

非線形最適化問題解法ソフトウェアASNOP

高橋 悟・宮田 雅智・本郷 茂・矢部 博・八巻 直一

1. はじめに

1950年代以降、急速に発展した応用数学の分野に、数理計画法と呼ばれる一連の理論があります。数理計画法は、自然科学や社会科学あるいは実業の世界でのさまざまな現象を数学的モデルで表わし、人間のとるべき方策を数理的に最適化することをめざすものですが、近年のコンピュータの発達と相まって、次第に実用化が進んでいます。

なかでも有名なのが線形計画法であり、すでに理論的にも十分研究がなされ、広く実用化されているのはご承知のとおりです。一方、数学的モデルが非線形になると格段に難しくなります。しかし、特にこの数十年の間に非線形最適化問題に対する有効な数値解法の研究が進み、今や十分実用に耐え得るところまできたと考えられます。しかしながら、いまのところ直ちに応用面への速やかな普及につながっているとはいえず、今後は、実用的で汎用性の高いソフトウェアの整備が課題となりましょう。(既存のソフトウェアについては[8]を参照してください)

ASNOP [アスノップ]

(Application System for Nonlinear Optimization Problems) は、このような問題意識が動機となって、青山学院大学附属情報科学研究センターにおいて1982年から開発が進められてきました。その間、数としては決して多いとはいえないユーザではありますが、それでもいくつかの実用経験の機会があり、広い潜在的需要の存在を確信するとともに、多くの改良点を発見しました。そこで、パソコン上で動くことが可能な、新しい考え方の

パッケージとして開発し直すことが計画されました。

さらにわれわれは、1986年以降、新しいASNOPの東京大学大型計算機センターへの移植にも着手しました。新しいパッケージは1988年初頭に ver. 1が完成し、東京大学大型計算機センターでのユーザへの公開も1988年春に実現しました[7]。

以下では、ASNOPが採用した最適化手法とシステムの概要について簡単に紹介します。

2. 最適化問題の定義

ASNOPで取り扱う問題は、問題中のいずれかの関数が非線形であるものが対象ですから、ここでは問題を非線形最適化問題 (NLP: NonLinear Programming problem) と呼ぶことにします。

最適化問題は、最も一般的に次のように表わすことができます。

(NLP)

$$X \in R^n, f: R^n \rightarrow R, g_i: R^n \rightarrow R, i=1, \dots, m, \\ h_j: R^n \rightarrow R, j=1, \dots, l$$

のとき、

$$g_i(x) \leq 0, i=1, \dots, m \text{ [不等号制約条件]}$$

$$h_j(x) = 0, j=1, \dots, l \text{ [等号制約条件]}$$

のもとに、目的関数 $f(x)$ を最小にする点 x^* を求めよ。

NLPにおいて、目的関数と制約関数のすべてが線形のとき、上記の問題は、線形計画問題 (LP: Linear Programming problem) となります。目的関数が2次関数であって、制約関数が線形である場合は、2次計画問題 (QP: Quadratic Programming problem) になります。

社会科学などの分野では、数学的モデルとしてQPを想定することが、自然で現実的である場合が多いようです。QPの数値解法には、LPほどではありませんが、いくつかの有力な方法が確立されていて、実用化されています。

実験式の当てはめ問題などにおいては、データとモデ

たかはし さとる 東京理科大学 理学部
みやた まさのり 青山学院女子短期大学*
ほんごう しげる 専修大学 経営学部
やべ ひろし 東京理科大学 工学部
やまき なおかず システム計画研究所(株)

*〒150 渋谷区渋谷4-4-25

ルとの誤差の2乗和を最小化します。すなわち最小2乗問題です。このような問題を非線形最小2乗問題(NLS: Nonlinear Least Squares problem)とといいます。

3. ASNOPにおける最適化手法

ASNOPは、次の3つの手法から構成されています。

(I) 逐次2次計画法

(SQP: Sequential Quadratic Programming method);

Han(1976)やPowell(1978)によって開発された数値解法です。ASNOPに組み込まれた手法はHan[3]にしています。逐次2次計画法は、制約条件のない最適化問題における準ニュートン法の原理を、制約のある最適化問題に上手に取り入れることによって、優れた性能の実現をねらった数値解法と解釈されます。

逐次2次計画法のアイデアは、1960年代までさかのぼることができますが、1970年代にいたるまでは、さほどの発展はみられませんでした。その後1970年代の後半になって、急速に研究がすすみられ、現在では制約条件付き最適化問題の数値解法として、最も有力な手法の1つであるといえるでしょう。逐次2次計画法では、名称からも想像されるように、2次計画問題(QP)が重要な意味をもっています。すなわち、近似解を最適解に接近させるさいに、QP問題を解くことが要請され、そのことがまたいくつかの優れた特質にもつながっていると考えられます。

ASNOPでは、QPの解法にGoldfarb and Idnani[2]の方法が採用されており、さらに計算量を下げるようなアルゴリズム上の工夫がされています([6])。

(II) 最小2乗問題のための逐次2次計画法;

