

九州大学 海洋システム工学専攻

システム設計特論（木村）
講義資料

5) 非線形最適化(勾配法)

場所: セミナ一室

【最適化とは？】

「評価」を適切に定義していない例：
工場において、生産コストを最小化する運転方法
→工場を閉鎖して生産をストップ

「最も**良い状態**になるように、**手段や方法**を考えて行動すること」

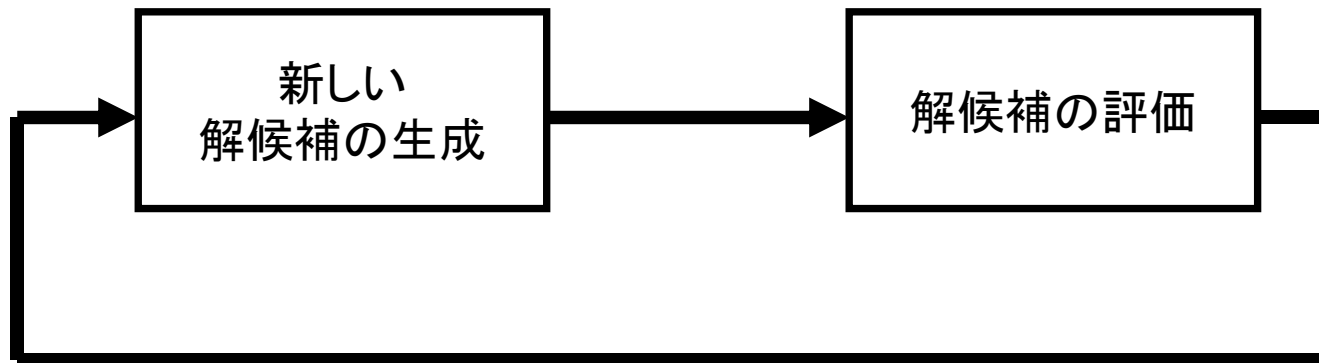
解候補 — — — 評価値

例) 製品のデザイン — — — 売上げ高
船の形状 — — — 推進抵抗

