日本オペレーションズ・リサーチ学会
2022年 春季研究発表会

リーマン多様体上の非線形最適化問題に対する点列最適性と大域的収束性を持つ拡張ラグランジュ法について

05000141　京都大学　*山川雄也　YAMAKAWA Yuya
05000081　京都大学　佐藤寛之　SATO Hiroyuki

1.　はじめに

本研究では，次のリーマン多様体上の非線形最適化問題を扱う．

$$\begin{aligned} &\underset{x \in \mathcal{M}}{\text{Minimize}} && f(x) \\ &\text{subject to} && g(x) = 0,\ h(x) \geq 0 \end{aligned} \tag{1}$$

ここで，$\mathcal{M}$ は ℓ 次元リーマン多様体，$f\colon \mathcal{M} \to \mathbb{R}$, $g\colon \mathcal{M} \to \mathbb{R}^m$，$h\colon \mathcal{M} \to \mathbb{R}^n$ はそれぞれ $\mathcal{M}$ 上で連続的微分可能な関数とする．また，$g_i\colon \mathcal{M} \to \mathbb{R}\ (i = 1, \ldots, m)$ と $h_j\colon \mathcal{M} \to \mathbb{R}\ (j = 1, \ldots, n)$ は，それぞれ，$g(x) := [g_1(x), \ldots, g_m(x)]^\top$ と $h(x) := [h_1(x), \ldots, h_n(x)]^\top$ を満たす関数とする．

リーマン多様体上の最適化は，近年盛んに研究されており，特にユークリッド空間上の無制約最適化における主要な手法の多くは，リーマン多様体上の無制約最適化へと拡張されている [4]．一方，リーマン多様体上の制約付き最適化問題に対する研究は，無制約最適化の研究に比べて非常に少なく，まだまだ発展途上の段階であるといえる．

ユークリッド空間上の制約付き最適化問題に対しては，これまで非常に多くの手法が研究されてきた．これらの手法の主な目的は，最適性の一次の必要条件である，Karush–Kuhn–Tucker 条件（KKT 条件）を満たす点を求めることである．KKT 条件は，問題に対して制約想定が成り立つという条件の下で意味を成すが，近年では，この制約想定を仮定せずに成り立つ最適性の一次の必要条件も研究されている．このような条件には，Approximate KKT 条件（AKKT 条件 [1]）などがあり，これらは点列を用いて定義されることから点列最適性条件と呼ばれ，さらに，点列最適性条件を満たす点を求めるための手法についても研究が行われている．

本発表では，問題 (1) に対する点列最適性条件，および，点列最適性条件を満たす点へ大域的収束する拡張ラグランジュ法を提案する．リーマン多様体上の最適化では，これまでに点列最適性の概念は提案されていない．したがって，点列最適性条件の提案に関しては本研究において新規性がある点といえる．また，リーマン多様体上の非線形最適化問題に対する拡張ラグランジュ法については，Liu & Boumal [3] によって提案されているが，彼らの手法は線形独立制約想定の下で KKT 点を求める手法である．一方，本研究で提案する拡張ラグランジュ法の収束解析は，制約想定を仮定せずに点列最適性条件を満たす点への収束を議論するという点が異なる [5]．

2.　問題 (1) に対する最適性条件と制約想定

まず，問題 (1) に対する KKT 条件を紹介する．

定義 1 [3] 問題 (1) の実行可能点 $x \in \mathcal{M}$ において，KKT 条件が成り立つとは，ある $y \in \mathbb{R}^m$ と $z \in \mathbb{R}^n_+$ が存在して，$\mathrm{grad}_x L(x, y, z) = 0$，$z^\top h(x) = 0$ を満たすことである．ただし，$\mathbb{R}^n_+ := \{v \in \mathbb{R}^n; v \geq 0\}$，$L(x, y, z) := f(x) - y^\top g(x) - z^\top h(x)$ であり，$\mathrm{grad}_x L$ は L の変数 $x \in \mathcal{M}$ に関するリーマン多様体上の勾配である．

KKT 条件は，いくつかの制約想定の下で問題 (1) に対する最適性の必要条件となることが知られており，ユークリッド空間上の最適化における KKT 条件をリーマン多様体上の最適化に拡張したものである．また，リーマン多様体上の最適化における制約想定としては，以下が提案されている．

定義 2 [2] 問題 (1) の実行可能点 $x \in \mathcal{M}$ において，線形独立制約想定 (LICQ) が成り立つとは，$\{\mathrm{grad} g_i(x)\}_{i=1}^m \cup \{\mathrm{grad} h_j(x)\}_{j \in \mathcal{A}(x)}$ が線形独立となることである．ただし，$\mathcal{A}(x) := \{j; h_j(x) = 0\} \subset \{1, \ldots, n\}$ である．

定義 3 [2] 問題 (1) の実行可能点 $x \in \mathcal{M}$ において，Mangasarian–Fromovitz 制約想定 (MFCQ) が成り立つとは，$\{\mathrm{grad} g_i(x)\}_{i=1}^m$ が線形独立であり，さらに，ある接ベクトル $v \in T_x\mathcal{M}$ が存在して，$\langle \mathrm{grad} g_i(x), v\rangle_x = 0\ (j \in \{1, \ldots, m\})$ および $\langle \mathrm{grad} h_j(x), v\rangle_x > 0\ (j \in \mathcal{A}(x))$ が成り立つことを

いう．ただし，$T_x\mathcal{M}$ は点 $x \in \mathcal{M}$ 上における $\mathcal{M}$ の接空間，$\langle \cdot, \cdot \rangle_x$ は $T_x\mathcal{M}$ 上の内積である．

