特別研究報告書

非線形相補性問題に対する近接点法の実用性に関する考察

指導教官

福嶋　雅夫　教授
山下　信雄　助手

情報学科数理工学コース平成 8 年度入学

田島 潤

平成 12 年 2 月 15 日提出

非線形相補性問題に対する
近接点法の実用性に関する考察

田島 潤

摘要

経済，生産計画，システム設計などさまざまな分野において現れる問題は，しばしば非線形相補性問題として定式化される．非線形相補性問題に対して，これまでにその性質に関する多くの解析がなされ，またこの問題を解くためのさまざまなアルゴリズムが提案されてきた．そのようなアルゴリズムの中でも近接点法は，扱う関数に対する比較的緩い条件のもとで優れた収束性を持つことが理論的に示されている．ところが，非線形相補性問題に対する近接点法の実装に関する報告やその実用性についての研究はあまり行われていない．

本報告書では，まず近接点法の実装に際して困難を伴う点を指摘する．次に，その考察に基づいてアルゴリズムの実装法を提案する．具体的には，部分問題に対する終了条件を工夫することによってより少ない反復数で解が得られるようにアルゴリズムを改良する．このアルゴリズムに対して，いくつかの問題を用いた数値実験を行い，その実用性に関する性能評価をした．その結果，初期点やパラメータを非常に巧妙に選ばないと解が得られないような問題もわずかながら存在したが，大部分の問題に対しては解を効率良く求められることがわかった．

目 次

1 序論

昨今，経済，生産計画，システム設計などさまざまな分野において，オペレーションズリサーチの手法が用いられその有効性が報告されている．そのようなオペレーションズリサーチで扱われる問題は，しばしば相補性条件を含む数学モデルとして定式化される．なお，2 つのベクトル $x = (x_1, \cdots, x_n)^T, y = (y_1, \cdots, y_n)^T$ に対して，

$$x_i \geq 0, \quad y_i \geq 0, \quad x_i y_i = 0, \quad (i = 1, \cdots, n)$$

が成り立つとき，つまり 2 つのベクトルの各成分が非負であり，さらにそれらの少なくとも一方が 0 となるようなとき，ベクトル x と y は相補性条件を満たしているという．

相補性条件を含む問題の例として以下のものが挙げられる．多くの最適化問題は制約つき非線形最小化問題として定式化することができる．この問題における局所的最適解の必要条件は相補性条件を含むカルーシュ·キューン · タッカー条件として記述できることが知られている [2]．また，複数の利害の異なる意思決定者が各々の利益を最大にするように行動するようなゲームにおいて，このゲームの戦略の均衡点を求める問題は相補性条件を伴った数学モデルで記述される [2, 4]．他にも，2 段階計画問題などの均衡制約を持つ数理計画問題は制約条件に相補性条件を持つ数理計画問題と考えることができる [4]．このように，幅広い分野の問題が相補性条件を含む数学モデルに定式化されるので, 相補性条件をともなった問題を考察することは非常に重要である．本報告書では，相補性条件を含む問題の中でも最も代表的な問題のクラスである非線形相補性問題 (Nonlinear Complementarity Problem, NCP) と呼ばれる問題を扱う．

非線形相補性問題は，与えられた写像 $F : \Re^n \rightarrow \Re^n$ に対し, 次のような条件を満たすベクトル $x \in \Re^n$ を求める問題である [10]．

$$[NCP(F)] \quad F(x) \geq 0, \quad x \geq 0, \quad \langle x, F(x) \rangle = 0$$

ここで，$\langle \cdot, \cdot \rangle$ はベクトルの内積を表す．$F(x) \geq 0, x \geq 0$ という条件のもとで，$\langle x, F(x) \rangle = 0$ が成り立つためには，すべての i に対して，$x_i F_i(x) = 0$ が成立しなければならない，このことより NCP(F) が相補性条件を含む問題であることがわかる．また，F がアフィン関数であるときは線形相補性問題という．非線形相補性問題に定式化される問題には，不等式制約つき非線形最小化問題や，非協力ゲームのナッシュ均衡点を求める問題などがある．

非線形相補性問題については，これまでにその性質について多くの解析がなされ，またこの問題を解くためのさまざまなアルゴリズムが提案されてきた [1]．そのようなアルゴリズムの 1 つに近接点法 (Proximal Point Algorithm, PPA) がある．近接点法は，扱う関数に対する比較的緩い条件のもとで優れた収束性を持つことが理論的に示されており [12, 9]，従来のアルゴリズムに比べて問題をより効率良く解くことが期待されている．ところが，非線形相補性問題に対する近接点法が実装されたという報告はほとんどされておらず，その実用性についてはこれまでよく分かっていない．一方，オペレーションズリサーチの手法を用いて社会的な問題を解決する立場から見ると，アルゴリズムを実装して実用に耐え得るものにすることは重要である．

本報告書では，数値実験を通して近接点法の実用性について考察を行う．そのために，まず近接点法の実用化に際しての課題を指摘する．次に，その考察に基づいてアルゴリズ

ムの実装法を提案する．さらに，いくつかの問題に対して近接点法を用いた数値実験を行い，その実用性に関する性能評価をする．

2　準備

ここでは，本報告書で必要となる数学的な概念を導入する．また非線形相補性問題を等価な方程式系，または最小化問題に再定式化する手法を紹介する．

2.1　数学的概念

この節では, 以下の議論に必要となるいくつかの関数のクラスや B 微分の導入を行う．

定義 1
(a) 関数 F に対して，次の関係式が成り立つとき F は単調であるという．

$$\langle x-y, F(x)-F(y)\rangle \geq 0 \quad \forall x,y \in \Re^n$$

(b) 関数 F に対して，次の関係式が成り立つとき F は係数 $\mu > 0$ の強単調であるという．

$$\langle x-y, F(x)-F(y)\rangle \geq \mu||x-y||^2 \qquad \forall x,y \in \Re^n$$

(c) 関数 F に対して，次の関係式が成り立つとき F は P_0 関数であるという．

$$\max_{i:x_i \neq y_i}(x_i-y_i)(F_i(x)-F_i(y)) \geq 0 \quad \forall x,y \in \Re^n, x \neq y$$