最適化以前に、
その目的である
「評価」を定義
することが重要

モデル化に関連

一般的な最適化のプロセス：



以前の解候補の評価値を参考にして、より有望な解候補を生成することで解候補を改善していく

【最適化とは？】

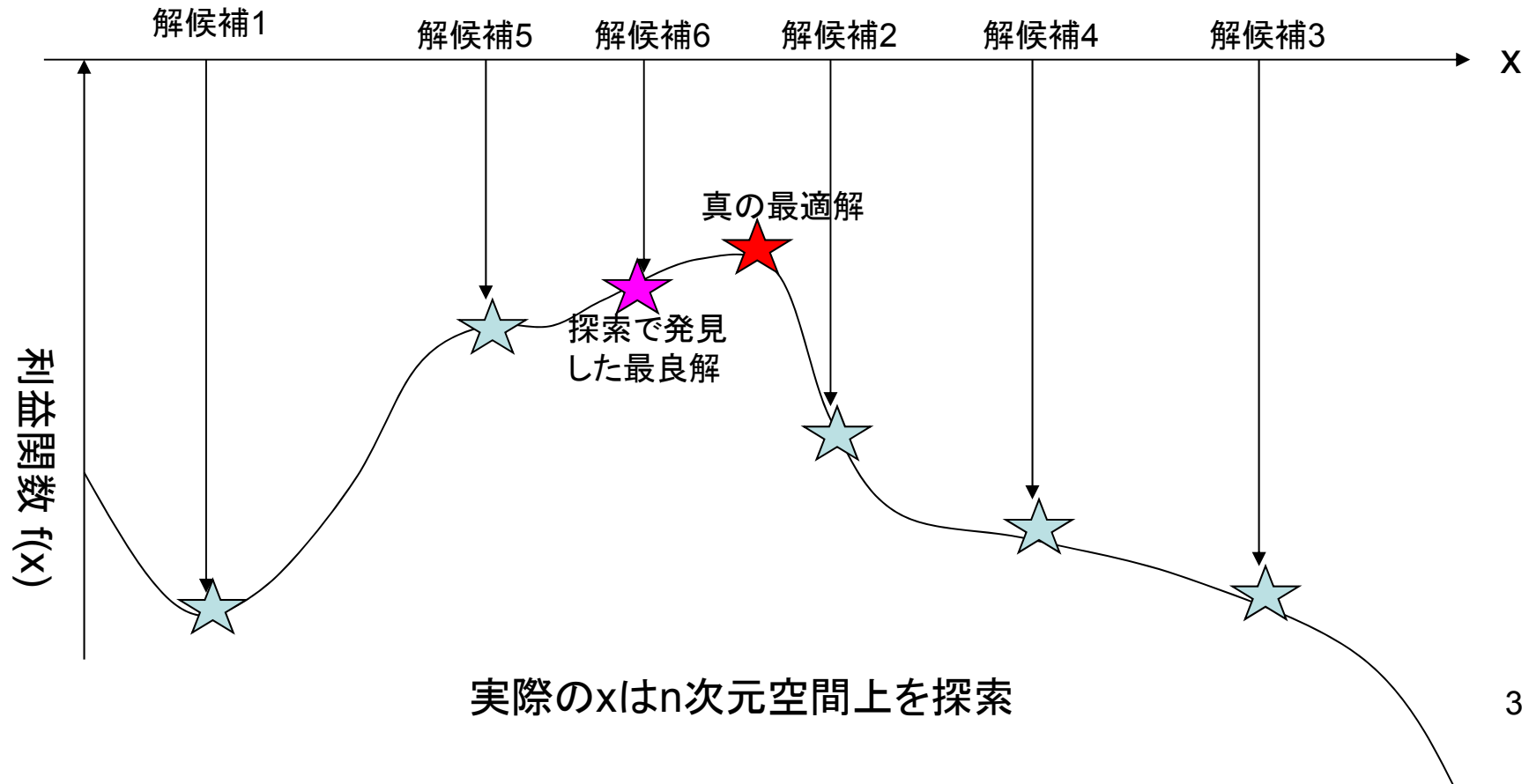
1) 連続関数最適化問題

例： 石油を汲み上げるための油井を掘る

油を含む地層が最も地上に近い部分を掘ると利益が最大になる

予算の都合で、試掘の回数が制限される

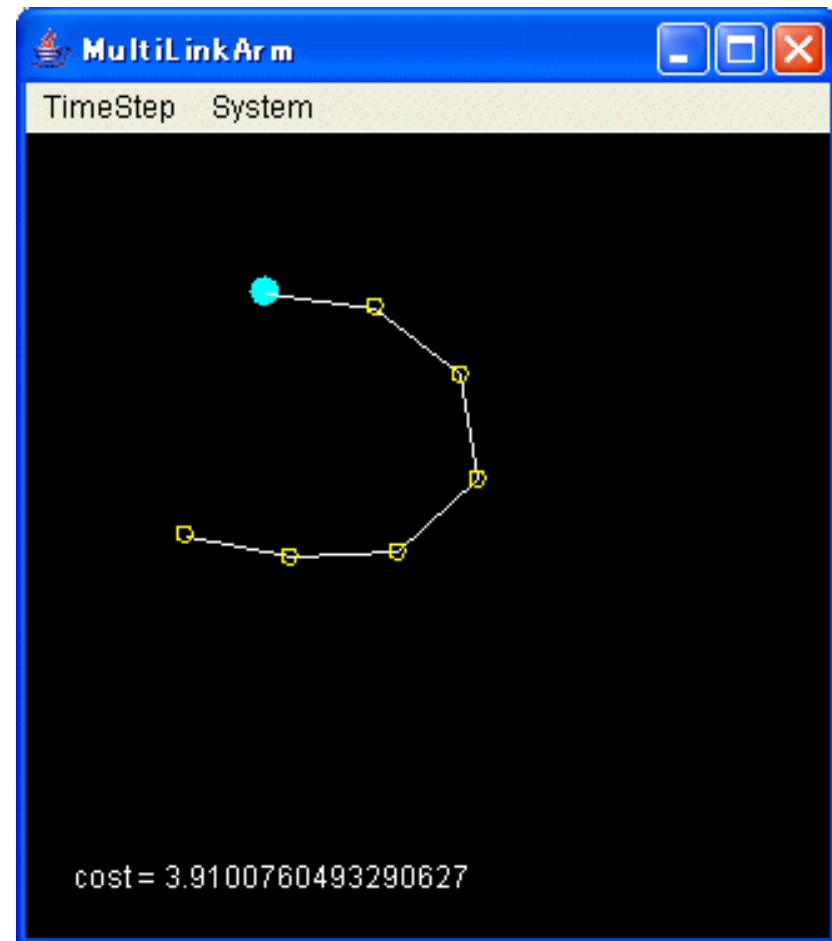
