

平成 30 年 6 月 15 日現在

機関番号：34416

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K21522

研究課題名(和文) 数値的条件の悪い非線形最適化問題に対する安定した求解手法とソルバの開発

研究課題名(英文) Development of Stable Methods and Solvers for Numerically Ill-conditioned Nonlinear Optimization Problems

研究代表者

檀 寛成 (Dan, Hiroshige)

関西大学・環境都市工学部・准教授

研究者番号：30434822

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,500,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、数値的条件の悪い非線形最適化問題(NLP)に対する研究を行った。NLPには、求解途中で問題の数値的条件が悪くなり、安定して求解できない問題がある。この問題を克服するために、本研究では計算精度を任意に設定できる多倍長精度計算を用いたNLPソルバ(求解ソフトウェア)を作成し、通常用いられる倍精度計算では求解できないNLPが多倍長精度計算で求解できるケースがあることを示した。さらに、本ソルバを用いて、数値的条件の悪いNLPの求解過程で生じることのある現象の一つであるMaratos効果について詳細に調べ、その現象が生じる領域が限定的であることを示した。

研究成果の概要(英文)：In this research, our group has researched numerically ill-conditioned nonlinear optimization problems (NLPs). It is well known that there exist some NLPs which are difficult to find an optimal solution because numerical conditions are getting worse while we solve them. To overcome such difficulties, our group has developed an NLP solver with multiple precision arithmetic which enables us to perform arbitrary precision arithmetic. Also, by using this solver, our group has shown the existence of NLPs which cannot be solved by double precision and can be solved by multiple precision. Moreover, our group has observed the numerical behavior of the Maratos effect: it is a phenomenon which deteriorates the fast convergence in the neighborhood of the optimal solution. As a result, our group has shown that the region in which the Maratos effect occurs is limited.

研究分野：数理最適化

キーワード：非線形最適化 ソルバ 多倍長精度計算 自動微分

1. 研究開始当初の背景

本研究では、非線形最適化問題 (Nonlinear Optimization Problem, NLP) についての研究を行った。NLP は工学・自然科学・社会科学などによく現れる、非常に有用性の高い問題クラスである。

NLP に対する解法としては、逐次二次計画法 (Sequential Quadratic Programming method, SQP 法) や内点法などの解法が提案されている。基本的な NLP はこれらの解法で求解可能であるが、NLP の中には数値的条件の悪い問題も存在する。ここで、数値的条件の悪い NLP とは、理論的には求解できるはずだが、求解アルゴリズムが収束しない、あるいは収束が遅くなるような NLP を指す。

これまでのところ、NLP が実社会で広く使われているとは言いがたい。その大きな理由の一つは、求解途中に数値的条件が悪くなることもあり、安定して求解できない状況が発生することにある。近年、線形最適化問題 (Linear Optimization Problem, LP) や混合整数最適化問題 (Mixed Integer Optimization Problem, MIP) は大きな注目を集め、実社会で広く利用されている。その大きな理由の一つは、非常に強力な LP/MIP ソルバが開発されたことにある。すなわち、NLP においても上記のような問題を乗り越え、数値的な性質の悪い NLP を含めて安定して求解できるような環境を整える必要がある。

2. 研究の目的

本研究では、次の 2 点を研究目標として研究を行った：

《目標 1》：多倍長精度計算可能な NLP ソルバ (ソフトウェア) の開発

《目標 2》：数値的条件の悪い NLP の持つ特徴の分析と悪条件を克服する手法の開発

3. 研究の方法

(1) 《目標 1》について

本研究では、多倍長精度計算という技術を用いて研究を行った。通常、最適化 (や他の科学技術計算) で浮動小数点数を扱う場合には、倍精度 (double) を用いて計算を行うのが一般的である。倍精度計算は 10 進で 16 桁程度の計算精度を持つ。これに対し多倍長精度計算とは、計算精度を任意に設定できる技術である。

本研究では、まず、多倍長精度計算可能な NLP ソルバを実装し、数値的不安定性に強い NLP ソルバを開発することとした。研究代表者のグループでは、研究開始時点で多倍長精度計算可能な凸な二次計画問題 (Quadratic Optimization Problem, QP) を解くソルバを

