修士論文予稿

非線形方程式系に対するスペクトル残差法に関する研究

数理第 3 研究室 修士 2 年 土井 聡弘
指導教員 松尾 宇泰 准教授

2009 年 2 月 3 日

1 序論

本論文では以下の非線形方程式系

$$F(x) = 0 \tag{1}$$

を考える．ただし，$F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ は連続微分可能な関数とする．

一般に, 非線形方程式系 (1) を解く場合, ほとんどが Newton 法を用いて解く．本論文では，Newton 法に基づいた枠組みからではなく，全く別の枠組みから得られた手法であるスペクトル残差法に関する研究成果を示す．

歴史的な流れを追うと，この手法は最適化問題において最も古典的な手法である最急降下法のステップ幅を上手く調節した BB(Barzilai–Borwein) 法 [1] に端を発する．BB 法は，目的関数の値が，反復回数を増すごとに必ずしも単調に減少しないという点が特徴的で，この BB 法に非単調直線探索を組み合わせて大域的収束性を有するように考案された手法が GBB(Global Barzilai–Borwein) 法 [4] である．この GBB 法を最適化問題に対する手法から非線形方程式系に対する手法へ発展させた手法が最初のスペクトル残差法である SANE(Spectral Approach for Nonlinear Equations) アルゴリズム [3] である．しかし，SANE アルゴリズムは依然として Jacobi 行列を解析的に計算，あるいは近似しなければいけない．この SANE アルゴリズムを Jacobi 行列を全く利用することのない手法として書き直された手法が DF(Derivative-free)-SANE アルゴリズム [2] である．

以下，第 2 章でスペクトル残差法（SANE，DF-SANE アルゴリズム）の概要を記述し，第 3 章で DF-SANE アルゴリズムの数値的評価と改善案を与え，第 4 章で結論を述べる．

2 スペクトル残差法

スペクトル残差法とは，GBB 法を非線形方程式系 (1) に適用した際に，探索方向を残差方向 $-F_k$ に変更したアルゴリズムを指す．また，ステップ幅に固有値の情報を用いていることから，スペクトルという名が付けられている．GBB 法から導かれた，その最も自然な形が次に掲げる SANE アルゴリズムである．SANE アルゴリズムとは以下のようなアルゴリズムである．

アルゴリズム 2.1(SANE アルゴリズム)

Step 1: Given $x_0, \alpha_0, M, \gamma \in (0,1), \delta > 0$, $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1, 0 < \epsilon < 1$. Set $k = 0$.

Step 2: Terminate if $||F(x_k)|| = 0$.

Step 3: Terminate if $\frac{|F(x_k)^T J(x_k) F(x_k)|}{f(x_k)} < \epsilon$.

Step 4: If $\alpha_k \le \epsilon$, or $\alpha_k \ge \frac{1}{\epsilon}$, Set $\alpha_k = \delta$.

Step 5: Set $\mathrm{sgn}_k = \mathrm{sgn}(F(x_k)^T J(x_k) F(x_k))$ and $d_k = -\mathrm{sgn}_k F(x_k)$.

Step 6: If $f(x_k + \alpha_k d_k) \le f_{\max} - 2\mathrm{sgn}_k \gamma \alpha_k F(x_k)^T J(x_k) F(x_k)$, set $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ and go to Step 8. Otherwise, go to Step 7.

Step 7: Select $\sigma \in [\sigma_1, \sigma_2]$, set $\alpha_k = \sigma \alpha_k$ and go to Step 6.

Step 8: Set $\alpha_{k+1} = -\frac{\mathrm{sgn}_k \alpha_k f(x_k)}{F(x_k)^T (F(x_{k+1}) - F(x_k))}$, $k = k+1$ and go to Step 2.

DF-SANE については SANE からの大きな改善点のみを挙げるに止める．

アルゴリズム 2.1'(DF-SANE アルゴリズム)

Step 5': Set $d_k = -F(x_k)$.

Step 6': If $f(x_k \mp \alpha_k d_k) \le f_{\max} + \eta_k - \gamma \alpha_k^2 f(x_k)^2$, set $x_{k+1} = x_k \mp \alpha_k d_k$ and go to Step 8. Otherwise, go to Step 7.

