

2 次錐相補性問題に対する平滑化 Fischer-Burmeister 関数のヤコビ行列の適合性について

東京理科大学 数理情報科学科 成島 康史
東京理科大学 数理情報科学科 小笠原 英穂
愛知大学 経営総合科学研究所 相良 信子

1 はじめに

本稿では以下の 2 次錐相補性問題 (Second-Order Cone Complementarity Problem, SOCCP) を取り扱う:

$$\begin{aligned} &\text{Find } (x, y, p) \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^\ell \text{ such that} \\ &x \in \mathcal{K}, \quad y \in \mathcal{K}, \quad \langle x, y \rangle = 0, \quad F(x, y, p) = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

ここで, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は Euclid 空間における通常の内積を表し, $F: \mathbf{R}^{2n+\ell} \rightarrow \mathbf{R}^{n+\ell}$ は連続微分可能な関数とする. また, \mathcal{K} は直積 $\mathcal{K} = \mathcal{K}^{n_1} \times \mathcal{K}^{n_2} \times \cdots \times \mathcal{K}^{n_m}$ ($n_1 + \cdots + n_m = n$) により定義された凸錐とする. 各 \mathcal{K}^{n_i} は $\mathcal{K}^{n_i} := \{(z_1, z_2) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^{n_i-1} \mid z_1 \geq \|z_2\|\}$ で定義される自己双対な閉凸錐で, n_i 次の 2 次錐 (SOC) と呼ばれる. ただし $\|\cdot\|$ は 2-ノルムを表す. 特に, $\mathcal{K}^1 = \mathbf{R}_+ = \{z \mid z \geq 0\}$ であり, $n_1 = n_2 = \cdots = n_m = 1$ の場合, $\mathcal{K} = \mathbf{R}_+^n$, すなわち非負象限となる. したがって $n_1 = n_2 = \cdots = n_m = 1$ のときには, SOCCP は

$$x \geq 0, \quad y \geq 0, \quad \langle x, y \rangle = 0, \quad F(x, y, p) = 0$$

という形の混合相補性問題に帰着し, さらに $\ell = 0$ で, $F(x, y, p) = f(x) - y$ ($f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$) のとき, よく知られた非線形相補性問題 (NCP)

$$x \geq 0, \quad y \geq 0, \quad \langle x, y \rangle = 0, \quad y = f(x)$$

に帰着する.

SOCCP は NCP と同様に, 等価な非線形方程式系として再定式化されることが知られており, それを用いた数値解法がいくつか提案されている [1, 3]. 本稿では, SOCCP に対する平滑化 Fischer-Burmeister 関数により構成される非線形方程式系の性質を考察し, 特にそのヤコビ行列の適合性について述べる.

以降では簡単のために, $\mathcal{K} = \mathcal{K}^n$ で説明するが, 一般の場合も同様に扱うことができる.

2 SOC C-関数による再定式化

はじめに, 以下での説明で必要となる SOC に関連するジョルダン代数を簡単に述べておく. 任意の $x = (x_1, x_2), y = (y_1, y_2) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^{n-1}$ に対して, ジョルダン積は $x \cdot y =$

$(x^T y, y_1 x_2 + x_1 y_2)$ で定義される. $x \cdot x = x^2$ と書き, $x \in \mathcal{K}^n$ に対して, その平方根 $x^{1/2}$ を

$$x^{1/2} = \begin{cases} \left(\varsigma, \frac{x_2}{2\varsigma} \right), \varsigma = \sqrt{\frac{1}{2} \left(x_1 + \sqrt{x_1^2 - \|x_2\|^2} \right)} & (x \neq 0 \text{ のとき}) \\ 0 & (x = 0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

によって定義する. ここで, $(x^{1/2})^2 = x^{1/2} \cdot x^{1/2} = x$ であることを注意しておく. さらに, $x = (x_1, x_2) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^{n-1}$ に対して, 次のように定義される n 次対称行列 L_x を Arrow 行列と呼ぶ:

$$L_x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2^T \\ x_2 & x_1 I \end{bmatrix}.$$

特に, $x \in \text{int } \mathcal{K}^n$ と L_x が正定値であることは等価である. 任意の $x = (x_1, x_2) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^{n-1}$ は, $x = \lambda_1 u^{(1)} + \lambda_2 u^{(2)}$ と分解される. ただし, λ_1, λ_2 と $u^{(1)}, u^{(2)}$ はそれぞれ x の固有値, 固有ベクトルと呼ばれ,

$$\lambda_i = x_1 + (-1)^i \|x_2\|, \\ u^{(i)} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1, (-1)^i \frac{x_2}{\|x_2\|} \right) & (x_2 \neq 0 \text{ のとき}) \\ \frac{1}{2} (1, (-1)^i \bar{u}_2) & (x_2 = 0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

($i = 1, 2$) で与えられる. ここで $\bar{u}_2 \in \mathbf{R}^{n-1}$ は $\|\bar{u}_2\| = 1$ であるような任意のベクトルである.