開発済みであったことから、凸な QP を部分問題として解く SQP 法を多倍長精度計算可能な形で実装することとした。

また、この実装の過程で、自動微分ソフトウェアも開発することとした。一般に、NLP ソルバ内では、目的関数や制約条件式の偏導関数値が必要になる。この計算には、いわゆる数値微分を用いたり、問題毎に微分値を与える関数を書き下して利用することもできるが、自動微分を用いれば微分値を自動的に計算することが可能になる。本研究では、上記の NLP ソルバの開発に関連し、多倍長精度計算が可能な自動微分ソフトウェアも併せて開発した。

このような NLP ソルバを開発することにより、倍精度では計算精度が不足するために求解できない NLP を解くことを狙った。

(2) 《目標 2》について

さらに本研究では、《目標 1》で開発した多倍長精度計算可能な NLP ソルバを用いて、倍精度では求解できない NLP において数値的にどのようなことが生じているのかを詳細に調べることにした。

研究開始当初は、数値的に条件が悪い最適化問題全体をターゲットとして数値的挙動を観察することを考えていたが、その過程で Maratos 効果に関する興味深い事実を発見したため、その点に集中して研究を行うこととした。Maratos 効果とは、SQP 法で生じることのある現象であり、「最適解の任意の近傍内に、超一次収束に必要な条件を満たさない点が存在することがあり、収束が遅くなる」というものである。これを詳細に調べることで、求解時にこの現象を回避する手法のヒントを得ることを狙った。

4. 研究成果

(1) 多倍長精度計算可能な NLP ソルバの開発

本研究では、多倍長精度計算可能な NLP ソルバを開発した。多倍長精度計算用のライブラリとして GMP (<https://gmplib.org>) を用いた。また、多倍長精度計算を用いた線形代数演算 (ベクトルの内積、線形方程式系の求解など) には MPACK (<http://mplapack.sourceforge.net>) を用いた。前項で述べたように、実装した手法は逐次二次計画法 (SQP 法) である。

図 1 は、本研究で開発したソルバの基本的な挙動を確認するために実施した数値実験の結果である。対象とした問題は、NLP のベンチマーク問題集として有名な Hock & Schittkowski benchmark problems (115 題のうち 74 題を使用) である。横軸は SQP 法の反復回数、縦軸は NLP の最適性の条件 (KKT 条件) の残差を表している。KKT 条件

の残差が 0 に近づけば、SQP 法で得られる点列が最適解に近づいていることを表している。

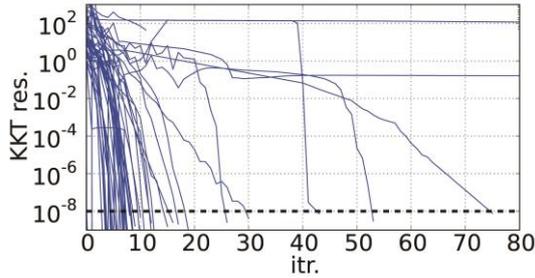


図 1: 開発した NLP ソルバの収束の性質

図 1 よりわかるように、多くの問題に対し、KKT 条件の残差が反復の最後の数回で急速に 0 に近づいていることがわかる。これは SQP 法が生成する点列が、超一次収束という速い収束を達成していることを表しており、開発した NLP ソルバがよく機能していることの一つの証左となっている。

(2) 多倍長精度計算可能な自動微分ソフトウェアの開発

本研究では、(1) の NLP ソルバ内で利用するために、多倍長精度計算可能な自動微分ソフトウェアを開発した。

一般に、最適化問題に現れる変数や制約式は添字を持つことが多い。そこで本研究では、添字を陽に扱うことができるような自動微分ソフトウェアを開発した。さらに、これは (1) の NLP ソルバで利用することが念頭にあったことから、(1) と同様、多倍長精度計算可能となるように実装した。

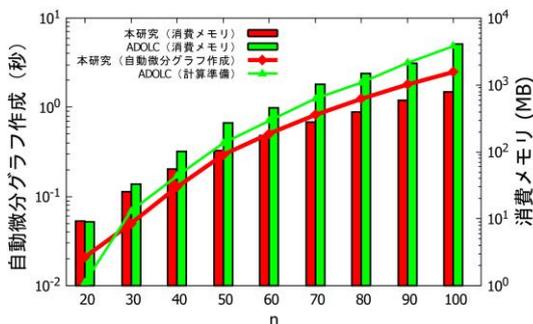


図 2: 開発した自動微分ソフトウェアの性能 (自動微分グラフの作成時間, 消費メモリサイズ)