本報告書で考察する近接点法の収束性は F の単調性などと密接な関係がある [10]．また，この定義より明らかに強単調な関数は単調であり，単調な関数は P_0 関数である．

本報告書で扱う NCP(F) に対する近接点法では，次節で導入する NCP(F) と等価な方程式系をニュートン法型の手法で解く．ニュートン法を適用するには, 方程式を表す関数の微分が必要である．しかし，等価な方程式系を構成する関数の多くは微分不可能な関数である．そこで，微分不可能な点に対して微分の概念を拡張した B 微分という概念を導入する．

定義 2 $H:\Re^n \to \Re^m$ を局所リプシッツ連続関数とする．そのとき，次式で定義される $m \times n$ 行列の集合を H の x における B 微分という．

$$\partial_B H(x) := \{\lim_{x^i \in D_H, x^i \to x} H'(x^i)\}$$

ここで D_H は H が微分可能な点の集合である．

ニュートン法では次の反復点を求めるために，扱う関数のヤコビ行列が正則である必要がある．そこで，B 微分の正則性に関連した次の概念を定義する [7]．

定義 3 点 $x^* \in \Re^n$ において，すべての $V \in \partial_B H(x^*)$ が正則行列であるとき, x^* は H に関して BD 正則であるという．

この定義より，H に関して BD 正則である点 x では，どのような $V \in \partial_B H(x)$ をとっても V の逆行列が存在することがわかる．

2.2 非線形相補性問題の再定式化

この節では，ある関数 G に対する非線形相補性問題 NCP(G) を等価な方程式系または最小化問題に再定式化する方法について述べる．

NCP(G) の解 x^* において，各々の i に対して $x_i^* = 0$ または $G_i(x^*) = 0$ が成り立つ．よって，すべての組合せをしらみ潰しに調べれば解が得られるが，この組合せは 2^n 通りあり全ての可能性を列挙していくのは現実的ではない．そこで，NCP(G) を等価な方程式系に再定式化することによって NCP(G) を解くアプローチが，近年活発に研究されている [9, 10, 12].

NCP(G) を等価な方程式系に再定式化するために，次のような性質を持つ関数 $\phi : \Re^2 \to \Re$ を考える．

$$\phi(a,b) = 0 \Longleftrightarrow a \geq 0, b \geq 0, ab = 0$$

このような性質をもつ関数を NCP 関数と呼ぶ．この関数を用いて，$H_G : \Re^n \to \Re^n$ を

$$H_G(x) := \begin{pmatrix} \phi(x_1, G_1(x)) \\ \vdots \\ \phi(x_n, G_n(x)) \end{pmatrix}$$

と定義すれば，NCP(G) は方程式

$$H_G(x) = 0$$

と等価であることがわかる．

NCP 関数としては，例えば

$$\phi(a,b) = \min\{a,b\}$$

$$\phi(a,b) = -ab + \frac{1}{2}\min\{0, a+b\}^2$$

などが考えられるが，ここでは次のような関数 $\phi_{FB} : \Re^2 \to \Re$ を用いる [3].

$$\phi_{FB}(a,b) := a + b - \sqrt{a^2+b^2}$$

この関数は Fischer-Burmeister 関数と呼ばれ，他の NCP 関数に比べ多くの利点があるため，近年よく用いられている [10]．Fischer-Burmeister 関数から定義される H_G は，関数 G が微分可能であればある i に対して $x_i = G_i(x) = 0$ となる点を除いて微分可能である．また，至るところで B 微分可能である．

次に，関数 H_G を用いて，メリット関数 $\Phi_G : \Re^n \to \Re$ を次式で定義する．

$$\Phi_G(x) := \frac{1}{2}||H_G(x)||^2$$

NCP(G) と方程式 (2) は等価であるので，関数 Φ_G は NCP(G) の解において，大域的最小値 0 をとる．よって，NCP(G) は $\Phi_G(x)$ を最小化する問題とも等価である．このメリット関数は反復法においてステップサイズを決めるときや，エラーバウンド性を保証するのに用いられる．また，Φ_G は微分可能な関数である．

3　非線形相補性問題に対する近接点法

この節では，文献 [9, 12] などで提案された近接点法のアルゴリズムおよびその性質を紹介する．

3.1　近接点法の概要

NCP に対する PPA は次のように記述できる．点 $x^k \in \Re^n$ が与えられたとき，問題

$$[NCP(F^k)] \quad F(x^k) \geq 0, \;\; x \geq 0, \;\; \langle x, F^k(x) \rangle = 0$$

の解を x^k に対する近接点 (proximal point) と呼び, $P_k(x^k)$ と表す．ここで，$F^k : \Re^n \to \Re^n$ はパラメータ $c_k > 0$ を用いて

$$F^k(x) := F(x) + c_k(x - x^k)$$

で定義される関数である．NCP(F^k) は正則化項 $c_k(x - x^k)$ があるため，NCP(F) よりも解きやすい問題となっている．PPA は，任意の初期点 x^0 から始めて, 反復公式 $x^{k+1} = P_k(x^k)$ によって近接点の点列 $\{x^k\}$ を生成していく反復法である．このとき c_k の値が大きくなると部分問題 NCP(F^k) は解きやすくなるが，F と F^k の差が大きくなるため，NCP(F^k) は元の問題 NCP(F) からかけ離れた問題になる．一方 c_k が 0 に近くなると，部分問題は扱いにくくなるがもとの問題に近くなる．したがって，PPA の収束特性はパラメータ c_k の更新の方法に大きく依存する．このことは，超一次収束性などの理論的証明において顕著である．なお，5 節において数値実験によりこの依存性を確かめている．