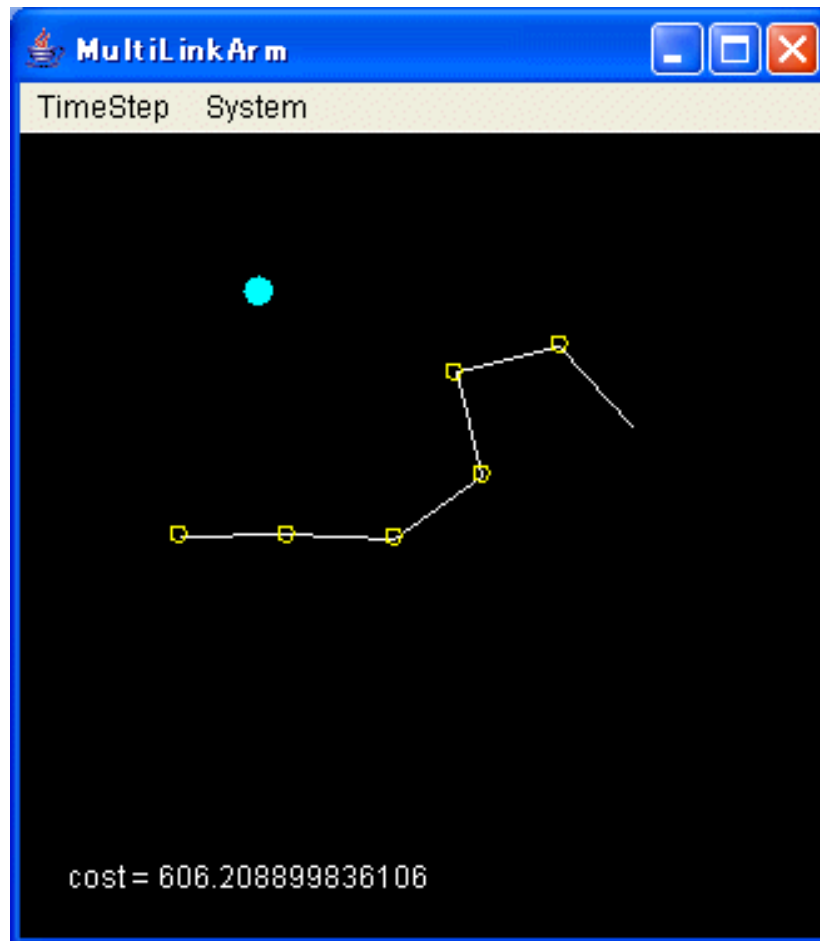
→ 限られた試掘回数(6回)の範囲内で、最も地上に近い油層を探索する



【例：冗長自由度アームのリーチング問題】

- 各関節の角度をパラメータとして、アーム先端がターゲット座標に一致するパラメータを求める問題。ただし、各関節はリンク同士を±90度以内で繋ぐ制約があるので、なるべく関節の可動角度中央付近の角度にすることが好ましい。

コスト関数 = (アーム先端座標とターゲット座標の偏差の2乗)
+ (各関節の可動中央角度からの偏差の2乗)

