第２回システム最適化に関するシンポジウム講演論文集　1991年11月

(22) 非線形最適化の並列計算手法

PARALLEL COMPUTATIONAL METHOD FOR NONLINEAR OPTIMIZATION

相吉英太郎*
Eitaro AIYOSHI

Two optimization methods with parallel computing capabilities for unconstrained optimization problems and linearly constrained optimization problems are introduced, which are called a parallel quasi-Newton method and a parallel quasi-Newton projection method. The former is characterized by simultaneous perturbations of a trial point in plural directions, and by approximation to an inverse of the Hessian of the objective function by use of informations at the perturbed points, Then, the parallelism can be induced into the perturbation process as well as the computations of the gradients at the perturbed points. In the latter method, the perturbation process is performed on the linear manifold of the equality constraints. The experiment in serial fashion on the currently used computer indicates that the algorithms effect better convergence than the quasi-Newton method and the quasi-Newton projection method.

Key Words : nonlinear optimization, unconstrained optimization, linearly constrained optimization, parallel computation, quasi-Newton method

1. まえがき

計算時間の短縮化のために、計算処理の並列化が考えられているが、そのためには並列処理用計算機の開発だけではなく、その並列処理に適したアルゴリズムの開発が必要不可欠である。本論文では、非線形最適化の並列計算手法のうち、筆者らが近年開発した有力な並列計算手法である「並列準ニュートン法」「並列準ニュートン射影法」について紹介する。

並列計算可能な最適化手法には、その並列性の規模やレベルにさまざまなものがある。たとえば計算手順を構成する勾配計算や直線探索などのサブルーチンが、異なる多種データのもとで多重に実行されるような並列計算手法で、さらにそのうち共役方向法や共役勾配法に類するものに限定しても、文献1)～4)などの手法を挙げることができる。特に文献4)の手法は、試行点を複数個多重にとって一つの行列にまとめ、またこれら試行点における勾配もまとめて行列化し、さらにベクトルの共役の概念に対応した行列の共役性とも言える群共役性という概念を用いて、共役勾配法の更新回数を本質的に低減させる並列計算手法として興味深い（文献5)の解説参照）。

本論文で取り上げる並列準ニュートン法の特徴は、決定変数の次元の数だけ独立方向へ試行点を摂動し、その摂動点での勾配などの情報をもとに、ニュートン法の更新式中の目的関数のヘッセ行列の逆行列を近似することであり、その際の試行点の複数方向への摂動作業と各摂動点での勾配計算において、並列計算処理

＊　工博　慶応義塾大学理工学部助教授　計測工学科

がおこなえるというものである。次元数個の摂動方向ベクトルのすべてと、摂動点での勾配のすべてをそれぞれ一まとめにして行列化し、これらを用いた公式によりヘッセ行列の逆行列を近似する。この作業は通常の準ニュートン法の次元数回分の更新作業に相当するものとみなすことができ、実際に並列処理を行わなくても通常の準ニュートン法と比較して十分高い効率性を有し、さらに摂動作業や勾配計算および更新式の行列演算の並列化によって一層の効率化が実現可能である。

なお、ＩＢＭ 3090-300 Ｓ－ＶＦの３台のベクトル演算プロセッサを用いた、この並列準ニュートン法の数値実験結果が、文献5)に与えられているので参照されたい。またこのような並列準ニュートン法の考え方は文献6)で最初に提案され、その近似公式の一般化が文献7)でなされ、また文献8)ではじめて、摂動方向ベクトルをまとめて行列化するアイデアが提案されたことを付記しておく。また同じアイデアは非線形等式制約条件つき最適化問題に対するラグランジュ準ニュートン法の並列化にも応用しているので、文献9)を参照されたい。

ところで、制約条件が線形状の等式で与えられている場合には、その線形性を生かした並列化手法の方が効率的である。そこで、この等式が形成する線形多様体を張る独立な方向ベクトルを用いることによって、無制約問題に対する並列準ニュートン法の計算原理をこの多様体上に限定させたいわゆる線形多様体上の並列準ニュートン法を考えることができる。この手法は、等式制約による線形多様体への射影行列と目的関数のヘッセ行列の逆行列との積行列の近似計算を並列におこなっていることになり、準ニュートン射影法を並列化した、並列準ニュートン射影法と称すべき手法である。