各反復において，近接点を正確に求めることは容易ではないが, Rockafellar[8] は，近接点を正確に求めなくても, 点列 $\{x^k\}$ が NCP(F) の解に収束するためのある近似基準を提案した．

近似基準 1:

$$||x^{k+1} - P_k(x^k)|| \leq \delta_k \min\{1, ||x^{k+1} - x^k||\}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \delta_k < \infty, \delta_k \geq 0 (k = 0, 1, \cdots)$$

近接点法では

1. 部分問題の正確な解が分からない状態で近似基準 1 を満たしているかをどのように判断するか
2. 部分問題をどう解くか

が重要な問題となる．前者については，次の補題が示すエラーバウンド性を用いることにより，解決することが可能である．

補題 1 *[エラーバウンド性][6]*
F が単調かつ，係数 $L>0$ のリプシッツ連続関数であれば，$||H_{F^k}(x)||$ は *NCP(F^k)* に対する大域的エラーバウンドを与える．つまり，

$$||x - P_k(x^k)|| \leq \frac{B(L+1)}{c_k}||H_{F^k}(x)|| \quad \forall x \in \Re^n$$

が成り立つ．ここで，B は F^k に依存しない正の定数である． □

後者の部分問題の解法については次節で考察する．

3.2 部分問題の解法

この節では，NCP(F) において PPA によって生成される部分問題 NCP(F^k) を解く方法について説明する．部分問題を解くのには De Luca, Facchinei, Kanzow[1] によって提案された一般化ニュートン法 (Generalized Newton method) を用いる．以下に，そのアルゴリズムを示す．

手続き GN (NCP(F^k) に対する一般化ニュートン法)

Step 1: パラメータ $\beta \in (0, \frac{1}{2}), p > 2$ および $\rho \in (0,1)$ を選ぶ．$y^0 := x^k$, $j := 0$ とする．

Step 2: もし y^j が NCP(F^k) の近似解であれば終了する．

Step 3: 行列 $V_j \in \partial_B H_{F^k}(y^j)$ を選び, ニュートン方程式

$$V_j d = -H_{F^k}(y^j)$$

を解いて探索方向 d^j を決める．もし,

$$\langle d^j, \nabla\Phi_{F^k}(y^j)\rangle \leq -\rho||d^j||^p$$

が成り立たないならば,

$$d^j = -\nabla\Phi(y^j)$$

とする．

Step 4: もし $y^j + d^j$ が NCP(F^k) の近似解であれば終了し, そうでなければ，以下の式を満たすもっとも小さい非負整数 i を求め, それを i_j とおく．

$$\Phi_{F^k}(y^j + 2^{-i}d^j) - \Phi_{F^k}(y^j) \leq \beta 2^{-i}\langle d^j, \nabla\Phi_{F^k}(y^j)\rangle$$

Step 5: $y^{j+1} := 2^{-i_j}d^j, j := j+1$ として，Step 2 へ.

ここで，手続き GN に対し次の定理が成立している [1].

定理 1 手続き *GN* で生成される点列の任意の集積点は関数 Φ_{F^k} の停留点である．

また，近接点法で定義される F^k および F^k から定義される H_{F^k}, Φ_{F^k} に対し，次の補題が成立する [1, 9, 12].

補題 2

(a) F が P_0 関数であれば，任意の $x \in \Re^n$ において，全ての $V \in \partial_B H_{F^k}(x)$ は正則行列である.

(b) F が P_0 関数であれば，$\lim_{||x|| \to \infty} \Phi_{F^k}(x) = \infty$ が成り立つ.

(c) F が P_0 関数のとき，関数 Φ_{F^k} の停留点は *NCP(*F^k*)* の解である.

この補題と定理 1 により，F が P_0 関数ならば手続き GN で生成される点列は NCP(F^k) の解に収束することがわかる．よって，手続き GN は有限回の反復で終了する.

3.3 アルゴリズム PP

この節では，NCP(F) に対する PPA のアルゴリズムを紹介する．文献 [9, 12] で提案されたアルゴリズムは以下のように記述される.

アルゴリズム PP

Step 1: パラメータ $\alpha \in (0,1)$，$c_0 \in (0,1)$ と初期点 $x^0 \in \Re^n$ を選ぶ．$k := 0$ とする.

Step 2: もし x^k が NCP(F) の近似解であれば, 終了する.

Step 3: 関数 $F^k : \Re^n \to \Re^n$ を

$$F^k(x) := F(x) + c_k(x - x^k)$$

で定義し, 次の条件を満たす NCP(F^k) の近似解 x^{k+1} を手続き GN を用いて求める.

$$||H_{F^k}(x^{k+1})|| \le \alpha^k \min\{1, ||x^k - x^{k+1}||\} \tag{1}$$

ここで，α^k は α の k 乗をあらわす.

Step 4: c_{k+1} を更新し, $k := k + 1$ として，Step 2 へ.

Step 3 の条件 1 は，近似基準 1 を保証するための条件であり，$||H_F^k(x)||$ が NCP(F^k) に対するエラーバウンドを与えるときには，この条件は近似基準 1 と等価な条件となる.

アルゴリズム PP の大域的収束性に関しては, 次のような定理が成り立つ [9, 12].

定理 2 *[大域的収束性]*

(a) 関数 F は単調かつリプシッツ連続であり, $\{c_k\}$ は有界であるとする．*NCP(F)* が少なくとも一つの解を持てば，アルゴリズム *PP* によって生成される点列 $\{x^k\}$ は, *NCP(F)* のある解に収束する.

