

球制約の変分不等式に対する平滑化ニュートン法 について

東京理科大学 理学部 応用数学科 小笠原 英穂

Hideho Ogasawara

Department of Applied Mathematics, Tokyo University of Science

1 はじめに

次のような問題を変分不等式問題 (Variational Inequality Problem, VIP) という:

$$\text{Find } y^* \in X \text{ such that } (y - y^*)^\top F(y^*) \geq 0 \text{ for all } y \in X. \quad (1)$$

ここで, X は $\mathbf{R}^n$ の空でない閉凸集合, D は X を含む開集合, $F: D \rightarrow \mathbf{R}^n$ は D 上の連続微分可能なベクトル値関数とする. 通常は $D = \mathbf{R}^n$ で考えることが多い. F が連続で X がコンパクト, すなわち有界閉集合のとき, VIP は解をもつことが知られている.

VIP は非常に広いクラスの問題で, X を特に上下限による箱制約

$$X := \{y \in \mathbf{R}^n : \ell \leq y \leq u\} \quad (-\infty \leq \ell_i < u_i \leq \infty)$$

にとった場合でも, 非線形方程式系 ($X = \mathbf{R}^n$) や非線形相補性問題 ($X = \mathbf{R}_+^n$) を含む. 先に述べた解の存在定理より, 上下限 ℓ, u がともに有界ならばこの VIP は解をもつ.

本稿では, VIP (1) で, X を特に原点中心, 半径 $r > 0$ の閉球

$$X := \{y \in \mathbf{R}^n : \|y\| \leq r\}$$

にとった, いわゆる球制約の場合を考える. ただし, $\|\cdot\|$ は 2-ノルムである. より一般には, X が球の直積の場合を考えることになるが, 簡単のため, ここでは球が 1 つの場合で考える. しかし一般の場合も, 同様に扱うことができる.

半径 r が有界ならば, この VIP はやはり解をもつ. ($X = \mathbf{R}^n$ は $r = \infty$ の球とみなせる.) なお, 球の中心が原点でない場合は平行移動した F を改めて F ととればよい. また, 楕円体の場合は, (実際上はともかくとして原理上は) メトリック変換した F を改めて F ととることにより, 球の場合に帰着させることができる. 具体的には, M を正定値行列とし, X を, 点 a を中心とする楕円体 $\mathcal{E} := \{y \in \mathbf{R}^n : \|M^{-1}(y - a)\| \leq r\}$ としたとき, 変換 $z = M^{-1}(y - a)$ によって楕円体 $\mathcal{E}$ の点 y と球 X の点 z は 1 対 1 に対応するから, $\tilde{F}(z) := M^\top F(a + Mz)$ と定義することにより, 元の VIP は, 次のような原点中心の球制約 VIP に書き直される. また例えば, F が $\mathcal{E}$ 上で単調関数のとき, $\tilde{F}$ も X 上で単調関数であることがわかるので, F のよい性質が $\tilde{F}$ においても保たれる.

$$\text{Find } z^* \in X \text{ such that } (z - z^*)^\top \tilde{F}(z^*) \geq 0 \text{ for all } z \in X.$$

箱制約 VIP は混合相補性問題とも呼ばれ, いろいろな数値解法が提案されている ([2] 参照). しかしながら球制約 VIP は, Qi and Zhou [3, 4] や他の研究者による若干のアルゴリ

ズムは提案されているものの、ほとんど研究されていないようである。本稿では、球制約のVIPに帰着される問題と Qi and Zhou [4] の平滑化ニュートン法を紹介する。そしてその解法をより一般のクラスに拡張し、アルゴリズムの大域的および局所的収束性について述べる。

2 VIP に等価な方程式

VIP を解くためのアルゴリズムを構築する代表的な方法の1つに、VIP と等価な方程式を利用する方法がある。本稿で述べる解法もその例であるので、まずそのことを見ておこう。