以上の２種の並列最適化手法の手順を以下の章で詳説する。

2. 並列準ニュートン法

制約条件のない最適化問題を

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \tag{1}$$

と表現する。ただし、$\mathbf{x}\in R^n$ とし、$f: R^n \to R^1$ は２回連続微分可能とし、そのヘッセ行列を$\nabla^2 f(\mathbf{x})$で表わすと、問題(1)に対するニュートン法の更新式は

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-[\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)]^{-1}\nabla f(\mathbf{x}^k)^T \tag{2}$$

で与えられる。このとき、ヘッセ行列の逆行列 $[\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)]^{-1}$の計算を回避するために、適当な正定値対称行列$H^k$ でこれを置き換え、(2)式の代わりに、

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-H^k\nabla f(\mathbf{x}^k)^T \tag{3}$$

により試行点を更新すると同時に、試行点の変位$\mathbf{p}^k=\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k$ と、それに対応した勾配の変位$\mathbf{q}^k=\nabla f(\mathbf{x}^{k+1})^T-\nabla f(\mathbf{x}^k)^T$を用い、$[\nabla^2 f(\mathbf{x}^{k+1})]^{-1}$をよりよく近似するよう、$H^K$を$H^{k+1}$へ更新する手法が準ニュートン法である。

これに対して並列準ニュートン法は、互いに独立な複数方向へ試行点を同時に摂動し、これら複数摂動点での勾配などの情報をもとに、ヘッセ行列の逆行列 $[\nabla^2 f(\mathbf{x}^k)]^{-1}$を近似する手法である。まず、関数$f$は$n\times n$正定値対称行列$C$をもつ２次関数

$$f(\mathbf{x})=\frac{1}{2}\mathbf{x}^T C\mathbf{x}+\mathbf{c}^T\mathbf{x} \tag{4}$$

であるとする。このとき任意の試行点$\bar{\mathbf{x}}$に対し、

$$\mathbf{s}=-C^{-1}\nabla f(\bar{\mathbf{x}})^T \tag{5}$$

とすると、更新点$\tilde{\mathbf{x}}=\bar{\mathbf{x}}+\mathbf{s}$は問題(1)の最適解となる。この逆行列$C^{-1}$をあらためて$\tilde{V}$とおき、この行列が満たすべき条件を与えるために、$n$個の互いに独立な摂動方向ベクトルを$\mathbf{d}_1, \cdots, \mathbf{d}_n$とし、試行点$\bar{\mathbf{x}}$とその摂動点$\bar{\mathbf{x}}+\mathbf{d}_i$、$i=1$、…、$n$との勾配差を、

$$\mathbf{y}_i = \nabla f(\bar{\mathbf{x}}+\mathbf{d}_i)^T - \nabla f(\bar{\mathbf{x}})^T,\ i=1,\cdots,n \tag{6}$$

とする。さらにこれらを行列にまとめて

$$D=[\mathbf{d}_1 \cdots \mathbf{d}_n],\ Y=[\mathbf{y}_1 \cdots \mathbf{y}_n] \tag{7, a, b}$$

とおくと、近似行列$\tilde{V}$に対して次の定理がなりたつ。

<u><定理１></u>問題(1)の目的関数 f は(4)式のような２次関数であるとする。このとき、行列D, Yとあるn×n対称行列$\tilde{V}$に対して

$$\tilde{V}Y=D \tag{8}$$

がなりたつならば、移動方向

$$\mathbf{s}=-\tilde{V}\nabla f(\bar{\mathbf{x}})^T \tag{9}$$

に対する更新点$\tilde{\mathbf{x}}=\bar{\mathbf{x}}+\mathbf{s}$は問題(1)の最適点である。

この定理より、関数 f が２次関数ならば、行列D、Yを用いて(8)式をみたす対称行列$\tilde{V}$を適当な行列$\bar{V}$より生成すれば、逆行列C^{-1}を計算しなくてよいことがわかる。このような行列$\tilde{V}$の生成法として、行列型BFGS公式ともいえる更新式

$$\tilde{V}=\left(I_n-\frac{DY^T}{\varepsilon^2}\right)\bar{V}\left(I_n-\frac{YD^T}{\varepsilon^2}\right)+\frac{DD^T}{\varepsilon^2},\quad I_n:\ n\times n\text{単位行列} \tag{10}$$