Hanの逐次2次計画法とDennis, Gay and Welsch[1]の制約条件のない非線形最小2乗問題の数値解法を組み合わせた手法を採用しています。Dennis, Gay and Welschの方法は、残差の小さい問題に対してのみならず、非線形性の強い問題にも良い性能を発揮します。

Dennis, Gay and Welsch法に代表されるように、制約条件のない最小2乗問題の数値解法はかなり研究されており、有力な手法がいくつも提案されているものの、制約条件付き最小2乗問題に対する数値解法はまだまだ研究途上にあると思われます。Takahashi, Yamaki and Yabe[6]は、制約条件付き最小2乗問題の特性を考慮した逐次2次計画法を提案しました。この方法は、制約のない場合はDennisらの方法に帰着し、制約条件の

ある場合は逐次2次計画法となります。

(III) 拡張ラグランジュ乗数法

(AGL: Augmented Lagrangian Multiplier Method);

Hestenes(1969)によって提案された手法です。ASNOPに組み込まれた手法は今野, 山下[5]にしています。制約条件付き最適化問題の数値解法の代表的なアイデアの1つに、ペナルティ関数法があります。ペナルティ関数法は、与えられた問題を制約条件のない最適化問題に変換し、制約条件のない最適化の手法を用いるものです。ペナルティ関数法は、ペナルティ・パラメータの値が大きくなる(あるいは小さくなる)につれて、変換された最適化問題の条件が悪くなって、数値的に解きにくくなるという欠点をもっています。

それに対して、拡張ラグランジュ乗数法はそのような欠点を改良して、ペナルティ関数法の良い点をそのまま保持している手法であるといえましょう。ASNOPでは、制約条件のない最小化の手法として、準ニュートン法を採用しています。

4. システム概要

汎用アプリケーションプログラムと呼ばれているものの多くは、入力パラメータ解析、問題の解法、計算結果の出力などの処理を行なう多くのモジュールプログラムを一体化し、利用者からみるとブラックボックスの形式をとっている場合が多く見られます。この方式は解法の選択やパラメータの設定などがかなり柔軟にでき、1つの問題に対し、解法やパラメータをいろいろ変化させながら処理するには大変便利であると思われます。反面システムに手を加えることは、まず不可能であるし、当面の処理に不必要なモジュールをもすべて含んだ形で実行時システムを準備するため、システム全体が大きくなり、処理効率に無駄を生じることになります。

ASNOPでは、初期のプログラムの経験を踏まえて以下の3点を、新しいプログラムのコンセプトとしました。

(I) プリプロセッサ方式とした

FORTRANのソースプログラムを生成するプリプロセッサを用意して、特定の問題向けのプログラムをソースの形式で利用者に提供する構造としました。すなわち、システムが準備した数多くの部品(ソースコードを生成するときの材料)の中から、解決したいモデルに必要なものを利用者がコマンドによって選び、そのモデルに最

適なシステムを生成します。いってみればイージーオーダー式のアプリケーションシステムであるといえましょう。

ASNOPシステムは、すべて FORTRAN77で記述されています。利用者は、システムが用意したコマンドを使ってモデルを記述します。ASNOPプリプロセッサはこれを解釈し、必要な部品を部品箱から抜き取ります。さらに、目的関数や制約条件式など利用者が記述した FORTRAN プログラムを組み込み、必要最小限度の FORTRAN のソースプログラムによる最適なシステムを生成します。

したがって、利用者はできあがったソースプログラムをコンパイル、リンクし実行する必要があります。この流れを図式化すると図1のようになります。

このシステムでは、処理のたびにコンパイルとリンクが必要であり、気軽に解法やパラメータを変更することはできません。しかし、実行時の動作には極力無駄を省いてあるので、処理効率を上げることができるでしょう。

(II) 研究者を主な利用者として想定した

ASNOPは、最適化問題を解く必要があれば、誰にでも利用できますが、プログラムの構造や利用者コマンドのスタイルは、利用者として主に研究者を想定したものとなっています。そのため他の同様なソフトウェアに比べて利用者コマンドの記述は、やや煩雑な面があるかもしれませんが、反面解法の細かな制御指定が可能となります。この種のプログラムを用いるとき、データの入力や結果の出力が利用者の都合によって自由にならないで困る場合がしばしばありますが、ASNOPのプログラム構造はこのような自由度を利用者に提供するように考えられています。すなわち、たとえば、必要なデータの入力部等を自由に FORTRAN プログラムに置き換えても、変数の参照やプログラムの流れとの整合性を保つように構成されています。

また、イージーオーダー式のシステムのよい点は、理論やアルゴリズムの研究者が、新しい方法を1つの部品としてシステムに追加して、比較的容易にそれを実験することができることであります。その場合プログラムは特定の問題向きの効率的なものとなります。