一般に、VIP (1) は次の方程式と等価であることが知られている。

$$E(x) := F(\Pi_X(x)) + x - \Pi_X(x) = 0. \quad (2)$$

ただし、 $\Pi_X(x)$ は点 x の凸集合 X 上への射影、すなわち x から X までの最短距離を与える X の点であり、それは一意に定まる。 E を正規関数、方程式 (2) を Robinson の正規方程式 (Normal Equation, NoE) と呼ぶ。ここで等価とは、 $x^* \in \mathbf{R}^n$ が NoE (2) の解ならば、 $y^* := \Pi_X(x^*)$ は VIP (1) の解であり、逆に $y^* \in \mathbf{R}^n$ が VIP (1) の解ならば、 $x^* := y^* - F(y^*)$ は NoE (2) の解である、という意味においてである。

VIP (1) は、また次の方程式と等価であることもよく知られている。

$$G(y) := y - \Pi_X(y - F(y)) = 0. \quad (3)$$

G を自然残差関数、方程式 (3) を自然残差方程式 (Natural Residual Equation, NRE) と呼ぶ。ここで等価とは、 $y^* \in \mathbf{R}^n$ が NRE (3) の解であるとき、かつそのときに限り $y^* \in \mathbf{R}^n$ は VIP (1) の解である、という意味においてである。VIP (1) との同値性は、最初に挙げた NoE (2) よりも、むしろ NRE (3) の方が、より広く知られているようである。そのため、NRE (3) はしばしば利用される。NoE (2) は、NRE (3) で $x := y - F(y)$ とおくことにより容易に導くことができる。実際、このおきかえにより、(3) は $y - \Pi_X(x) = 0$ と書けるから、この $y = \Pi_X(x)$ を、おきかえた式の y に代入して左辺に移項すれば (2) が得られる。関数 E と G は、どちらも射影 Π_X を含んでいるため、一般に微分不可能な関数である。しかし E は G にはない利点をもつ。すなわち、 F が D でしか定義されていない場合でも、 E は $\mathbf{R}^n$ 全域で定義されるのに対し、 G は D でしか定義できない。このため、NRE (3) に基づくアルゴリズムは、 $y \in D$ を保証する別の仕組みが必要となる。通常は簡単のため、はじめから、 F は $D = \mathbf{R}^n$ で定義されているものとして、この問題を回避している。NoE (2) に基づくアルゴリズムでは、このような問題が起こらないので、 F の定義域は D のままでよい。しかし、式としては NoE (2) よりも NRE (3) の方が扱いやすい。なぜなら、微分不可能の原因である射影 Π_X を、 E は2か所含むのに対し、 G は1か所しか含まないからである。また F の定義域を $\mathbf{R}^n$ 全体にとれる場合も多い。このような理由と、何よりよく知られているという観点から、NoE (2) よりもむしろ NRE (3) に基づく数値解法の方がはるかに多く研究されているように思われる。

凸集合 X への射影を求めることは、最小化問題を解くことに等しいので、一般には容易ではない。したがって NoE (2) を用いるにしろ NRE (3) を用いるにしろ、これらの方程式

に基づく数値解法では、射影をどのように扱うかという点が大きな課題となる。しかし X が簡単な構造をしているときには、射影を陽に求められる場合がある。その1つが先述の箱制約の場合であり、このために多くの数値解法が提案されている。では球制約の場合はどうか？ 球制約は箱制約として扱うことはできないので、箱制約の解法を適用することはできず、研究もほとんどないようである。ところが、球制約の場合にも射影を陽に求めることができる。この点に着目して Qi and Zhou [4] は球制約 VIP に対して NoE (2) に基づいた平滑化ニュートン法を提案している。また、Fan and Yan [1] もやはり NoE (2) に基づく平滑化ホモトピー法を提案している。同様の考えで NRE (3) に基づく数値解法を構築することもできるが、本稿では NoE (2) に基づく解法のみ考えることにする。なお、近年2次錐相補性問題がよく研究されているが、この問題は VIP (1) で X を2次錐の直積にとった場合に相当し、この場合も X への射影 Π_X は比較的容易に求められるということを付記しておく。

3 球制約 VIP の応用例

本節では、球制約の VIP に帰着される問題を紹介する。

応用例 (1) 球制約の凸計画問題。次のような凸計画問題を考える：

$$\text{Minimize } f(x), \quad x \in X, \quad (4)$$

ここで、 X は $\mathbf{R}^n$ の閉球 (またはその直積) で、 D は X を含む開集合、 $f: D \rightarrow \mathbf{R}$ は D 上の2回連続微分可能な凸関数とする。問題 (4) が次の VIP と同値であることはよく知られている：

$$\text{Find } x^* \in X \text{ such that } (x - x^*)^\top \nabla f(x^*) \geq 0 \quad \text{for all } x \in X.$$