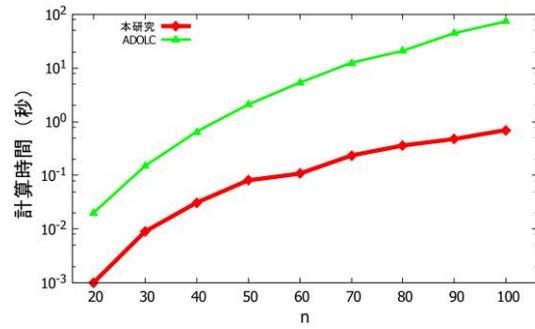


図 3: 開発した自動微分ソフトウェアの性能 (計算時間)

図 2, 3 は、本研究で開発した自動微分ソフトウェアと、様々な NLP ソフトウェアで用いられている自動微分ソフトウェア ADOL-C (※オペレーションズ・リサーチ関係の無償のソフトウェアを集めているサイト COIN-OR (<https://www.coin-or.org>) に掲載されている) との性能比較を行った結果である。偏導関数値の計算対象としたのは次の関数である：

$$f_{ij} = \sum_{k \in K} x_{ik} \tan(x_{jk} y_k) / (x_{ij} - \tan(x_{ij} y_j))$$

$$I, J, K := \{1, 2, \dots, n\}$$

一般に、自動微分を用いて計算を行う際には、

- (a) 最初に一回だけ行う処理 (変数の準備, 計算グラフの作成など)
- (b) 偏導関数値の計算 (変数の値が変わる度に実行)

という作業が必要になる。図 2 は、本研究で開発した自動微分ソフトウェアと ADOL-C について、(a) に要した時間ならびに計算に必要な消費メモリサイズを示している。また図 3 は (b) に要した時間を示している。

今回計算対象とした関数は、添字をうまく使うことで、計算グラフの作成時のコストを減らすことができるような関数である。図 2, 3 は、このような場合、本研究で開発した自動微分ソフトウェアが優れていることを示している。

(3) 倍精度計算では求解できないが多倍長精度計算であれば求解できる NLP の発見

(1) で開発した NLP ソルバを用いることにより、倍精度計算では求解できないが多倍長精度計算であれば求解できるような NLP を発見した。

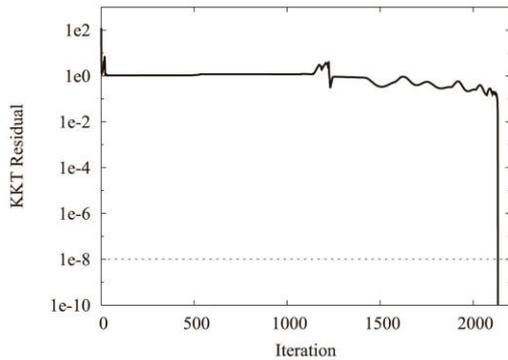


図 4: 多倍長精度計算による求解例
(横軸: 反復回数, 縦軸: 最適性条件の残差)

図 4 は, 与えられた複数の円を包含する円の最小半径を求める問題 (Circles-in-a-circle 問題) を, 多倍長精度計算を用いた SQP 法で求解した結果である. 倍精度では 20 回程度の反復で数値エラーが発生し, 計算が終了した. これは, 部分問題が「狭義相補性条件」と呼ばれる数値的に望ましい条件を満たさず, その結果, 部分問題に現れる行列の条件数が 10^{17} を越える値になったためであった. 一方, 多倍長精度では計算を続行できるが, 収束に要した反復回数は 2000 回以上となり (通常は数十回程度で収束), 最適解の近傍外で数値的性質が悪いことがわかる. ただし, 反復の最後では残差が急速に減少 (超一次収束) していることから, 最適解の性質はよいであろうことがわかる.

このような問題が存在することは, (1) で開発した NLP ソルバの優位性を表すとともに, このような問題を回避する努力が必要であることを示唆している.

(4) Maratos 効果が生じる領域の特徴の発見

(1) で開発した NLP を用いて Maratos 効果が生じることが知られている問題を解き, そのときの数値的挙動を多倍長精度計算で詳細に分析した. その結果, Maratos 効果が生じる領域は極めて限定的であることがわかった.

図 5 は, Maratos 効果が生じることが知られている Powell の問題で, どの点において Maratos 効果が生じているかを調べたものである. Maratos 効果が生じる点を赤で, 生じない点を青で示している. 図 5 で縦に並んでいる赤い点は, Powell の問題の実行可能領域内とほぼ一致している. すなわち, この図は, 実行可能領域内, あるいはそれに極めて近い点でしか Maratos 効果が生じないことを示している.