(III) プログラムの発展性を確保する

非線形最適化法のアルゴリズムの研究は、現在急速に進みつつあります。将来はさらに大きく発展するでありましょう。したがって、現ASNOPに収納されている解

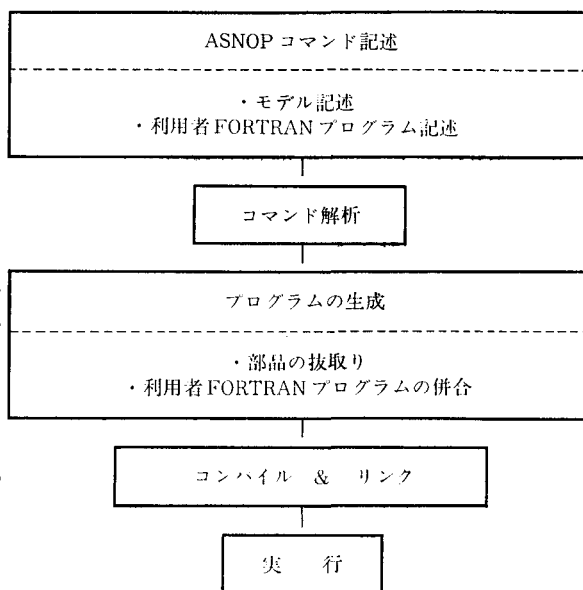


図1 処理の流れ

法もたちまち陳腐化すると思わなければなりません。このような背景を考えると、解法の追加や改良が容易に行なえ、それを利用者に速やかに提供することがぜひ必要でしょう。そのためには、ASNOPの維持体制と新しい研究成果の絶えざる吸収が条件となりますが、ASNOPのプログラム構造によって、少なくとも追加改良の容易性は確保されているものと思われます。維持体制、研究体制となるといささか心配ではありますが、できるだけ努力を続ける覚悟であります。

5. おわりに

現在の ASNOP は、かなりな性能をそなえてはいますが、まだまだ改善すべき点が多く存在します。たとえば自動微分の機能(数式処理によるものや、伊理・久保田[4]の高速自動微分法によるものなど)、数式の入力および表示機能、さらには問題の分析を行なって最良の解法を利用者に助言するような機能などが考えられます。

今後は、より多くの研究者の皆様にお使いいただき、研究の一助となることを切望するとともに、不備な点をご指摘いただき、より良いものにしていきたいと考えております。

なお ASNOP は、MS-DOS と FORTRAN77 コンパイラが用意されていれば実行可能ですが、コンパイラにはたとえば MS-FORTRAN VER. 4.0 程度のレベルが必要です。

最後になりましたが、このソフトウェアに対して格別の評価をいただきました、OR学会とレフェリーの方々に感謝いたします。

参 考 文 献

- [1] Dennis, J. E., Jr., Gay, D. M. and Welsch R. E.: An adaptive nonlinear least squares algorithm. *ACM Transactions on Mathematical Software*, Vol. 7, No.3 (1981), 348-368.
- [2] Goldfarb, D. and Idnani, A.: A numerically stable dual method for solving strictly convex quadratic programs. *Mathematical Programming*, Vol.27 (1983), 1-33.
- [3] Han, S. P.: Variable metric methods for minimizing a class of nondifferentiable functions, *Mathematical Programming*, Vol. 20 (1981), 1-13.
- [4] 伊理正夫, 久保田光一: 高速微分法とその応用. 第7回数値計画シンポジウム論文集, 1986, 159-184.
- [5] 今野浩, 山下浩: 非線形計画法, ORライブラリー, 6, 日科技連, 1978.
- [6] Takahashi, S., Yamaki, N. and Yabe, H.: Some modifications of sequential quadratic programming method for constrained optimization. *TRU Mathematics*, Vol.23, No.2 (1987), 281-295.
- [7] 高橋悟, 本郷茂, 矢部博, 宮田雅智, 八巻直一: 非線形最適化問題のためのアプリケーション・システム(ASNOP利用の手引, Ver. 1, Rev.3). 東京大学大型計算機センター, 1988.
- [8] Waren, A. D., Hung, M. S. and Lasdon, L. S.: The status of nonlinear programming software-An update. *Operations Research*, Vol. 35, No.4 (1987), 489-503.

R-88-1

「南米諸国とのOR交流視察団」報告書

—第11回IFORS会議を中心として—

1987年8月10日から14日まで、アルゼンチンのブエノスアイレスで第11回IFORS国際会議が開催されました。南半球で開催されたのはこれが初めてのことです。日本オペレーションズ・リサーチ学会では3年毎に開かれる同会議に参加し、あわせて開催地近隣の諸国でのOR実施状況等の調査、相互の情報交換を目的とした視察団を派遣してまいりました。欧米のように情報が十分とは言えない南米のことですから、訪問先の選定や交渉も思うに任せない状態でしたが、ブラジルOR学会、日本IBM、それにサンパウロ在住の邦人などの骨折りで、南米におけるOR活動、OR教育、計算機利用などの一端を見ることができました。また、訪問国であるアル

ゼンチン、ブラジル、メキシコの3国はまったくお国柄の異なるところでした。

このたび、同視察団の報告書が出版されましたので、ご購入くださいますようご案内申し上げます。

内容は、

1. 第11回IFORS国際会議
2. IFORS研究発表から
3. 企業訪問
4. 旅行記
5. 座談会

となっています。B5判46ページです。会員価格1部1,200円(送料別)で販売いたします。学会事務局へお申し込みください。