応用例 (2) ノルム和最小化問題。次のような最小化問題を考える：

$$\text{Minimize } f(x) := \sum_{i=1}^m \|b_i - A_i^\top x\|, \quad x \in \mathbf{R}^n. \quad (5)$$

ただし、 $b_1, \dots, b_m \in \mathbf{R}^d$ 、 $A_1, \dots, A_m \in \mathbf{R}^{n \times d}$ である。この問題は無制約凸計画問題であるが、その目的関数 f は $b_i - A_i^\top x = 0$ となる任意の点 x で微分不可能である。問題 (5) は多くの応用、例えば VLSI 設計、ユークリッド施設配置問題、シュタイナー最小木問題、などから派生してくる。

一見したところ、問題 (5) には球制約が存在しないが、この問題の双対問題を考えることにより、球制約が現れる。それは次の事実からわかる。

補題 1 (Qi and Zhou [4]) $x^* \in \mathbf{R}^n$ が問題 (5) の解であるのは、 (x^*, y^*) 、 $y^* := (y_1^*, \dots, y_m^*) \in \mathbf{R}^{md}$ が次の系の解であるとき、かつそのときに限る：

$$\Leftrightarrow \begin{cases} Ay = 0, \\ \|y_i\| \leq 1, & i = 1, \dots, m, \\ (b_i - A_i^\top x) - \|b_i - A_i^\top x\| y_i = 0, & i = 1, \dots, m. \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} Ay = 0, \\ y_i - \Pi_B(y_i + (b_i - A_i^\top x)) = 0, & i = 1, \dots, m. \end{cases}$$

ただし, $B := \{s \in \mathbf{R}^d : \|s\| \leq 1\}$ である.

4 射影関数とその平滑化

X が閉球のとき, X への射影 Π_X は簡単に求まり, 次のようになる:

$$\Pi_X(x) := \begin{cases} \frac{rx}{\|x\|} & (\|x\| > r \text{ のとき}), \\ x & (\|x\| \leq r \text{ のとき}). \end{cases}$$

したがって射影関数は

$$\Pi_X(x) = \frac{rx}{\max\{r, \|x\|\}} = \frac{rx}{r + \max\{0, \|x\| - r\}} = \frac{rx}{r + (\|x\| - r)_+} \quad (6)$$

と書ける. ただし, $(s)_+ := \max\{0, s\}$ である.

正規関数 E は $\mathbf{R}^n$ 上で一般には微分不可能だが semismooth で, もし ∇F がリプシッツ連続ならば, strongly semismooth である. NoE に基づく数値解法を構築するにあたって, 微分可能な関数に対するニュートン法を適用可能にするために, 正規関数 E の平滑化を考える. そのためには, 射影 Π_X を平滑化すればよい. Π_X を微分不可能にしているのは, ノルム関数 $\|\cdot\|$ とプラス関数 $(\cdot)_+$ の存在であるから, これらを平滑化すればよいことになる. Qi and Zhou [4] は $\|x\|$ を $\sqrt{\|x\|^2 + t^2}$ で平滑化し, $(s)_+$ を Chen-Harker-Kanzow-Smale (CHKS) 関数

$$\psi(t, s) := \frac{s + \sqrt{s^2 + 4t^2}}{2}, \quad (t, s) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}$$

で平滑化した. ここで t は平滑化変数である. $t = 0$ のとき, $\sqrt{\|x\|^2 + 0^2} \equiv \|x\|$, $\psi(0, s) \equiv (s)_+$ であることに注意されたい. なお, Qi and Zhou [3] では $(s)_+$ 関数をニューラルネットワーク関数

$$\psi(t, s) := t \ln \left(\exp\left(\frac{s}{t}\right) + 1 \right), \quad (t, s) \in \mathbf{R}_{++} \times \mathbf{R}$$

で平滑化している. この場合は $\lim_{t \rightarrow +0} \psi(t, s) = (s)_+$ であることに注意されたい.