次に, SOC C-関数を用いた SOCCP の再定式化を説明する. 一般に, 関数 $\hat{\phi}: \mathbf{R}^{2n} \rightarrow \mathbf{R}^n$ が次の性質をもつとき, $\hat{\phi}$ は SOC C(omplementarity)-関数であるという:

$$\hat{\phi}(x, y) = 0 \iff x \in \mathcal{K}^n, \quad y \in \mathcal{K}^n, \quad \langle x, y \rangle = 0.$$

したがって, SOC C-関数を含む関数 $\hat{H}: \mathbf{R}^{2n+\ell} \rightarrow \mathbf{R}^{2n+\ell}$ を

$$\hat{H}(x, y, p) := \begin{pmatrix} \hat{\phi}(x, y) \\ F(x, y, p) \end{pmatrix}$$

と定義することにより, SOCCP は等価な非線形方程式系 $\hat{H}(x, y, p) = 0$ に再定式化される. Fukushima et al. [2] は以下で与えられる Natural Residual (NR) 関数と Fischer-Burmeister (FB) 関数を定義し, どちらも SOC C-関数になることを示した:

$$\phi_{\text{NR}}(x, y) := x - [x - y]_+, \\ \phi_{\text{FB}}(x, y) := x + y - (x^2 + y^2)^{1/2}.$$

ここで, $[z]_+$ は $z \in \mathbf{R}^n$ の \mathcal{K}^n への射影を表す. これらは NCP の再定式化に用いられる関数の SOCCP への自然な拡張になっている. これらの関数を用いることにより, SOCCP は非線形方程式系 $\hat{H}(x, y, p) = 0$ に再定式化される.

3 平滑化FB関数に基づく平滑化Newton法

SOC C-関数は一般には微分不可能であるため、その平滑化関数がしばしば利用される。

定義 1 $f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$ を微分不可能な関数とする。以下の条件を満たすような $f_t : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$ を f の平滑化関数と呼ぶ。

- (i) 任意の $t > 0$ に対して、 f_t は \mathbf{R}^n 上で連続微分可能；
- (ii) 任意の $x \in \mathbf{R}^n$ に対して、 $\lim_{t \rightarrow +0} f_t(x) = f(x)$ 。

Fukushima et al. [2] は NR 関数に対する平滑化関数を提案しており、Hayashi et al. [3] 及び Chen et al. [1] は、それに基づいた数値解法を提案している。前者は、平滑化のために導入したパラメータをそのままパラメータとして調整しているのに対し、後者はパラメータを変数として取込んでいる。

Fukushima et al. は以下の平滑化FB関数 $\phi_t : \mathbf{R}^{2n} \rightarrow \mathbf{R}^n$ も提案している：

$$\phi_t(x, y) := x + y - (2t^2 e + x^2 + y^2)^{1/2}.$$

ただし、 $e = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbf{R}^n$ である。この ϕ_t は $t \neq 0$ のとき、SOC-C 関数ではないが、

$$\phi_t(x, y) = 0 \iff x \in \text{int } \mathcal{K}^n, \quad y \in \text{int } \mathcal{K}^n, \quad x \cdot y = t^2 e$$

という簡明な関係がある。ここで $H_{\text{FB}} : \mathbf{R}^{2n+l} \rightarrow \mathbf{R}^{2n+l}$ 及び、 $H_t : \mathbf{R}^{2n+l} \rightarrow \mathbf{R}^{2n+l}$ を

$$H_{\text{FB}}(x, y, p) := \begin{pmatrix} \phi_{\text{FB}}(x, y) \\ F(x, y, p) \end{pmatrix}, \quad H_t(x, y, p) := \begin{pmatrix} \phi_t(x, y) \\ F(x, y, p) \end{pmatrix}$$