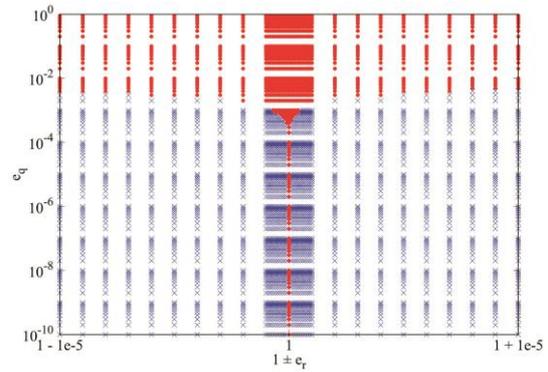


図 5: Powell の問題で Maratos 効果が生じる領域 (*図の横方向の中心かつ無限下方に最適解がある)

この事実から, 反復点の実行可能領域から少し離れるような効果を持たせた SQP 法では, Maratos 効果を回避できることが期待される. そのような手法の開発については, 今後, 「非線形最適化問題の求解速度の改善: 最適解近傍外での数値的性質悪化の回避」 (科研費・基盤研究 (C)) で取り組む予定である.

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 0 件)

[学会発表] (計 11 件)
(*印は発表での登壇者を表す)

① *野口 将嗣, 檀 寛成,
添字を扱うことができる自動微分ソフトウェアの設計と実装, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2018 年春季研究発表会 (2018).

② Hiroshige Dan,
Numerical Observation of SQP Method for Ill-posed NLPs with Multiple Precision Arithmetic, 2nd Workshop on Mathematical Optimization and Data Analysis (Berlin, Germany, 2017).

③ Hiroshige Dan,
Numerical Observation of Maratos Effect with Multiple Precision Arithmetic, 15th EUROPT Workshop on Advances in Continuous Optimization (Montreal, Canada, 2017).

④ *松本 侑也, 野口 将嗣, 檀 寛成,
2 階微分可能な自動微分ソフトウェアの開発, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2017 年春季研究発表会 (2017).

⑤ *Yuya Matsumoto, Hiroshige Dan,
Nonlinear Optimization Solver with

Multiple Precision Arithmetic, Proceedings of The 20th Workshop on Synthesis and System Integration of Mixed Information Technology (SASIMI2016) (Kyoto, Japan, 2016).

⑥ *松本 侑也, 檀 寛成, Maratos 効果の生じる問題例に対する数値的検証, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2016 年秋季研究発表会 (2016).

⑦ *Hiroshige Dan, Yuya Matsumoto, Implementation of NLP Solver with Multiple Precision Arithmetic and Numerical Behavior Analysis of SQP Method for Ill-posed NLPs, The Fifth International Conference on Continuous Optimization of the Mathematical Optimization Society (ICCOPT2016) (Tokyo, Japan, 2016).

⑧ *Yuya Matsumoto, Hiroshige Dan, Implementation of Nonlinear Optimization Solver with Multiple Precision Arithmetic, The 11th International Symposium in Science and Technology at Kansai University 2016 (Osaka, Japan, 2016).

⑨ *Hiroshige Dan, Yuya Matsumoto, Numerical Behavior Analysis of SQP Method for Ill-posed NLPs with Multiple Precision Arithmetic, 14th EUROPT Workshop on Advances in Continuous Optimization (EUROPT2016) (Warsaw, Poland, 2016).

⑩ *松本 侑也, 檀 寛成, 多倍長精度計算可能な自動微分ソフトウェアの開発と NLP ソルバの改良, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2016 年春季研究発表会 (2016).

⑪ *Hiroshige Dan, Implementation of Nonlinear Optimization Solver with Multiple Precision Arithmetic, Program of The 22nd International Symposium on Mathematical Programming (ISMP2015) (Pittsburgh, USA, 2015).

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
出願年月日 :
国内外の別 :

○取得状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
取得年月日 :
国内外の別 :

[その他]
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

檀 寛成 (DAN, Hiroshige)
関西大学・環境都市工学部・准教授
研究者番号 : 30434822

(2) 研究分担者

()

研究者番号 :

(3) 連携研究者

()

研究者番号 :

(4) 研究協力者

松本 侑也 (Matsumoto, Yuya)
野口 将嗣 (Noguchi, Masashi)