(b) F が P_0 関数であり，*NCP(F)* の解集合は空でなく有界であるとする．このとき，アルゴリズム *PP* によって生成される点列 $\{x^k\}$ に対して，$c_k x^k \to 0$ が成り立てば $\{x_k\}$ は有界となりその任意の集積点は *NCP(F)* の解である． □

アルゴリズム PP の収束の速さについて以下の定理が成り立っている [9, 12].

定理 3 *[超一次収束性]*
$c_k \to 0$ とする．このとき，以下のことが成り立つ．

(a) 関数 F が単調でアルゴリズム *PP* によって生成される点列 $\{x^k\}$ は *NCP(F)* の解 x^* に収束するとする．このとき，$||H_F(x)||$ が x^* の近傍で *NCP(F)* に対する局所的エラーバウンドを与えるならば，数列 $\{dist(x^k, \overline{X})\}$ は 0 に超一次収束する．ここで，$\overline{X}$ は *NCP(F)* の解集合である．

(b) アルゴリズム *PP* によって生成される点列 $\{x^k\}$ の集積点の一つ x^* が H_F に関して *BD* 正則であれば，点列 $\{x^k\}$ は x^* に超一次収束する． □

また，部分問題を解く速さに関して次の定理が成立している [10].

定理 4 F が P_0 関数であり，アルゴリズム *PP* で生成される点列は *NCP(F)* のある解 x^* に収束するとする．このとき，x^* が H_F に関して *BD* 正則であり $c_k = O(||x^k - P_k(x^k)||)$ であるならば，十分大きい k に対して，*NCP(F^k)* に対する一般化ニュートン法の一回の反復で得た点はアルゴリズム *PP* の *Step3* の条件 *(1)* を満たす． □

定理 4 の条件を満たす c_k の更新規則としては

$$c_k := \min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\} \tag{2}$$

が考えられる．

よって，アルゴリズム PP は F が単調であるか解集合が有界な P_0 関数であれば解に超一次収束するという優れた性質を持つことがわかる．一方，このアルゴリズムには理論的に優れた性質を持つということだけでなく実用上優れた性質を持つことも求められ，この観点からアルゴリズムの実装は非常に重要である．次節ではアルゴリズムの実装法について考察する．

4 近接点法の実装上の問題点とその解決法

4.1 近接点法の実装上の問題点

アルゴリズム PP が理論的に優れた性質を持つことはすでに述べた．一方，このアルゴリズムに対して実装上の課題として次の点があげられる．

- アルゴリズム PP では反復の初期の段階において，部分問題を解くために手続き GN の反復数が多くなることが予想される．これは，条件 (1) において初期点 x^0 の情報が用いられておらず，一般に手続き GN の終了条件が厳しくなりすぎてしまうからである．

- 一般には F が P_0 関数でないような NCP(F) も多いが，このようなときに手続き GN で条件 (1) を満たす点を見つけることができず，アルゴリズム PP が終了しないという事態が起こり得ることがわかる．

そこで，次節では上記の課題を克服する手法を与える．

4.2　改良 1

前節でも触れたようにアルゴリズム PP では，反復の初期段階で部分問題に対する手続き GN の反復数が多くなることが予想される．そこで，理論的に解への大域的収束性や超一次収束性が保たれる範囲で近似条件を緩和することを提案する．

まず，条件 (1) の代わりに次の条件を考える．

$$||H_{F^k}(x^{k+1})|| \leq M_k \alpha^k \min\{1, ||x^k - x^{k+1}||\} \tag{3}$$

ここで，α^k は α の k 乗をあらわす．また，M_k はある正の定数 b_1, b_2 に対して $b_1 < M_k < b_2$ を満たすパラメータである．

以下に，この条件を取り入れたアルゴリズム PP2 を示す．

アルゴリズム PP2

Step 1: パラメータ $\alpha \in (0,1), c_0 \in (0,1)$ と初期点 $x^0 \in \Re^n$ を選ぶ．また，$k := 0$ とし，定数 $M_0 ge 0$ を選ぶ．

Step 2: もし x^k が NCP(F) の近似解であれば, 終了する．

Step 3: 関数 $F^k : \Re^n \to \Re^n$ を

$$F^k(x) := F(x) + c_k(x - x^k)$$

で定義し, 次の条件を満たす NCP(F^k) の近似解 x^{k+1} を一般化ニュートン法を用いて求める．

$$||H_{F^k}(x^{k+1})|| \leq M_k \alpha^k \min\{1, ||x^k - x^{k+1}||\}$$

Step 4: c_{k+1}, M_{k+1} を更新し, $k := k+1$ として，Step 2 へ．

アルゴリズム PP2 に対しても，定理 2，定理 3，定理 4 が成立することが示せる．

また，定数 M_k の選び方としては,

$$M_k := \frac{||H_{F^0}(\tilde{x})||}{\min\{1, ||x^0 - \tilde{x}||\}} \qquad (k = 0, 1, \cdots)$$

などが考えられる．ここで，$\tilde{x}$ は NCP(F^0) に対して, 一般化ニュートン法による反復を 1 回適用して得られる点である．なお，このように定義された M_k は k に依存しない定数である．こうすることによって，初期の段階において一般化ニュートン法による反復数を少なくすることができる．

4.3　改良 2

F が P_0 関数でないような場合には，アルゴリズム PP およびアルゴリズム PP2 は必ずしも NCP(F) の解に収束するとは限らない．実際に，手続き GN において部分問題の解でないような停留点に収束してしまうことがしばしばある．このような場合，手続き GN で生成される点列は終了条件 (1) を満たすことができず，手続き GN は無限ループに陥ってしまう．