によって定義する。前節で述べたように、方程式系 $H_{\text{FB}}(x, y, p) = 0$ の求解問題はSOCCP(1)と等価な問題であるが、 H_{FB} が一般には微分不可能であるという難点がある。一方、方程式系 $H_t(x, y, p) = 0$ では、 H_t は微分可能となるが、SOCCP(1)と等価ではないから、この方程式系を解いてもSOCCPの解は得られない。しかしながら、関数 H_t は H_{FB} の平滑化関数なので、パラメータ $t > 0$ を逐次減少させながら、非線形方程式系 $H_t(x, y, p) = 0$ を近似的に解いてゆくことにより、近似解列が得られ、次第に $H_{\text{FB}}(x, y, p) = 0$ の解に漸近していくことが期待される (Fukushima et al. [2])。換言すれば、SOCCPの解へと続くパス $(x(t), y(t), p(t))$ を数値的に近似的に追跡することが可能であろう。

以降では記述の簡便性のため、次の表記を用いることとする。 $x = (x_1, x_2), y = (y_1, y_2) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^{n-1}$ と $t \in \mathbf{R}$ に対して関数 $w^t, u^t : \mathbf{R}^{2n} \rightarrow \mathbf{R} \times \mathbf{R}^{n-1}$ を

$$\begin{aligned} w^t &= (w_1^t, w_2^t) = w^t(x, y) := 2t^2 e + x^2 + y^2, \\ u^t &= (u_1^t, u_2^t) = u^t(x, y) := (2t^2 e + x^2 + y^2)^{1/2} \end{aligned}$$

と定義する。特に $t = 0$ のときは簡潔さのため

$$\begin{aligned} w &= (w_1, w_2) = w(x, y) := w^0 = x^2 + y^2, \\ u &= (u_1, u_2) = u(x, y) := u^0 = (x^2 + y^2)^{1/2} \end{aligned}$$

と表記する. また, $w_2 \neq 0$ のとき $\bar{w}_2 := w_2/\|w_2\|$ とし, $w_2 = 0$ のときは \bar{w}_2 を $\|\bar{w}_2\| = 1$ であるような任意の $n-1$ 次元ベクトルとする. 任意の $x, y \in \mathbf{R}^n$ に対して $x^2, y^2 \in \mathcal{K}^n$ であるから, $w \in \mathcal{K}^n$ かつ $w^t \in \text{int } \mathcal{K}$ ($t \neq 0$) であり, また,

$$w_1^t = 2t^2 + \|x\|^2 + \|y\|^2 = 2t^2 + w_1, \quad w_2^t = 2(x_1x_2 + y_1y_2) = w_2$$

であることに注意する.

次にアルゴリズムを構築する上で H_t の (転置) ヤコビ行列を考える必要があるので, Fukushima et al. [2] によって与えられた以下の命題を紹介する.

命題 1 $\lambda_1(w^t), \lambda_2(w^t)$ を w^t の固有値とする. このとき $t \neq 0$ ならば, ϕ_t 及び H_t はそれぞれ $\mathbf{R}^{2n}, \mathbf{R}^{2n+\ell}$ 上で連続微分可能であり, その (転置) ヤコビ行列は以下で与えられる.

$$\begin{aligned} \nabla \phi_t(x, y) &= E - \nabla u^t(x, y) = \begin{bmatrix} I - L_x L_{u^t}^{-1} \\ I - L_y L_{u^t}^{-1} \end{bmatrix}, \\ \nabla H_t(x, y, p) &= \begin{bmatrix} \nabla_x \phi_t(x, y) & \nabla_x F(x, y, p) \\ \nabla_y \phi_t(x, y) & \nabla_y F(x, y, p) \\ 0 & \nabla_p F(x, y, p) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

ただし, $E = [I \ I]^T \in \mathbf{R}^{2n \times n}$ とし, $w_2 = 0$ ならば $L_{u^t}^{-1} = (1/\sqrt{w_1^t})I$, さもなければ,

$$L_{u^t}^{-1} = \begin{bmatrix} b_t & -c_t \bar{w}_2^T \\ -c_t \bar{w}_2 & a_t I + (b_t - a_t) \bar{w}_2 \bar{w}_2^T \end{bmatrix}$$

とする. ただし a_t, b_t, c_t は

$$\begin{aligned} a_t &:= \frac{2}{\sqrt{\lambda_1(w^t)} + \sqrt{\lambda_2(w^t)}}, \\ b_t &:= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_1(w^t)}} + \frac{1}{\sqrt{\lambda_2(w^t)}} \right), \\ c_t &:= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_1(w^t)}} - \frac{1}{\sqrt{\lambda_2(w^t)}} \right) \end{aligned}$$

である.