上記の制約想定に関しても，ユークリッド空間上の最適化における LICQ および MFCQ を，リーマン多様体上の最適化に拡張したものである．

以下は，本研究において新たに提案するリーマン多様体上の最適化における制約想定および点列最適性条件と，それらに関する性質である．

定義 4 [5] 問題 (1) の実行可能点 $x \in \mathcal{M}$ において，Robinson の制約想定 (RCQ) が成り立つとは，

$$0 \in \mathrm{int}\left(\begin{bmatrix} g(x) \\ h(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathrm{D}g(x) \\ \mathrm{D}h(x) \end{bmatrix} T_x\mathcal{M} - \begin{bmatrix} \{0\} \\ \mathbb{R}^n_+ \end{bmatrix}\right)$$

が成り立つことをいう．ただし，$\mathrm{D}g(x)$ は関数 g の $x \in \mathcal{M}$ における微分を表す．

上記は，ユークリッド空間上の最適化における Robinson の制約想定をリーマン多様体上の最適化に拡張したものである．また，ユークリッド空間上の最適化と同様に，以下の性質が成り立つ．

定理 1 [5] 問題 (1) の実行可能点 $x \in \mathcal{M}$ において RCQ が成り立つことと，MFCQ が成り立つことは等価である．

続いて，問題 (1) に対する点列最適性条件を与える．

定義 5 [5] 問題 (1) の実行可能点 $x \in \mathcal{M}$ において，AKKT 条件が成り立つとは，ある $\{x_k\} \subset \mathcal{M}$，$\{y_k\} \subset \mathbb{R}^m$，$\{z_k\} \subset \mathbb{R}^n_+$ が存在して，$x_k \to x$，$\mathrm{grad}_x L(x_k, y_k, z_k) \to 0$，$z_k^\top [h(x_k)]_+ \to 0$ $(k \to \infty)$ が成り立つことをいう．ただし，$[h(x)]_+ := [\max\{h_1(x), 0\}, \ldots, \max\{h_n(x), 0\}]^\top$ である．

上記の AKKT 条件に関しても，ユークリッド空間における AKKT 条件が満たす性質と同様の性質を示した．つまり，以下の定理が成り立つ．

定理 2 [5] 問題 (1) の局所的最適解 $x \in \mathcal{M}$ は，AKKT 条件を満たす．

定理 3 [5] 問題 (1) の局所的最適解 $x \in \mathcal{M}$ において，LICQ，MFCQ，または，RCQ が成り立つとき，以下の (i) および (ii) は同値である．

(i) x において KKT 条件が成り立つ．

(ii) x において AKKT 条件が成り立つ．

3. 拡張ラグランジュ法とその大域的収束性

AKKT 条件を満たす点を求めるための手法として，以下の拡張ラグランジュ法を提案する．

<u>提案手法（拡張ラグランジュ法）</u>

Step 0: $(x_0, y_0, z_0) \in \mathcal{M} \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$，$(\widehat{y}_0, \widehat{z}_0) \in C \times D$，$\rho_0 > 0$，$\eta \in (0, 1)$，$\gamma > 1$ を設定する．ただし，$C := \{y \in \mathbb{R}^m; -10^6 \leq y \leq 10^6\}$，$D := \{z \in \mathbb{R}^n; 0 \leq z \leq 10^6\}$ である．

Step 1: 拡張ラグランジュ関数 $F(x; \rho, y, z) := f(x) + \frac{1}{2\rho}\|y - \rho g(x)\|^2 + \frac{1}{2\rho}\|[z - \rho h(x)]_+\|^2$ の最小化問題 $\min_{x \in \mathcal{M}} F(x; \rho_k, \widehat{y}_k, \widehat{z}_k)$ を解き，その解を x_{k+1} とする．

Step 2: $y_{k+1} := \widehat{y}_k - \rho_k g(x_{k+1})$，$z_{k+1} := [\widehat{z}_k - \rho_k h(x_{k+1})]_+$，$\widehat{y}_{k+1} := \Pi_C(\widehat{y}_k - \rho_k g(x_{k+1}))$，$\widehat{z}_{k+1} := \Pi_D(\widehat{z}_k - \rho_k h(x_{k+1}))$ と更新する．ただし，Π_C は C への凸射影である．

Step 3: もし，$k > 0$ かつ $u_{k+1} > \eta u_k$ であれば，$\rho_{k+1} := \gamma \rho_k$ と更新する．ただし，$u_k := \max\{\|g(x_k)\|, \|\min\{h(x_k), \widehat{z}_{k-1}/\rho_{k-1}\}\|\}$ である．

Step 4: $k := k + 1$ として，Step 1 へ戻る．

提案手法は，適切な仮定の下で AKKT 条件を満たす点に大域的収束する [5]．講演当日は，提案手法を用いた数値実験結果についても発表する．

参考文献

[1] Andreani, R., Haeser, G., Martínez, J.M.: On sequential optimality conditions for smooth constrained optimization. Optimization **60**, 627–641 (2011)

[2] Bergmann, R., Herzog, R.: Intrinsic formulation of KKT conditions and constraint qualifications on smooth manifolds. SIAM J. Optim. **29**, 2423–2444 (2019)

[3] Liu, C., Boumal, N.: Simple algorithms for optimization on Riemannian manifolds with constraints. Appl. Math. Optim. **82**, 949–981 (2020)

[4] Sato, H.: Riemannian Optimization and Its Applications. Springer Nature, Switzerland (2021)

[5] Yamakawa, Y., Sato, H.: Sequential optimality conditions for nonlinear optimization on Riemannian manifolds and a globally convergent augmented Lagrangian method. To appear in Comput. Optim. Appl.