そこで，終了条件 (1) を次の条件に置き換えることを提案する．

$$||\nabla\Phi_{F^k}(x^{k+1})|| \le M\gamma^k \min\{1, ||x^k - x^{k+1}||\} \tag{4}$$

ここで，$\gamma \in (0,1)$ は定数である．こうすることによって Φ_{F^k} の停留点の十分近くの点において，手続き GN は終了条件を満たすことができる．

このような変更によって，一般には近接点法の NCP(F) の解への大域的収束性は理論的な保証ができなくなる．しかしながら，F が単調な場合は以下に示すように大域的収束性を保証することができる．

定理 5 *F が単調な関数で NCP(F) が少なくとも 1 つの解を持ち，全ての k に対して $\gamma^k \le \alpha^k c_k$ を満たす定数 $\gamma \in (0,1)$ が存在するとする．このとき，条件 (4) を部分問題の終了条件として用いたアルゴリズム PP2 は NCP(F) のある解に収束する．* □

証明 V_k を $\partial_B H_{F_k}(x^k)$ の任意の要素とする．ここで，F が単調な関数であれば，次の不等式が成り立つような正の定数 C が存在する [10].

$$||V_k^{-1}|| \le \frac{C}{c_k}$$

これより，条件 (4) が満たされるとき，

$$\begin{aligned} ||H_{F^k}(x^{k+1})|| &\le ||V_k^{-1}||||V_k^T H_{F^k}(x^{k+1})|| \\ &\le \frac{C}{c_k}||\nabla\Phi_{F^k}(x^{k+1})|| \\ &\le \frac{CM_k}{c_k}\gamma^k \min\{1, ||x^k - x^{k+1}||\} \\ &\le CM_k\alpha^k \min\{1, ||x^k - x^{k+1}||\} \end{aligned}$$

となり，条件 (3) が成り立つ．したがって，この定理が成立することが分かる． □

F が単調でない場合には，一般に NCP(F) の解に収束することは望めないが，手続き GN の終了条件を変更したことにより，少なくともアルゴリズムが有限回の反復で終了することは保証できる．なお，これ以降アルゴリズム PP2 において Step 3 の終了条件 (3) を (4) で置き換えたアルゴリズムをアルゴリズム PP3 と呼ぶこととする．

5　数値実験

3 節では，近接点法について説明し，この方法が理論的に優れた性質を持つことを紹介した．また 4 節では，近接点法を実装する際の課題を指摘し，その解決法を提案した．こ

こでは，本報告書で紹介または提案したアルゴリズムを用いていくつかの問題に対し数値実験を行い，その性能について評価する．

5.1 実験内容

本報告における実験では，7つのテスト問題を扱った．プログラムはc言語でコーディングし，サンマイクロシステム社のSun sparc 60上で実験を行なった．

本実験では，以下の項目について比較した．

- 正則化パラメータ c_k の更新規則によるアルゴリズムPPの収束速度の変化
- アルゴリズムの違いによる収束速度の変化

手続きGNのStep3において $V_j \in \partial_B H_{F^k}(y^j)$ を計算する必要があるが，これまでその具体的な計算法には触れなかった．ここでは，その計算法について説明する．$V_j \in \partial_B H_{F^k}(y^j)$ は次のような形になる [1].

$$V_j = D_a + D_b \nabla F^k(x)^T$$

ただし，D_a, D_b は対角成分が，

$$((D_a)_{ii}, (D_b)_{ii}) = \begin{cases} \left(1 - \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + F_i^k(x)^2}}, 1 - \frac{F_i^k(x)}{\sqrt{x_i^2 + F_i^k(x)^2}}\right) & \text{if} \quad (x_i, F_i^k(x)) \neq (0,0) \\ (1-\eta_i, 1-\xi_i) & \text{otherwise} \end{cases}$$

で与えられる対角行列であり，(η_i, ξ_i) は $\eta_i^2 + \xi_i^2 = 1$ を満たす点であり，次の計算法によって求めることができる [1].

(η_i, ξ_i) の計算法

Step 1: $D := \{i | x_i = F_i^k(x) = 0\}$ とおく．

Step 2: $i \in D$ となるすべての i に対して $z_i \neq 0$ となる $z \in \Re^n$ をとる．

Step 3: $i \in D$ に対して，

$$(\eta_i, \xi_i) = \left(\frac{z_i}{\sqrt{z_i^2 + (\nabla F_i^k(x)^T z)^2}}, \frac{\nabla F_i^k(x)^T z}{\sqrt{z_i^2 + (\nabla F_i^k(x)^T z)^2}}\right)$$

とする．

各実験において，初期点の各成分は $[0, 100]$ の一様乱数で生成した．各実験で比較検討するアルゴリズムに対して，100回初期点を生成し，そのアルゴリズムが終了条件を満たすまでに解いたニュートン方程式の回数を測定した．各アルゴリズムの終了条件は $||\nabla \Phi_F(x)||^2 < 10^{-8}$ とし，各アルゴリズムに共通するパラメータは $\alpha = 0.8, \beta = 0.01, \rho = 10^{-8}, p = 2.4$ に固定した．各アルゴリズムに対して，反復回数の上限は200回とし，反復がこの上限に達した場合は解は得られなかったものとして直ちに終了した．同様に，手続きGNに対しても反復回数の上限を200回と定めた．

次に，本実験で用いた問題の説明をする．

問題 1 線形相補性問題 $F(x) = Mx + q$. ここで，$x \in \Re^{100}$ であり，

$$M = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 4 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 4 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