射影 Π_X のより具体的な平滑化関数を求めると, 次のようになる. 射影 $\Pi_X(x)$ の式 (6) のうち, 分母 $r + (\|x\| - r)_+$ の $\|x\|$ をまず $\sqrt{\|x\|^2 + t^2}$ で平滑化し, 次いで $(\cdot)_+$ を CHKS 関数を用いて

$$\begin{aligned} q(t, x) &:= r + \psi(t, \sqrt{\|x\|^2 + t^2} - r), \quad (t, x) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^n \\ &= \frac{1}{2} \left(r + \sqrt{\|x\|^2 + t^2} + \sqrt{(\sqrt{\|x\|^2 + t^2} - r)^2 + 4t^2} \right) \end{aligned}$$

と平滑化する. したがって射影関数は

$$\Pi_X(x) = \frac{rx}{r + (\|x\| - r)_+} \approx \frac{rx}{q(t, x)} =: \phi(t, x)$$

と平滑化される. ただし $\|x\|$ の平滑化は本当に必要だろうかという疑問が残る. というのは, $\|x\|$ が微分不可能であるとはいっても, そうなるのは唯一原点のみであって, 原点以外

のすべての点で微分可能だからである。原点がVIPの解であるかどうかは $F(0) = 0$ かどうかで簡単に判定できるので、実質的には原点はVIPの解でないとしてよいだろう。そうすると $\|x\|$ を平滑化する必要性はほとんどないといえる。実際上は平滑化しない簡易版でも十分のように思われる。

次の結果は射影 $\Pi_X(x)$ の平滑化関数 $\phi(t, x)$ の基本的性質であり、アルゴリズムの構築とその収束性を示す上で重要な役割を演ずる。

命題 1 (Qi and Zhou [4]) 任意の $t \neq 0$ に対して、

- (i) $\phi(t, \cdot)$ は連続微分可能;
- (ii) $\phi(t, x) \in \text{int } X$;
- (iii) $\|\phi(t, x) - \Pi_X(x)\| \leq 2|t|$;
- (iv) $\nabla_x \phi(t, x)$ は正定値対称で $\|\nabla_x \phi(t, x)\| < 1$ を満たす。

以下では、 Π_X の平滑化関数 ϕ をもう少し一般的に構成することを考える。

定義 1 ([5]) 次の性質をもつ関数 g の全体を Chen-Mangasarian クラスといい、 $g \in \mathcal{CM}$ で表す。

- (i) $g: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ は連続微分可能な凸関数;
- (ii) $\lim_{\alpha \rightarrow -\infty} g(\alpha) = 0$;
- (iii) $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} (g(\alpha) - \alpha) = 0$;
- (iv) $0 < g'(\alpha) < 1, \quad \forall \alpha \in \mathbf{R}$.

プラス関数 $(\alpha)_+$ に対する平滑化関数を、 $g \in \mathcal{CM}$ を用いて

$$\psi(t, s) := tg\left(\frac{s}{t}\right), \quad t > 0 \text{ は平滑化変数}$$

で定義する。定義より、特に $\psi(1, \alpha) = g(\alpha)$ である。

g の例として、 $g(\alpha) = \frac{\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 4}}{2}$ ととれば、CHKS 関数 $\psi(t, s) = \frac{s + \sqrt{s^2 + 4t^2}}{2}$ が得られ、また、 $g(\alpha) = \ln(e^\alpha + 1)$ ととれば、ニューラルネットワーク関数 $\psi(t, s) = t \ln(e^{\frac{s}{t}} + 1)$ が得られる。

一般に $g \in \mathcal{CM}$ と $t \neq 0$ によってできる ψ に対しても

$$\begin{aligned} \phi(t, x) &:= \frac{rx}{q(t, x)}, \\ q(t, x) &:= r + \psi(|t|, \sqrt{\|x\|^2 + t^2} - r) \end{aligned}$$

と定義すると、 $g \in \mathcal{CM}$ によって一般化された ϕ の性質は以下のようになる。

命題 2 任意の $t \neq 0$ に対して,

- (i) $\phi(t, \cdot)$ は連続微分可能;
- (ii) $\phi(t, x) \in \text{int } X$;
- (iii) $\|\phi(t, x) - \Pi_X(x)\| \leq (1 + g(0))|t|$;
- (iv) $\nabla_x \phi(t, x)$ は正定値対称で $\|\nabla_x \phi(t, x)\| < 1$ を満たす.