をDとYに対する条件

$$D^TY=\varepsilon^2 I_n \tag{11}$$

のもとで用いることができる。この更新式は、準ニュートン法の式(3)の行列H^kに対する更新式

$$H^{k+1}=\left(I_n-\frac{\mathbf{p}^K\mathbf{q}^{kT}}{\mathbf{q}^{kT}\mathbf{p}^K}\right)H^k\left(I_n-\frac{\mathbf{q}^K\mathbf{p}^{kT}}{\mathbf{q}^{kT}\mathbf{p}^K}\right)+\frac{\mathbf{p}^K\mathbf{p}^{kT}}{\mathbf{q}^{kT}\mathbf{p}^K} \tag{12}$$

のベクトル部分$\mathbf{p}^k$、$\mathbf{q}^k$をそれぞれD、Yで置き換え、H^kを$\bar{V}$、H^{k+1}を$\tilde{V}$とした式

$$\tilde{V}=(I_n-D(Y^TD)^{-1}Y^T)\bar{V}(I_n-Y(D^TY)^{-1}D^T)+D(D^TY)^{-1}D^T$$

において、(11)式を用いて逆行列部分を簡約化した式である。なお、関数 f が２次関数の場合には、(11)式が成立するように行列Dを生成すれば、

$$\bar{V}[I_n-YD^T/\varepsilon^2]=O \tag{13}$$

が成立することが示され、更新式(10)の第１項はゼロとなり、行列$\bar{V}$の選択と無関係に、第２項DD^T/ε^2により行列$\tilde{V}$がきまることがわかる。一方、 f が２次関数でない一般の非線形関数の場合にはこの限りではなく、更新式の第１項は非ゼロ行列である。なお式(11)は

$$\mathbf{d}_i^T C\mathbf{d}_j=\begin{cases}0 & (i\neq j)\\ \varepsilon^2 & (i=j)\end{cases} \tag{14}$$

と等価である。

以上より、２次関数に対する並列準ニュートン法の基本手順をまとめるとつぎのとおりである。

<並列準ニュートン法の基本手順>

ステップ１　基点$\bar{\mathbf{x}}$と正定値対称な初期行列$\bar{V}$を与える。

ステップ２　行列Cに関して共役かつ正規化された、すなわち(14)式を満たす互いに独立なn個の方向ベクトル$\mathbf{d}_i$、$i=1,\cdots,n$を生成し、これらを行列にまとめて$D=[\mathbf{d}_1\cdots\mathbf{d}_n]$とおく。

ステップ３　(並列計算可能)　基点$\bar{\mathbf{x}}$からのn個の摂動点$\mathbf{x}_i=\bar{\mathbf{x}}+\mathbf{d}_i$、$i=1,\cdots,n$と、基点$\bar{\mathbf{x}}$における勾配差$\mathbf{y}_i=\nabla f(\mathbf{x}_i)^T-\nabla f(\bar{\mathbf{x}})^T$、$i=1,\cdots,n$を計算し、行列Dに対応して$Y=[\mathbf{y}_1\cdots\mathbf{y}_n]$とおく。

ステップ４　更新式(10)により、$\bar{V}$を修正して$\tilde{V}$を得る。

ステップ5　基点$\bar{\mathbf{x}}$からの摂動方向を$\bar{\mathbf{s}}=-\tilde{V}\nabla f(\bar{\mathbf{x}})^T$とおき、$\bar{\mathbf{x}}+\bar{\mathbf{s}}$を最適解とする

この基本手順による更新点は、一般の非線形目的関数に対しては最適点である保証がない。そこで、基本手順で得られる新点を新たな基点とし、この基本手順を1つのサイクルとして繰り返す。この場合、初期試行行列$\bar{V}$は計算手順開始時に設定した行列に設定しなおしても良いが、$\bar{V}$を更新して得られた行列$\tilde{V}$が$[\nabla^2 f(\bar{\mathbf{x}})]^{-1}$のより良い近似行列になっていることを考慮して、この新近似行列を次のサイクルの初期試行行列とするのが得策である。