今回, 我々は Hayashi et al. と同様にパラメータ t を逐次 0 に近づけながら Newton 法を適用する以下のようなアルゴリズムを考える.

アルゴリズム 1

Step 0. $v^{(0)} := (x^{(0)}, y^{(0)}, p^{(0)}) \in \mathbf{R}^{2n+\ell}$, $t^{(0)} \in \mathbf{R}_{++}$ を与え, $k := 0$ とする.

Step 1. (例えば $\|H_{\text{FB}}(v^{(k)})\| = 0$ などを用いて) 収束判定を行う.

Step 2. Newton 方程式

$$H_{t_k}(v^{(k)}) + \nabla H_{t_k}(v^{(k)})^T d^{(k)} = 0$$

を解き, 探索方向 $d^{(k)}$ を求める.

Step 3. 適当な直線探索によりステップ幅 α_k を求めて,

$$v^{(k+1)} := v^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$$

により点列を更新する.

Step 4. パラメータ $t^{(k+1)} \in (0, t^{(k)})$ を選択する.

Step 5. $k := k + 1$ として Step 1 へ戻る.

Fukushima et al. [2] は関数 H_t の (転置) ヤコビ行列 ∇H_t が正則となる条件を与えている. したがって, その条件の下, 適切な直線探索を行うことでアルゴリズム 1 は実行可能となる.

一般に微分不可能な非線形方程式系 $f(x) = 0$ ($f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$) に対する平滑化 Newton 法は多くの研究者により研究されており (例えば [4] 参照), 局所的に速い収束性を示すためには関数 f の (strong) semismoothness, 平滑化関数 f_t のヤコビ行列の適合性 (*Jacobian consistency*), およびパラメータ t の適切な選択法, が必要であることが知られている. 関数 H_{FB} の (strong) semismoothness は Sun and Sun [5] によって証明されている. 次節では, アルゴリズム 1 の局所的な 2 次収束性を保証するために必要な性質の一つである H_t の Jacobian consistency property について考える.

4 Jacobian consistency

まず, H_t の Jacobian consistency を議論するために必要な基本的定義を与える.

定義 2 $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$ を局所 Lipschitz 連続な関数とする. (このとき Rademacher の定理より f はほとんど至る所微分可能なので) f の x における $B(\text{ouligant})$ 劣微分, 及び Clarke 劣微分はそれぞれ以下のように定義される:

$$\partial_B f(x) := \left\{ \lim_{\hat{x} \rightarrow x} \nabla f(\hat{x}) \mid \hat{x} \in \mathcal{D}_f \right\}, \quad \partial f(x) := \text{co } \partial_B f(x).$$

ただし, \mathcal{D}_f は, f が微分可能な点全体の集合とし, $\text{co } \partial_B f(x)$ は $\partial_B f(x)$ の凸包を表す.

Clarke 劣微分は微分可能な関数における (転置) ヤコビ行列の一般化であり, f が連続微分可能な場合には $\partial f(x) \equiv \{\nabla f(x)\}$ となる.

定義 3 $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$ を局所 Lipschitz 連続な関数とする. f の平滑化関数 $f_t: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$ が任意の $x \in \mathbf{R}^n$ に対し

$$\lim_{t \rightarrow +0} \text{dist}(\nabla f_t(x), \partial f(x)) = 0$$

を満たすとき, 平滑化関数 f_t は *Jacobian consistency property* をもつという. ここで, $\text{dist}(X, S)$ は $\inf\{\|X - Y\| \mid Y \in S\}$ を表す.

関数 H_{FB} 及び H_t の定義と F が連続微分可能であることを考慮すると, H_t の Jacobian consistency を証明するためには, $\lim_{t \rightarrow 0} \nabla \phi_t(x, y)$ と $\partial_B \phi_{\text{FB}}(x, y)$ を議論すればよいことがわかる. そのための準備として, \mathbf{R}^{2n} を $\mathbf{R}^{2n} = \mathcal{Z}_1 \cup \mathcal{Z}_2 \cup \{(0, 0)\}$ に分割して考える. ただし,

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_1 &= \{z = (x, y) \in \mathbf{R}^{2n} \mid w = x^2 + y^2 \in \text{int } \mathcal{K}^n\}, \\ \mathcal{Z}_2 &= \{z = (x, y) \in \mathbf{R}^{2n} \mid w = x^2 + y^2 \in \text{bd } \mathcal{K}^n, w \neq 0\} \\ &= \{z = (x, y) \in \mathbf{R}^{2n} \mid w = x^2 + y^2 \in \text{bd } \mathcal{K}^n, (x, y) \neq (0, 0)\}\end{aligned}$$

とする. ここで, ϕ_{FB} は \mathcal{Z}_1 上では微分可能だが, \mathcal{Z}_2 上及び原点では微分不可能であることに注意する. 次に, $\lim_{t \rightarrow 0} \nabla \phi_t(x, y)$ と $\partial_B \phi_{\text{FB}}(x, y)$ に関して以下の補題を与える.