命題 2 の性質 (iii) より $\lim_{t \rightarrow 0} \phi(t, x) = \Pi_X(x)$ が従うので, 関数 $\phi(\cdot, x)$ の $t = 0$ における連続性のために

$$\phi(0, x) := \Pi_X(x)$$

と定義することは自然である. これにより, $\phi(t, x)$ は $\mathbf{R}^{1+n}$ 上で定義されることになる.

次に, VIP と等価な NoE (2) を平滑化し, それを用いてもなお VIP と等価となる方程式を考える.

$z := (t, x) \in \mathbf{R}^{1+n}$ とおき, 関数 $H : \mathbf{R}^{1+n} \rightarrow \mathbf{R}^{1+n}$ を

$$H(z) := \begin{pmatrix} t \\ F(\phi(t, x)) + x - \phi(t, x) \end{pmatrix}$$

と定義する. 関数 H は $(\mathbf{R} \setminus \{0\}) \times \mathbf{R}^n$ 上で連続微分可能で, $\mathbf{R}^{1+n}$ 上で semismooth である. また, $z^* = (t^*, x^*)$ が $H(z^*) = 0$ の解ならば, x^* は NoE の解である. 逆に, x^* が NoE の解ならば, $z^* = (0, x^*)$ は $H(z^*) = 0$ の解である. この意味で NoE, すなわち VIP を解くことと方程式 $H(z) = 0$ を解くことは等価である.

5 アルゴリズム

本節では, 前節の終わりで導入した方程式を解くアルゴリズムを述べる. 基本的には Qi and Zhou [4] と同様であり, その枠組の元は Qi, Sun and Zhou [2] の箱制約 VIP に対する平滑化ニュートン法である. ここでもそれに準じている.

必要な諸量を定義しておく. まず $\bar{t} > 0$ と $\gamma \in (0, 1)$ を $\gamma \bar{t} < 1$ となるようにとる. 直線探索に用いるメリット関数 $\Psi : \mathbf{R}^{1+n} \rightarrow \mathbf{R}_+$ と, ニュートン方程式の右辺項を修正し制御する関数 $\beta : \mathbf{R}^{1+n} \rightarrow \mathbf{R}_+$ を

$$\begin{aligned} \Psi(z) &:= \|H(z)\|^2, \\ \beta(z) &:= \gamma \min\{1, \Psi(z)\} \end{aligned}$$

と定義する.

アルゴリズム 1

ステップ 0. (初期設定) $\delta \in (0, 1)$, $\sigma \in (0, 1/2)$ を選び, $\bar{z} := (\bar{t}, 0)$ とする. $t^{(0)} := \bar{t}$ とおき, $x^{(0)} \in \mathbf{R}^n$ を任意にとる. $z^{(0)} := (t^{(0)}, x^{(0)})$, $k := 0$ とおく.

ステップ 1. (収束判定) $\|H(z^{(k)})\| = 0$ ならば終了.

ステップ 2. (探索方向の決定) 修正ニュートン方程式

$$H(z^{(k)}) + \nabla H(z^{(k)})^\top \Delta z^{(k)} = \beta(z^{(k)})\bar{z}$$

を解き, 探索方向 $\Delta z^{(k)} := (\Delta t^{(k)}, \Delta x^{(k)}) \in \mathbf{R}^{1+n}$ を求める.

ステップ 3. (直線探索) 次式を満たす最小の非負整数 ℓ を ℓ_k とする.

$$\Psi(z^{(k)} + \delta^\ell \Delta z^{(k)}) \leq [1 - 2\sigma(1 - \gamma\bar{t})\delta^\ell] \Psi(z^{(k)}).$$

ステップ 4. (更新) $z^{(k+1)} := z^{(k)} + \delta^{\ell_k} \Delta z^{(k)}$, $k := k + 1$ としてステップ 1 に戻る.

6 収束性

本節では, アルゴリズム 1 の大域的収束性および局所的収束性について述べる. まず, アルゴリズム 1 が定義可能であるために, 以下の仮定を設ける.

