし、H_{k+1} はヘッセ行列の逆行列 $\nabla^2 f(x_{k+1})^{-1}$ を近似する正定値対称行列である。

Zhang ら (1999,2001) はこのセカント条件を拡張して、以下のような修正セカント条件を提案した。

$$H_k \widehat{y}_k = s_k$$

$$\left\{ \begin{aligned} \widehat{y}_k &= y_k + \frac{\theta_k}{s_k^T u_k} u_k \\ \theta_k &= 6(f_k - f_{k+1}) + 3(g_k + g_{k+1})^T s_k \end{aligned} \right.$$

ただし、u_k は $s_k^T u_k \neq 0$ となる任意のベクトルとする。

2. Yabe and Sakaiwa Method

d_k を降下方向であると仮定し、d_{k+1} が降下方向となるような β_{k+1} を求める。つまり

$$g_{k+1}^T d_{k+1} = -\|g_{k+1}\|^2 + \beta_{k+1} g_{k+1}^T d_k < 0. \quad (1)$$

をみたす β_{k+1} を求める。パラメータ $\tau_{k+1} > 0$ を導入し $\beta_{k+1} = \|g_{k+1}\|^2 / \tau_{k+1}$ とすると、(1) 式は、$\tau_{k+1} > g_{k+1}^T d_k$ と置き換わる。$\tau_{k+1} > 0$ を考慮すると、$\tau_{k+1} > \max\{g_{k+1}^T d_k, 0\}$ ならば降下方向となる。特に $\tau_{k+1} = d_k^T y_k$ とすると、Dai and Yuan [2] が提案した β_{k+1} となる。ここで、直線探索に Wolfe の条件を課せば $d_k^T y_k > 0$ が保証される。

Yabe and Sakaiwa [3] は、DY 法にパラメータ付き修正セカント条件を導入し

$$\tau_{k+1}^{Sa} = d_k^T y_k + \frac{\lambda_k}{\alpha_k} \max\{\theta_k, 0\} , \ \lambda_k \geq 0$$

とおいて、

$$\beta_{k+1}^{Sa} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\tau_{k+1}^{Sa}} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y_k + \frac{\lambda_k}{\alpha_k} \max\{\theta_k, 0\}}$$

を提案した。

この β_{k+1}^{Sa} を用いた共役勾配法は、探索方向 d_{k+1} が常に降下方向となるような方法であり大域的収束性も示されている。

3. Yabe and Takano Method

非線形共役勾配法における従来の共役性条件は $d_k^T y_k = 0$ であるが、Dai and Liao [1] はセカント条件を考慮し、新たな共役性条件 $d_k^T y_k = -t g_{k+1}^T s_k$ $(t \geq 0)$ を提案した。Yabe and Takano [4] は、Dai and Liao の考え方に基づき、修正セカント条件を考慮した方法を提案した。具体的には、修正セカント条件にパラメータ

$\rho \geq 0$ を導入し、

$$z_k = y_k + \rho \frac{\theta_k}{s_k^T u_k} u_k$$

と定義して、条件 $d_{k+1}^T z_k = -t g_{k+1}^T s_k$ $(t \geq 0)$ を提案した。そして、この条件を満たす探索方向を生成するために、次の β_{k+1} を提案した。

$$\begin{aligned} \beta_{k+1}^{Ta} &= \frac{g_{k+1}^T (z_k - t s_k)}{d_k^T z_k} \\ \beta_{k+1}^{Ta+} &= \max\left\{ \frac{g_{k+1}^T z_k}{d_k^T z_k}, 0 \right\} - t \frac{g_{k+1}^T s_k}{d_k^T z_k} \end{aligned}$$

この β_{k+1}^{Ta+} を用いた共役勾配法は、探索方向 d_{k+1} が降下方向となることを仮定すれば大域的収束することが示されている。

4. 新しい β とその大域的収束性

上記の Yabe and Sakaiwa 法と Yabe and Takano 法はいずれも良い数値実験結果を得ているので、本節では降下方向を保証するようなそれらの組み合わせを考える。