補題 1 (x, y) を \mathbf{R}^{2n} の任意の点とする. このとき,

$$\lim_{t \rightarrow 0} \nabla u^t(x, y) = \begin{bmatrix} L_x J \\ L_y J \end{bmatrix}, \quad \lim_{t \rightarrow 0} \nabla \phi_t(x, y) = E - \lim_{t \rightarrow 0} \nabla u^t(x, y) = \begin{bmatrix} I - L_x J \\ I - L_y J \end{bmatrix}$$

が成り立つ. ただし,

$$J := \begin{cases} L_u^{-1} & \text{if } (x, y) \in \mathcal{Z}_1, \\ \frac{1}{2\sqrt{2w_1}} \begin{bmatrix} 1 & \bar{w}_2^T \\ \bar{w}_2 & 4I - 3\bar{w}_2\bar{w}_2^T \end{bmatrix} & \text{if } (x, y) \in \mathcal{Z}_2, \\ 0 & \text{if } (x, y) = (0, 0) \end{cases}$$

とする.

補題 2 (x, y) を \mathbf{R}^{2n} の任意の点とする. このとき,

$$\begin{bmatrix} I - L_x J \pm Z \\ I - L_y J \end{bmatrix} \in \partial_B \phi_{\text{FB}}(x, y)$$

が成立する. ただし,

$$Z := \begin{cases} 0 & \text{if } (x, y) \in \mathcal{Z}_1, \\ \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -\bar{w}_2^T \\ -\bar{w}_2 & \bar{w}_2\bar{w}_2^T \end{bmatrix} & \text{if } (x, y) \in \mathcal{Z}_2, \\ I & \text{if } (x, y) = (0, 0) \end{cases}$$

とする.

以上, 2つの補題から, 任意の $(x, y) \in \mathbf{R}^{2n}$ に対して, $\lim_{t \rightarrow 0} \nabla \phi_t(x, y) \in \partial \phi_{\text{FB}}(x, y)$ であることがわかる. したがって, F の連続微分可能性より以下の定理を得る.

定理 1 (x, y) を \mathbf{R}^{2n} の任意の点とする. このとき,

$$\lim_{t \rightarrow 0} \text{dist}(\nabla \phi_t(x, y), \partial \phi_{\text{FB}}(x, y)) = 0$$

が成立する. さらに平滑化関数 H_t は *Jacobian consistency property* を満たす.

5 終わりに

本稿では、平滑化 Fischer-Burmeister 関数に基づいて構成された関数 H_t に対する平滑化 Newton 法の基本形 (アルゴリズム 1) を考え、局所的に速い収束性をもつための条件の一つである H_t の Jacobian consistency について議論した。直線探索やパラメータ t の選択法を含めた具体的なアルゴリズムの構築、及びそのアルゴリズムの局所的な収束性については今後の課題である。

参考文献

- [1] X.-D. Chen, D. Sun and J. Sun, Complementarity functions and numerical experiments on some smoothing Newton methods for second-order-cone complementarity problems, *Computational Optimization and Applications*, **25** (2003), 39–56.
- [2] M. Fukushima, Z.-Q. Luo and P. Tseng, Smoothing functions for second-order-cone complementarity problems, *SIAM Journal on Optimization*, **12** (2001), 436–460.
- [3] S. Hayashi, N. Yamashita and M. Fukushima, A combined smoothing and regularization method for monotone second-order cone complementarity problems, *SIAM Journal on Optimization*, **15** (2005), 593–615.
- [4] L. Qi and D. Sun, A survey of some nonsmooth equations and smoothing Newton methods, A. Eberhard, R. Hill, D. Ralph and B.M. Glover (eds.), *Progress in Optimization*, Springer, 1999, pp. 121–146.
- [5] D. Sun and J. Sun, Strong semismoothness of the Fischer-Burmeister SDC and SOC complementarity functions, *Mathematical Programming*, **103** (2005), 575–581.