DF-SANE では関数の評価回数が 1 反復当たり 1 回減っている．

3 DF-SANE の数値的評価と改善案

本論文で提案した DF-SANE の改善案二つを下に掲げる:

- M(Modified)DF-SANE,
- L(Line search)MDF-SANE.

MDF-SANE とは，DF-SANE のパラメータ α_0 と δ を調節したアルゴリズムである．初期ステップ幅 α_0 を大きくとり過ぎないことにより，慎重な反復を行い，δ を調節することで，α_k の符号が保たれるようにしてある．

LMDF-SANE とは，MDF-SANE の非単調直線探索を，提案する非単調直線探索で置き換えたアルゴリズムである．それは

$$f(x_k + \alpha_k d_k) \leq f_{\max} + 2\gamma\alpha_k F(x_k)^T \hat{J}_k, \quad (2)$$

で与えられる．ただし，$\hat{J}_k$ は近似

$$\hat{J}_k = \frac{F(x_k) - F(x_{k-1})}{-\alpha_{k-1}} \quad (3)$$

を表わす．

以下では，三つの目的のもとで各アルゴリズムの数値的評価を行う．すなわち，

- DF-SANE と改善案である MDF-SANE, LMDF-SANE との比較
- DF-SANE と準 Newton 法 (Broyden), inexact Newton 法 (Newton-GMRES) との比較
- DF-SANE と DF-SANE2 との比較

である．ただし，以下，アルゴリズム名の後に 2 と付いているものは，ステップ幅の更新の仕方を別の仕方に変更したアルゴリズムを指すものとする．

表 1 は，9 つの関数について 3 通りの次元，3 通りの初期値 (計 81 個) に対する問題を各アルゴリズムに適用した結果をまとめたものである．it は反復回数が最も少なかった回数を表し，FE，time はそれぞれ関数の評価回数が最も少なかった回数，実行時間が最も短かった回数を表す．表 1 より，関数の評価回数，実行時間ともに MDF-SANE2 が最も上回っていることがわかる．また，SANE 系列よりも

表 1　各アルゴリズムの数値的評価

アルゴリズム	it	FE	time
SANE	7	1	2
SANE2	4	2	0
DF-SANE	5	14	11
DF-SANE2	3	25	16
MDF-SANE	4	15	12
MDF-SANE2	5	32	20
LMDF-SANE	5	15	1
LMDF-SANE2	6	26	4
Newton-GMRES	67	13	12
Broyden	3	21	19

SANE2 系列の方が有効であることも見て取れる．表 1 には載っていないが，LMDF-SANE は収束半径が広がっているという点で有効性を発揮した．

4　結論

本論文では，非線形方程式系に対する解法としてスペクトル残差法を紹介し，その実用性について考察した．その結果, inexact Newton 法や準 Newton 法に匹敵する，もしくはそれらを上回る性能をスペクトル残差法は発揮していることがわかった．また，提案した LMDF-SANE は，実行時間の改善は見られなかったが，収束半径の改善には成功した．さらに，これまで提案者たちが見過ごしていた SANE2 系列の有効性についても確認することができた．

現在非線形方程式系を解く方法として数値計算ライブラリの IMSL や MINPACK に実装されている Powell の hybrid アルゴリズムがある．様々な改善手法が提案されている中，この約 40 年前に提案された Powell の hybrid アルゴリズムと比べて，どちらが早いのか調査するのは今後の検討課題としたいと思う．また，今回調節したパラメータ以外にも様々なパラメータが存在するので，それらの調節による改善も試みたい．非単調直線探索に関しても色々な方法が提案されているので，スペクトル残差法，特に MDF-SANE2 に対して性能の良い直線探索を模索していきたい．

参考文献

[1] J. Barzilai and J. M. Borwein: Two-point step size gradient methods. *IMA Journal of Numerical Analysis*, Vol. 8(1988), pp. 141–148.

[2] W. La Cruz, J. M. Martínez and M. Raydan: Spectral residual method without gradient information for solving large-scale nonlinear systems of equations. *Mathematics of Computation*, Vol. 75(2006), pp. 1429–1448.

[3] W. La Cruz and M. Raydan: Nonmonotone spectral methods for large-scale nonlinear systems. *Optimization Methods and Software*, Vol.18(2003), pp. 583–599.

[4] M. Raydan: The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem. *SIAM Journal on Optimization*, Vol. 7(1997), pp. 26–33.