まず、$\beta_{k+1} \geq 0$ を仮定する。(1) の条件を変形することにより

$$\|g_{k+1}\|^2 \geq \beta_{k+1} d_k^T y_k \tag{2}$$

を満たす β_{k+1} を考える。この条件が満たされれば d_{k+1} は降下方向となる。そこで、上述の２つのパラメータの凸結合を作り、β_{k+1} として

$$\begin{aligned} \beta_{k+1}^{New} &= \phi_k \beta_{k+1}^{Ta+} + (1-\phi_k)\beta_{k+1}^{Sa} \\ &= \phi_k \left\{ \max\left\{ \frac{g_{k+1}^T z_k}{d_k^T z_k}, 0 \right\} - t \frac{g_{k+1}^T s_k}{d_k^T z_k} \right\} \\ &\quad + (1-\phi_k) \frac{\|g_{k+1}\|^2}{d_k^T y_k + \frac{\lambda_k}{\alpha_k}\max\{\theta_k, 0\}} \end{aligned} \tag{3}$$

を提案する。ただし、$0 \leq \phi_k \leq 1$ であり、パラメータ t は $\beta_{k+1}^{Ta+} \geq 0$ を満たすように定めるものとする。このとき、探索方向 d_{k+1}^{New} は

$$d_{k+1}^{New} = \phi_k d_{k+1}^{Ta+} + (1-\phi_k) d_{k+1}^{Sa} \tag{4}$$

となる。β_{k+1}^{New} が (2) 式を満たすように ϕ_k を決めるために、(3) 式を (2) に代入して整理すると、

$$\frac{\tau_{k+1}^{Sa} - d_k^T y_k}{\tau_{k+1}^{Sa}} \|g_{k+1}\|^2 \geq \phi_k \eta_k d_k^T y_k \tag{5}$$

を得る。ただし、$\eta_k = \max\left\{ \frac{g_{k+1}^T z_k}{d_k^T z_k}, 0 \right\} - t \frac{g_{k+1}^T s_k}{d_k^T z_k} - \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\tau_{k+1}^{Sa}}$。この関係に基づいて ϕ_k の範囲を吟味すれば、以下の定理を得る。

Theorem 1

η_k の値に応じて、ϕ_k を次のように選ぶ。

$$\begin{cases} \eta_k \leq 0 \text{ のとき} \\ \quad 0 \leq \phi_k \leq 1 \\ \eta_k > 0 \text{ のとき} \\ \quad 0 \leq \phi_k \leq \min\left\{ \frac{1}{\eta_k d_k^T y_k} \frac{\tau_{k+1}^{Sa} - d_k^T y_k}{\tau_{k+1}^{Sa}} \|g_{k+1}\|^2, 1 \right\} \end{cases} \tag{6}$$

このとき、探索方向 (4) は降下方向となる。 □

大域的収束性を示すために、次の２つの条件を仮定する。

(A1) 準位集合 $L = \{x \in R | f(x) \leq f(x_0)\}$ は有界。

(A2) L の近傍 N で、f は連続微分可能で g はリプシッツ連続。

このとき、β_{k+1}^{New} を用いた共役勾配法の大域的収束性について次の定理を得る。

Theorem 2

(A1),(A2) を仮定する。β_{k+1}^{New} は (3) と (6) で定義され、α_k には Wolfe の条件を満たすものとする。このとき、β_{k+1}^{New} を用いた共役勾配法は常に降下方向を生成する。さらに生成される点列は有限回で停留点に到達するか、または

$$\liminf_{k\to\infty} \|g_k\| = 0.$$

が成り立つ。

References

[1] Y.H. Dai and L.Z. Liao, New conjugacy conditions and related nonlinear conjugate gradient methods, *Applied Mathematics and Optimization* 43 (2001), pp.87-101.

[2] Y.H. Dai and Y. Yuan, A nonlinear conjugate gradient method with a strong global convergence property, *SIAM J.Optimization* 10 (1999), pp.177-182.

[3] H. Yabe and N. Sakaiwa, A New Nonlinear Conjugate Gradient Method for Uncostrained Optimization, *Technical Report, Department of Mathematical Information Science*, Tokyo University of Science, March, 2003.

[4] H. Yabe and M. Takano, Global Convergence Properties of nonlinear conjugate gradient methods with odified Secant condition, *to appear in Computational Optimization and Applications.*