である．また q の第 i 成分はは $q_i = \sin \frac{\pi}{2} i$ である．この問題は単調な LCP となる．

問題 2 線形相補性問題 $F(x) = Mx + q$. ここで，M は

$$P_0 = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}, \quad Q_0 = (5)$$

$$P_{k+1} = \begin{pmatrix} P_k & -A_k^T \\ A_k & Q_k \end{pmatrix}, \quad Q_{k+1} = \begin{pmatrix} Q_k & -B_k^T & -C_k^T \\ B_k & P_k & O \\ C_k & O & Q_k \end{pmatrix}, \quad (k = 1, 2, \cdots)$$

$$A_k = \begin{pmatrix} -3 & \cdots & -3 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -3 & \cdots & -3 \end{pmatrix}, \quad B_k = \begin{pmatrix} -1 & \cdots & -1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & \cdots & -1 \end{pmatrix}, \quad C_k = \begin{pmatrix} 4 & \cdots & 4 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 4 & \cdots & 4 \end{pmatrix}$$

としたときに，$M = P_5 \in \Re^{123 \times 123}$ となるような行列である．また，q の第 i 成分は，$q_i = (-1)^n i$ である．一般に行列 X, Y, Z に対して X, Y が半正定値ならば，行列

$$\begin{pmatrix} X & -Z^T \\ Z & Y \end{pmatrix}$$

も半正定値となる．したがって，この問題において M は半正定値であり，この問題は単調な LCP となる．

問題 3 線形相補性問題 $F(x) = Mx + q$. ここで，M は $M = A^T A$ と表され，$A \in \Re^{50 \times 100}$ の各成分は $[0, 1]$ の一様乱数である．このとき M はランクが落ちるので半正定値であるが正定値ではない．また，q の各要素は $[-1, 1]$ の一様乱数である．このとき，問題 3 は単調な LCP となる．

問題 4 非線形相補性問題 [11]

$$F(x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_1^3 \\ x_2^3 \\ 2x_3^3 \\ 2x_4^3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -8 \\ 3 \\ -3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

この問題において，関数 F は単調である．また解は $x = (2, 0, 1, 0)$ であり，x_2, x_4 は退化している．ここで，解が退化しているとは，ある i に対して $x_i = F_i(x) = 0$ が成り立つことをいう．

問題 5 線形相補性問題

$$F(x) = Mx + q$$

ただし，$M \in \Re^{10\times 10}, q \in \Re^{10}$ はそれぞれ次のように与えられる．

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -4 & \cdots & -4 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -4 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad q = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

この問題の解は $x = (60096, 12019, 2404, 481, 96, 19, 4, 1, 0, 0)^T$ である．また，F は P_0 関数である．

問題 6 非線形相補性問題 [5]

$$F(x) = \begin{pmatrix} 3x_1^2 + 2x_1x_2 + 2x_2^2 + x_3 + 3x_4 - 6 \\ 2x_1^2 + x_2^2 + x_1 + 10x_3 + 2x_4 - 2 \\ 3x_1^2 + x_1x_2 + 2x_2^2 + 2x_3 + 9x_4 - 9 \\ x_1^2 + 3x_2^2 + 2x_3 + 3x_4 - 3 \end{pmatrix}$$

これは，Kojima-Shindo の問題と呼ばれ，解は

$$x^1 = (\frac{\sqrt{6}}{2}, 0, 0, 5), \quad x^2 = (1, 0, 3, 0)$$

の 2 点である．この問題の関数 F は，単調な関数でも P_0 関数でもない．

問題 7 非線形相補性問題

$$F(x) = \begin{pmatrix} F_1(x) \\ \vdots \\ F_n(x) \end{pmatrix}$$

ここで，

$$F_i(x) = \nabla C_i(x_i) - p(\xi) - x_i \nabla p(\xi) \geq 0, \quad (i = 1, \cdots, n)$$

また，

$$p(\xi) = 5000^{\frac{1}{\gamma}} \xi^{-\frac{1}{\gamma}}$$

$$C_i(x_i) = c_i x_i + \frac{\beta_i}{1+\beta_i} L_i^{\beta_i} x_i^{\frac{\beta_i+1}{\beta_i}}$$

$$\xi = \sum_{i=1}^{n} x_i$$

である．この問題は非協力ゲームのナッシュ均衡点を求める問題を定式化した際に現れる．また，本実験では各パラメータは次のように設定した．

$$n = 10, \quad \gamma = 1.2$$

$$c = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 8 \\ 5 \\ 1 \\ 3 \\ 7 \\ 4 \\ 6 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} 10 \\ 10 \\ 10 \\ 10 \\ 10 \\ 10 \\ 10 \\ 10 \\ 10 \\ 10 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1.2 \\ 1 \\ 0.9 \\ 0.6 \\ 1.5 \\ 1 \\ 0.7 \\ 1.1 \\ 0.95 \\ 0.75 \end{pmatrix}$$

この問題は，MCPLIB に nash.gms という名前の GAMS ファイルとして登録されている [2].

5.1.1 実験 1

実験 1 では正則化パラメータ c_k の更新規則によって，アルゴリズム PP の反復回数がどのように変化するかを調べた．ここで，比較した更新規則は以下のものである．

- $c_k = \min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$
- $c_k = \alpha^k$
- $c_k = \min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)^2\}$
- $c_k = \min\{\alpha^k, \sqrt{\Phi_F(x^k)}\}$
- $c_k = \alpha^k \min\{1, \frac{1}{||x^k||}\}$

ここで，α はアルゴリズム PP の Step 3 で用いられる α と同じものである．

5.1.2 実験 2

実験 2 ではアルゴリズムによって，反復回数がどのように変化するかを調べた．ここでは次のアルゴリズムを比較した．また，実験 2 においては c_k の更新規則は $c_k = \min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$ を用いた．

- アルゴリズム PP
- アルゴリズム PP2

- アルゴリズム PP3
- 一般化ニュートン法

ここで，一般化ニュートン法は [1] で提案されているアルゴリズムで，NCP(F) を方程式 $H_F(x) = 0$ に再定式化した後，それに直接一般化ニュートン法を適用するアルゴリズムである．