なお、ステップ2の(14)式を満たすような方向ベクトル$\mathbf{d}_i$、$i=1$、…、nの生成は、まずグラムシュミット法の漸化式

$$\begin{cases}\boldsymbol{\delta}_1=\mathbf{d}_1 & (15a)\\ \boldsymbol{\delta}_i=\mathbf{d}_i-\sum_{j=1}^{i-1}\gamma_j{}^i\boldsymbol{\delta}_j, \quad i=2、3、\cdots、n & (15b)\end{cases}$$

$$\gamma_j{}^i=\frac{\mathbf{d}_i{}^T C\boldsymbol{\delta}_j}{\boldsymbol{\delta}_j{}^T C\boldsymbol{\delta}_j} \tag{15c}$$

により、$\boldsymbol{\delta}_1$，$\boldsymbol{\delta}_2$、…、$\boldsymbol{\delta}_n$を生成し、次に

$$\mathbf{d}_i := \frac{\varepsilon\boldsymbol{\delta}_i}{(\boldsymbol{\delta}_i{}^T C\boldsymbol{\delta}_i)^{1/2}}、\quad i=1、2、\cdots、n \tag{16}$$

とすればよい。

なお、一般非線形関数では2次の係数行列に相当するものが定義されないため、2次関数に対して成立する

$$C\boldsymbol{\delta}=\nabla f(\mathbf{x}+\boldsymbol{\delta})^T-\nabla f(\mathbf{x})^T \tag{18}$$

なる関係を(15c)、(16)式に用いて、これらに係数行列Cが含まれない形に変形して使用する。

以上のような、一般非線形目的関数に対する並列準ニュートン法の手順をまとめると次のようになる。

<並列準ニュートン法の一般手順>

ステップ1　初期点$\mathbf{x}^1$と正定値対称な初期近似行列V^1、終了判定正定数ηを与え$t=1$とおく。

ステップ2　互いに独立なn個の方向ベクトル$\mathbf{d}_i$、$i=1$、…、nを用意する

ステップ3　$\|\nabla f(\mathbf{x}^t)\|<\eta$ならば、$\mathbf{x}^t$を問題(1)の最適解として計算を終了し、そうでなければ次のステップへいく。

ステップ4　漸化式

$$\begin{cases}\boldsymbol{\delta}_1{}^t=\mathbf{d}_1 & (19a)\\ \boldsymbol{\delta}_i{}^t=\mathbf{d}_i-\sum_{j=1}^{i-1}\gamma_j{}^{it}\boldsymbol{\delta}_j{}^t、\quad i=2、\cdots、n & (19b)\end{cases}$$

$$\gamma_j{}^{it}=\frac{\mathbf{d}_i{}^T(\nabla f(\mathbf{x}^t+\boldsymbol{\delta}_j{}^t)^T-\nabla f(\mathbf{x}^t)^T)}{\boldsymbol{\delta}_j{}^{tT}(\nabla f(\mathbf{x}^t+\boldsymbol{\delta}_j{}^t)^T-\nabla f(\mathbf{x}^t)^T)} \tag{19c}$$

$$i=2、\cdots、n、\ j=1、2、\cdots、i-1$$

により、$\boldsymbol{\delta}_1{}^t$、…、$\boldsymbol{\delta}_n{}^t$を生成し、

$$\mathbf{d}_i{}^t := \frac{\varepsilon\boldsymbol{\delta}_i{}^t}{(\boldsymbol{\delta}_i{}^{tT}(\nabla f(\mathbf{x}^t+\boldsymbol{\delta}_i{}^t)^T-\nabla f(\mathbf{x}^t)^T)^{1/2}} \tag{20}$$

$$i=1、\cdots、n$$

とし、これらを用いて行列$D^t=[\mathbf{d}_1{}^t\ \mathbf{d}_2{}^t\cdots\mathbf{d}_n{}^t]$をつくる。

ステップ5　基点$\mathbf{x}^t$からのn個の摂動点$\mathbf{x}_i{}^t=\mathbf{x}^t+\mathbf{d}_i^t$、$i=1$、…、nと、基点$\mathbf{x}^t$との勾配差$\mathbf{y}_i{}^t=\nabla f(\mathbf{x}_i{}^t)^T-\nabla f(\mathbf{x}^t)^T$、$i=1$、…、nを計算し、行列$Y^t=[\mathbf{y}_1{}^t\ \mathbf{y}_2{}^t\cdots\ \mathbf{y}_n{}^t]$を構成する。

ステップ6　更新式

$$V^{t+1}=(I_n-\frac{D^tY^{tT}}{\varepsilon^2})\ V^t\ (I_n-\frac{Y^tD^{tT}}{\varepsilon^2})+\frac{D^tD^{tT}}{\varepsilon^2} \tag{21}$$