仮定 1 任意の $z = (t, x) \in \mathbf{R}_{++} \times \mathbf{R}^n$ に対して $\nabla H(z)$ は正則である.

仮定 1 の下で大域的収束性に関して, 以下の定理が成り立つ.

定理 1 仮定 1 を満たすとする. このとき, アルゴリズム 1 によって無限点列 $\{z^{(k)} = (t^{(k)}, x^{(k)})\}$ が生成される. $\{z^{(k)}\}$ は少なくとも 1 つ集積点を持ち, $\{z^{(k)}\}$ の任意の集積点は $H(z) = 0$ の解である.

以下の定理は, 仮定 1 を満たす十分条件の下での大域的収束性を述べている.

定理 2 任意の $x \in X$ に対して $\nabla F(x)$ が半正定値であるとする. このとき, アルゴリズム 1 によって無限点列 $\{z^{(k)} = (t^{(k)}, x^{(k)})\}$ が生成される. $\{z^{(k)}\}$ は少なくとも 1 つ集積点を持ち, $\{z^{(k)}\}$ の任意の集積点は $H(z) = 0$ の解である.

局所的収束性に関する定理を述べる前に, 必要な次の記号を導入する.

$$A(0, x) := \{\lim \nabla H(\tau^{(k)}, \xi^{(k)}) : \tau^{(k)} \rightarrow +0, \xi^{(k)} \rightarrow x\}$$

と定義すると, 明らかに $A(0, x) \subseteq \partial_B H(0, x)$ である. ここで, $\partial_B H(0, x)$ は H の点 $(0, x)$ における Bouligant 劣微分を表す.

仮定 1 の下で局所的収束性に関して, 以下の 2 定理が得られる.

定理 3 仮定 1 を満たすとする. $z^* = (0, x^*)$ はアルゴリズム 1 によって生成される無限点列 $\{z^{(k)}\}$ の集積点とし, すべての $V \in A(z^*)$ が正則であるとする. このとき, 点列 $\{z^{(k)}\}$ は z^* に超 1 次収束する. さらに, もし ∇F が x^* の近傍でリプシッツ連続ならば, 点列 $\{z^{(k)}\}$ は z^* に 2 次収束する.

定理 4 仮定 1 を満たすとする. $z^* = (0, x^*)$ はアルゴリズム 1 によって生成される無限点列 $\{z^{(k)}\}$ の集積点とし, $\nabla F(\Pi_X(x^*))$ が正定値であるとする. このとき, 点列 $\{z^{(k)}\}$ は z^* に超 1 次収束する. さらに, もし ∇F が x^* の近傍でリプシッツ連続ならば, 点列 $\{z^{(k)}\}$ は z^* に 2 次収束する.

7 終わりに

本稿では、あまり研究されていない球制約の変分不等式問題を取り上げた。この問題に対して Qi and Zhou [4] によって提案された平滑化ニュートン法の構成を Chen-Mangasarian クラスに一般化した。拡張されたアルゴリズムに対しても、Qi らと同様の大域的および局所的収束性を示すことができる。今後の課題は、数値実験によってその有効性を検証することである。また、第2節の終わりで述べた、自然残差方程式 (3) に基づくアプローチや、第4節で言及した平滑化の簡易版の検討も課題としてあげられる。

参考文献

- [1] X. Fan and Q. Yan, Homotopy method for solving ball-constrained variational inequalities, *Nonlinear Analysis*, **74** (2011), 1539–1544.
- [2] L. Qi, D. Sun and G. Zhou, A new look at smoothing Newton methods for nonlinear complementarity problems and box constrained variational inequalities, *Mathematical Programming*, **87** (2000), 1–35.
- [3] L. Qi and G. Zhou, A smoothing Newton method for minimizing a sum of Euclidean norms, *SIAM Journal of Optimization*, **11** (2000), 389–410.
- [4] L. Qi and G. Zhou, A smoothing Newton method for ball constrained variational inequalities with applications, *Computing [Suppl]*, **15** (2001), 211–225.
- [5] P. Tseng, Analysis of a non-interior continuation method based on Chen-Mangasarian smoothing functions for complementarity problems, M. Fukushima and L. Qi (eds.), *Reformulation: nonsmooth, piecewise smooth, semismooth and smoothing methods*, Kluwer, 1999, pp. 381–404.