5.2 実験結果

実験 1 および実験 2 の結果を表 1，表 2 に示す．

なお，表中の数字はニュートン方定式を解いた回数，括弧内は近接点法の反復数を示している．また，求解率は解が得られた割合を % で表している．ただし，ここで解が得られなかったものとして扱っているものには反復があらかじめ指定していた回数を越えたものも含まれている．また，Best, Worst, Mean はそれぞれ 100 回計算を行った中での最小反復回数，最大反復回数，平均反復回数を示している．なお，ここでは規定回数で解が得られなかったものは除外している．

実験 1 の結果を見ると，パラメータ c_k の更新については $c_k = \alpha^k \min\{1, \frac{1}{\|x^k\|}\}$ が他の規則と比べて多少良い収束性を持つことが分かる．しかし，問題 5 のようにこの更新規則を用いるとほとんど解が得られなくなってしまう例もある．他の 4 つの更新規則についてはあまり差が認められなかったが，理論的な収束性なども考慮に入れると $c_k = \min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$ を用いるのが妥当だといえる．

次に，実験 2 の結果について考察する．まず，アルゴリズム PP とアルゴリズム PP2 を比較する．表 2 より，アルゴリズム PP2 のニュートン方程式を解いた回数は，ほとんどの問題に対してアルゴリズム PP の回数の半分から 3 分の 1 であることがわかる．これは，アルゴリズム PP2 が緩和された近似条件を用いているため，近接点法の初期の反復における手続き GN の反復回数がアルゴリズム PP と比較して少なくすむためである．ただし，問題 7 のような例外も見受けられる．次に，アルゴリズム PP2 とアルゴリズム PP3 を比較すると，今回の実験ではアルゴリズム PP2 とアルゴリズム PP3 の大きな差異は確認できなかった．最後に，一般化ニュートン法と近接点法の比較を行う．ほとんどの問題に対して，一般化ニュートン法の反復回数はアルゴリズム PP の反復回数よりより少くアルゴリズム PP2 と同じくらいである．こうしてみると，一見近接点法にはメリットが無いように感じられるが，問題 5 の結果から分かるように一般化ニュートン法で解けないような条件の悪い問題に対しても近接点法は安定した収束性を保っている．

6 結論

本報告書では，非線形相補性問題に対する近接点法の実装上の課題を指摘し，その解決策を示した．また，いくつかの具体的な問題に対して数値実験を行った．数値実験の結果から，アルゴリズムにいくつかの工夫を加えることで効率良く解が得られることが分かった．

しかし，近接点法ではパラメータの値や問題によって反復回数が非常に多くなるなどの不安定要因もあり，今後より厳密な解析を行う必要がある．また，今回実装したプログラ

表 1: c_k の更新規則による反復回数の変化

問題	更新規則	求解率 (%)	Best	Worst	Mean
1	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$	100	22(8)	26(8)	24.45(8.00)
1	α^k	100	23(9)	27(9)	25.45(9.00)
1	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)^2\}$	100	22(8)	26(8)	24.45(8.00)
1	$\min\{\alpha^k, \sqrt{\Phi_F(x^k)}\}$	100	22(8)	26(8)	24.45(8.00)
1	$\alpha^k \min\{1, \frac{1}{\|x^k\|}\}$	100	12(6)	14(6)	12.70(6.01)
2	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$	100	23(7)	41(7)	28.89(7.02)
2	α^k	100	25(9)	43(9)	30.85(9.00)
2	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)^2\}$	100	22(6)	41(7)	28.86(6.98)
2	$\min\{\alpha^k, \sqrt{\Phi_F(x^k)}\}$	100	23(7)	41(7)	28.95(7.10)
2	$\alpha^k \min\{1, \frac{1}{\|x^k\|}\}$	100	20(5)	39(6)	25.83(5.75)
3	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$	100	26(7)	41(11)	33.52(8.33)
3	α^k	100	28(9)	39(9)	33.80(8.89)
3	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)^2\}$	100	26(7)	41(11)	33.53(8.35)
3	$\min\{\alpha^k, \sqrt{\Phi_F(x^k)}\}$	100	26(7)	41(11)	33.47(8.45)
3	$\alpha^k \min\{1, \frac{1}{\|x^k\|}\}$	100	28(9)	39(9)	33.76(8.90)
4	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$	100	12(5)	19(5)	16.10(5.05)
4	α^k	100	14(7)	21(7)	18.05(6.99)
4	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)^2\}$	100	12(5)	19(5)	16.15(5.11)
4	$\min\{\alpha^k, \sqrt{\Phi_F(x^k)}\}$	100	12(5)	20(6)	16.27(5.21)
4	$\alpha^k \min\{1, \frac{1}{\|x^k\|}\}$	100	12(6)	19(6)	15.81(5.97)
5	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$	100	45(17)	79(18)	64.71(17.92)
5	α^k	100	46(18)	81(20)	65.85(19.06)
5	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)^2\}$	100	44(16)	79(18)	64.16(17.37)
5	$\min\{\alpha^k, \sqrt{\Phi_F(x^k)}\}$	100	46(18)	80(19)	65.43(18.64)
5	$\alpha^k \min\{1, \frac{1}{\|x^k\|}\}$	6	13(4)	15(4)	13.83(4.00)
6	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$	58	13(6)	196(7)	25.83(6.76)
6	α^k	54	18(8)	147(8)	30.61(9.61)
6	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)^2\}$	58	13(6)	81(7)	22.50(6.62)
6	$\min\{\alpha^k, \sqrt{\Phi_F(x^k)}\}$	58	14(7)	108(6)	24.76(7.22)
6	$\alpha^k \min\{1, \frac{1}{\|x^k\|}\}$	55	15(7)	83(8)	22.36(7.51)
7	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)\}$	99	30(6)	44(8)	36.97(7.35)
7	α^k	99	26(7)	38(8)	32.44(7.59)
7	$\min\{\alpha^k, \Phi_F(x^k)^2\}$	99	27(6)	45(8)	36.81(7.26)
7	$\min\{\alpha^k, \sqrt{\Phi_F(x^k)}\}$	99	27(6)	42(8)	33.93(6.79)
7	$\alpha^k \min\{1, \frac{1}{\|x^k\|}\}$	99	23(4)	38(6)	30.48(5.93)