により、D^t、Y^t を用いて V^t を修正し、V^{t+1} を生成する。

ステップ7　V^{t+1} を用いて、移動方向 $\mathbf{s}^t=-V^{t+1}\nabla f(\mathbf{x}^t)^T$ を計算する。

ステップ8　直線探索問題

$$\min\ \{f(\mathbf{x}^t+\alpha\mathbf{s}^t)\ |\ \alpha>0\} \tag{22}$$

を解いてその解を α^tとし、$\mathbf{x}^{t+1}=\mathbf{x}^t+\alpha^t\mathbf{s}^t$を求め、$t:=t+1$ としてステップ3へ戻る。

3. 並列準ニュートン射影法

本章では、線形等式制約条件つき最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}}\ f(\mathbf{x}) \tag{23a}$$

$$\text{subj. to}\quad A\mathbf{x}=\mathbf{b} \tag{23b}$$

を考える。ただし、$\mathbf{b}\in R^l$、Aは $l\times n$ 行列 $[\mathbf{a}_1、\mathbf{a}_2、\cdots、\mathbf{a}_l]^T$ $(\mathbf{a}_i\in R^n)$ で rank $A=l$ とする。したがって制約式を満たす領域は、$n-l$ 次元線形多様体となり、$n-l$ 個の独立なベクトルでこの領域全体を張ることができ、このような $n-l$ 個の方向ベクトルを用いて、無制約問題に対する並列準ニュートン法と同様の原理で、線形多様体上の関数 $f(\mathbf{x})$ の最小点を求めることができる。

まずこの原理を明らかにするために、関数 f を(4)式のような2次関数とする。このとき、制約式(23b) を満たす任意の試行点 $\bar{\mathbf{x}}$ に対し、

$$\mathbf{s}=-(I-C^{-1}A^T(AC^{-1}A^T)^{-1}A)C^{-1}\nabla f(\bar{\mathbf{x}})^T \tag{24}$$

とすると、更新点 $\tilde{\mathbf{x}}=\bar{\mathbf{x}}+\mathbf{s}$ は問題(23)の最適解となる。(24)式において

$$P_c=I-C^{-1}A^T(AC^{-1}A^T)^{-1}A$$

とおくと、この行列 P_c は(5) 式のニュートン法の移動方向を部分空間 $\{\mathbf{s}\mid A\mathbf{s}=0\}$ へ写像する射影行列となる。もし関数 f が2次関数でない一般の非線形関数ならば、ヘッセ行列$\nabla^2 f(\bar{\mathbf{x}})$を用いた式

$$\mathbf{s}=-(I-[\nabla^2f(\bar{\mathbf{x}})]^{-1}A^T(A[\nabla^2f(\bar{\mathbf{x}})]^{-1}A^T)^{-1}A)[\nabla^2f(\bar{\mathbf{x}})]^{-1}\nabla f(\bar{\mathbf{x}})^T \tag{25}$$

を使用して、試行点の逐次更新を行えば、試行点の更新回数に関する限り効率的である。しかしながら、この更新方向の計算には2回の逆行列計算を含むため、仮にヘッセ行列が正則行列でも、1回の更新作業にかかる計算量は変数の増加とともに著しく増大する。そこで、行列

$$(I-[\nabla^2f(\bar{\mathbf{x}})]^{-1}A^T(A[\nabla^2f(\bar{\mathbf{x}})]^{-1}A^T)^{-1}A)[\nabla^2f(\bar{\mathbf{x}})]^{-1} \tag{26}$$

の部分を適当な行列で近似し、さらにこの近似計算を並列準ニュートン法の原理を用いて効率化することを考える。

まず$f(\mathbf{x})$ が2次関数の場合に、行列 P_c とヘッセ行列の逆行列 $C^{-1}(=[\nabla^2 f(\bar{\mathbf{x}})]^{-1})$ との積行列 $\tilde{V}=P_cC^{-1}$が満たすべき条件を与えるために、互いに独立な $n-l$ 個の方向ベクトル $\mathbf{d}_1、\mathbf{d}_2、\cdots、\mathbf{d}_{n-l}$ を考え、また

$$A\bar{\mathbf{x}}=\mathbf{b} \tag{27}$$

なる任意の $\bar{\mathbf{x}}$ とその摂動点 $\bar{\mathbf{x}}+\mathbf{d}_i$、$i=1、2、\cdots、n-l$ との勾配差を

$$\mathbf{y}_i=\nabla f(\bar{\mathbf{x}}+\mathbf{d}_i)^T-\nabla f(\bar{\mathbf{x}})^T、\ i=1、2、\cdots、n-l \tag{28}$$

とする。さらにこれらを行列にまとめて

$$D=[\mathbf{d}_1\ \mathbf{d}_2\cdots\mathbf{d}_{n-l}]、\quad Y=[\mathbf{y}_1\ \mathbf{y}_2\cdots\mathbf{y}_{n-l}] \tag{29a, b}$$

とおく。このとき次の定理が成り立つ。

<定理2>問題(23)において目的関数$f(\mathbf{x})$ は(4)式のような2次関数であるとする。このとき、

$$AD=O \tag{30}$$

を満たす$n \times (n-\ell)$行列D及びこれに対応した$n \times (n-\ell)$行列Y、さらにある$n \times n$対称行列$\tilde{V}$に対して

$$A\tilde{V}=0 \tag{31}$$

$$\tilde{V}Y=D \tag{32}$$

が成り立つならば、移動方向

$$\mathbf{s}=-\tilde{V}\nabla f(\bar{x})^T \tag{33}$$

に対する更新点$\tilde{x}=\bar{x}+\mathbf{s}$は問題(23)の最適点である。

この定理により、行列D、Yを用いて$n \times n$対称行列$\tilde{V}$を適当な行列から生成すれば、(26)式を直接計算しなくてもよいことがわかる。そして、このような行列$\tilde{V}$の生成法として、前章の並列ニュートン法とまった同じ更新式(10)を、

$$A\bar{V}=0 \tag{34}$$

を満たす$\bar{V}$に対して、

$$D^TY=\varepsilon^2 I_{n-\ell} \qquad I_{n-\ell}:(n-\ell)\times(n-\ell)\text{単位行列} \tag{35}$$

のもとで用いればよいことが容易に確かめられる。

以上の原理にもとづき、fが一般の非線形関数の場合に対する手順を構成すると次のようになる。

<並列準ニュートン射影法の一般手順>

ステップ1　制約式$A\mathbf{x}^1=\mathbf{b}$を満たす初期点$\mathbf{x}^1$と$AV^1=0$を満たす半正定値対称な初期近似行列V^1、終了判定正定数ηを与え$t=1$とする。

ステップ2　$A\mathbf{d}_i=0$を満たす互いに独立な$n-\ell$個の方向ベクトル$\mathbf{d}_i$、$i=1、2、\cdots、n-\ell$を用意する。

ステップ3

$$\left|\frac{\nabla f(\mathbf{x}^t)}{\|\nabla f(\mathbf{x}^t)\|}\cdot\frac{\mathbf{d}_i}{\|\mathbf{d}_i\|}\right|<\eta、\ i=1、2、\cdots、n-\ell$$

ならば、$\mathbf{x}^t$を最適解として計算を終了し、そうでなければ次ステップへいく。

ステップ4　(19a、b、c)と同じ漸化式（ただし$i=2、\cdots、n-\ell$、$j=1、2、\cdots、i-1$）により$\boldsymbol{\delta}_1{}^t、\cdots、\boldsymbol{\delta}_{n-\ell}{}^t$を計算し、やはり(20)式と同じ式（ただし$i=1、\cdots、n-\ell$）で、$\mathbf{d}_1{}^t、\cdots、\mathbf{d}_{n-\ell}{}^t$を生成し、これらを用いて行列$D^t=[\mathbf{d}_1{}^t\ \mathbf{d}_2{}^t\cdots\mathbf{d}_{n-\ell}{}^t]$をつくる。

ステップ5　基点$\mathbf{x}^t$からの$n-1$個の摂動点

$$\mathbf{x}_i{}^t=\mathbf{x}^t+\mathbf{d}_i^t、\ i=1、2、\cdots、n-\ell$$

と、基点$\mathbf{x}^t$との勾配差

$$\mathbf{y}_i{}^t=\nabla f(\mathbf{x}_i{}^t)^T-\nabla f(\mathbf{x}^t)^T、\ i=1、2、\cdots、n-\ell$$