表 2: アルゴリズムによる反復回数の変化

問題	アルゴリズム	求解率 (%)	正解率 (%)	Best	Worst	Mean
1	アルゴリズム PP	100	100	26(8)	27(8)	26.77(8.00)
1	アルゴリズム PP2	100	100	9(9)	9(9)	9.00(9.00)
1	アルゴリズム PP3	100	100	8(8)	10(10)	8.32(8.32)
1	一般化ニュートン法	100	100	6(6)	6(6)	6.00(6.00)
2	アルゴリズム PP	100	100	24(8)	37(8)	28.45(7.33)
2	アルゴリズム PP2	100	100	10(10)	19(18)	13.03(12.98)
2	アルゴリズム PP3	100	100	11(10)	21(9)	14.12(11.18)
2	一般化ニュートン法	100	100	10(10)	18(18)	14.74(14.74)
3	アルゴリズム PP	100	100	40(8)	58(7)	47.91(7.73)
3	アルゴリズム PP2	100	100	8(8)	14(11)	10.14(9.65)
3	アルゴリズム PP3	100	100	8(8)	13(13)	10.11(10.11)
3	一般化ニュートン法	100	100	10(10)	16(16)	12.54(12.54)
4	アルゴリズム PP	100	100	14(5)	25(6)	20.11(5.83)
4	アルゴリズム PP2	100	100	6(6)	9(9)	8.84(8.84)
4	アルゴリズム PP3	100	100	6(6)	19(19)	18.63(18.63)
4	一般化ニュートン法	100	100	6(6)	9(9)	8.18(8.18)
5	アルゴリズム PP	100	100	46(17)	66(18)	56.21(17.96)
5	アルゴリズム PP2	100	100	24(17)	38(18)	33.20(17.76)
5	アルゴリズム PP3	100	100	19(16)	34(18)	29.42(17.79)
5	一般化ニュートン法	2	2	11(11)	16(16)	13.50(13.50)
6	アルゴリズム PP	43	43	16(6)	65(6)	28.00(7.47)
6	アルゴリズム PP2	72	72	5(5)	31(16)	8.46(7.88)
6	アルゴリズム PP3	76	76	5(5)	148(29)	18.74(13.82)
6	一般化ニュートン法	95	95	7(7)	13(13)	7.77(7.77)
7	アルゴリズム PP	99	99	31(7)	53(8)	40.90(7.60)
7	アルゴリズム PP2	99	99	49(41)	65(53)	56.84(47.95)
7	アルゴリズム PP3	99	99	67(58)	84(67)	73.64(63.49)
7	一般化ニュートン法	99	99	16(16)	26(26)	21.08(21.08)

ムでは一般的な問題に対してはあまり有効とは言えなかったので，これに関してももっと工夫をする必要がある．さらに，非線形相補性問題に対する他のアルゴリズムと比較なども行う必要がある．

謝 辞

日頃から御教授頂き, 本研究に対しても熱心な御指導を賜った福嶋雅夫教授, ならびに本報告書作成にあたり細部に至るまで貴重な御指摘と御指導を頂いた山下信雄助手に深く感謝の意を表します. また, 大変お世話になった滝根哲哉助教授をはじめとする福嶋研究室の皆様に厚く御礼申し上げます.

参考文献

[1] De Luca, T., Facchinei, F., and Kanzow, C., A semismooth equation approach to the solution of nonlinear complementarity problems, Mathematical Programming, 75 (1996), 407-439.

[2] Dirkse, S. P., and Ferris, M. C., MCPLIB: A collection of nonlinear mixed complementarity problems, Computer Sciences Department, University of Wisconsin, Wisconsin 53706, 1994.

[3] Fischer, A., A special Newton-type optimization method, Optimization, 24 (1992), 269-284

[4] 福島雅夫，均衡制約をもつ数理計画問題 (MPEC), 離散構造とアルゴリズム VI, 5 章, 171-215.

[5] Kojima, M., and Shindo, S., Extensions of Newton and quasi-Newton methods to systems of PC^1 equations, Journal of Operations Research Society of Japan, 29: (1986), 352-374.

[6] Pang, J.-S., Error bounds in mathematical programming, Mathematical Programming, 79 (1997), 299-332.

[7] Qi, L., Convergence analysis of some algorithms for solving nonsmooth equations, Mathematics of Operations Research, 18 (1993), 227-244.

[8] Rockafellar, R. T., Monotone operators and the proximal point algorithm, SIAM Journal on Control and Optimization, 14 (1976), 877-898.

[9] Yamashita, N., Imai, J., and Fukushima, M., The proximal point algorithm for the P_0 complementarity problem, Applications and Algorithms of Complementarity, M.C. Ferris, O.L. Mangasarian and J.-S. Pang (eds.), Kluwer Academic Publishers, to appear.

[10] 山下信雄，福島雅夫，非線形相補性問題に対する近接点法,「応用数理」掲載予定.

[11] Yamashita, N., and Fukushima, M., Modified Newton methods for solving a semismooth reformulation of monotone complementarity problems, Mathematical Programming, 76 (1997), 469-491

[12] Yamashita, N., and Fukushima, M., The proximal point algorithm with genuine superlinear convergence for the monotone complementarity problem, SIAM Journal on Optimization, to appear.