を計算し、行列

$$Y^t=[\mathbf{y}_1{}^t\ \mathbf{y}_2{}^t\cdots\mathbf{y}_{n-\ell}{}^t]$$

を構成する。

ステップ6～ステップ8　並列準ニュートン法の一般手順のステップ6～ステップ8と同じ

並列準ニュートン射影法の手順において、並列準ニュートン法のそれと異なる点は、制約式を満たすように初期点$\mathbf{x}^1$を選ぶことと、$AV^1=0$を満たす対称行列V^1と、制約式を張る$n-\ell$個の摂動方向ベクトルを用意しなければならないことである。これらの作業は制約式の係数行列Aの形によっては容易ではない。このような場合、問題(23)に人工変数を導入して変換して解く手法を文献(10)で言及しているので参照されたい。

また並列準ニュートン射影法の数値実験については、たとえ並列計算機による並列処理を実行しなくても、勾配射影法との比較では無論のこと、問題の規模が比較的大きければ、ニュートン射影法や準ニュートン射

影法と比較しても、かなりの計算時間の短縮化が確認されている。これらの結果もやはり文献10）を参照されたい。

4. おわりに

並列計算可能な非線形最適化計算のうち、筆者らの研究グループにより開発した、並列準ニュートン法と並列準ニュートン射影法とよばれる二つの手法を紹介した。これらはいずれも、たとえ並列処理をおこなわず、通常の計算機の逐次的処理を実行しても、従来の手法と比較し十分効率的であることが確認されている。したがって試行点の複数方向への摂動計算、複数摂動点での勾配計算という、本質的に並列性を有するステップの並列計算を実行するだけではなく、グラムシュミット法の並列処理化、行列型更新公式の行列演算の並列化もあわせて実行すれば、一層の計算効率の向上が期待される。原理的には並列稼動可能なプロセッサの数が多ければ多いほど、いくらでも計算時間の短縮化が可能といえる。しかし、実際には並列計算機と称して、様々なタイプのアキテクチャを有するものが開発されており[11]、またプロセッサ間の同期取りやデータ交換など、計算処理時間以外の時間も考慮に入れなければならない。このため単に理論的な考察ばかりではなく、各種の並列計算機を用いた数値実験による、実証的な考察も今後積み重ねていく必要があると思われる。

なお、非線形最適化の並列計算に関しては、文献12）でも幅広い解説がなされているので参照願いたい。

参考文献

1） F. Slobada：Parallel Method of Conjugate Directions in Minimization, Aplikace Matematiky, Vol. 20, p. p. 436-446(1975)

2） D. Chazen and W. L. Miranker：A Nongradient and Parallel Algorithm for Unconstrained Minimization, SIAM J. Control, Vol. 8, p. p. 207-217(1970)

3） C. Sutti：Nongradient Minimization Methods for Parallel Processing Computers, Parts 1 and 2, J. Optimization Theory and Applications, Vol. 39, 465-488(1983)

4） H. Mukai：Parallel Algorithms for Unconstrained Optimization, Proc. of the 18th IEEE Conf. Decision and Control, p. p. 451-454(1979)

5） 相吉、杉内：非線形最適化の並列計算手法、計測と制御、Vol. 29、p. p. 1070-1076(1990)

6） T. A. Straeter：A Parallel Variable Metric Optimization Algorithm, NASA Technical Note, D-7329(1973)

7） P. J. M. van Laarhoven：Parallel Variable Metric Algorithms for Unconstrained Optimization, Mathematical Programming, Vol. 33, p. p. 68-81(1985)

8） 山田、相吉：群共役性を用いた並列準ニュートン法、計測自動制御学会論文集、Vol. 25, p. p. 482-489(1989)

9） 相吉、山田：等式制約条件つき最適化問題に対する並列準ニュートン法、計測自動制御学会論文集、Vol. 25, p. p. 1347-1354(1989)

10） 相吉、丹内：線形等式つき最適化問題に対する並列準ニュートン射影法、計測自動制御学会論文集、Vol. 27, No. 12(1991)(刊行予定)

11） 村岡、ほか（編）：並列コンピュータ・アーキテクチャ、bit 臨時増刊、Vol. 21, No. 4(1989)

12） 福島：非線形最適化における並列アルゴリズム、システム／制御／情報、Vol. 34, p. p. 223-231(1990)