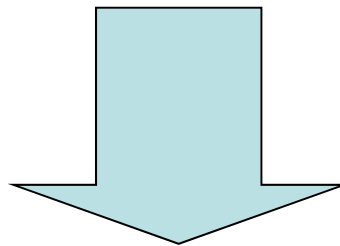


10個のパラメータを持つ問題において、各パラメータが0～1の区間の値をとるものとして、各パラメータを0.1刻みで全てのパラメータの組合せを評価すると、評価回数は11の10乗、これをおおよそ10の10乗で近似しても、10,000,000,000（百億）回必要になる。

かなり粗い

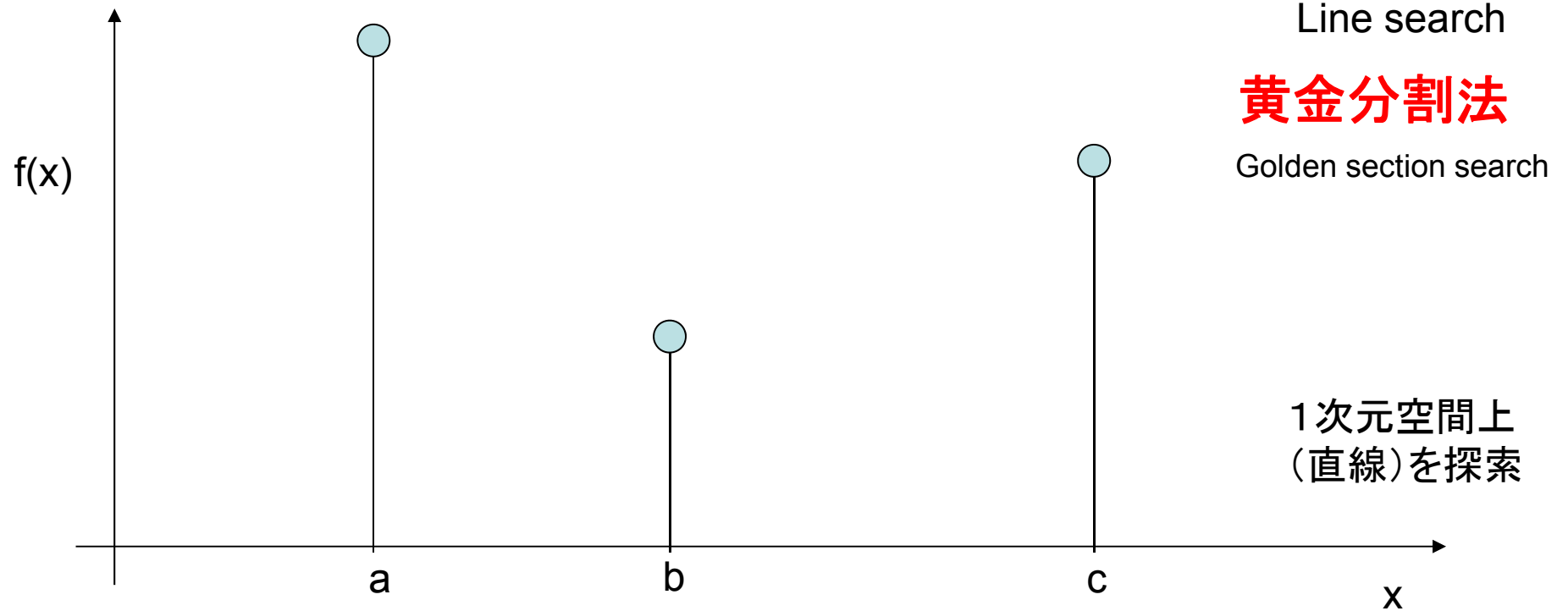
10個のパラメータを持つ問題において、各パラメータが0～1の区間の値をとるものとして、各パラメータを0.1刻みで全てのパラメータの組合せを評価すると、評価回数は10の10乗、これをおおよそ10の10乗で近似しても、10,000,000,000（百億）回必要になる。

1回の評価に1秒かかるものとする、計算には317年を要する



パラメータの探し方(探索方法)を工夫しなければ
答えを見つけることができない

【制約のない関数最適化】1次元の最小化: ラインサーチ



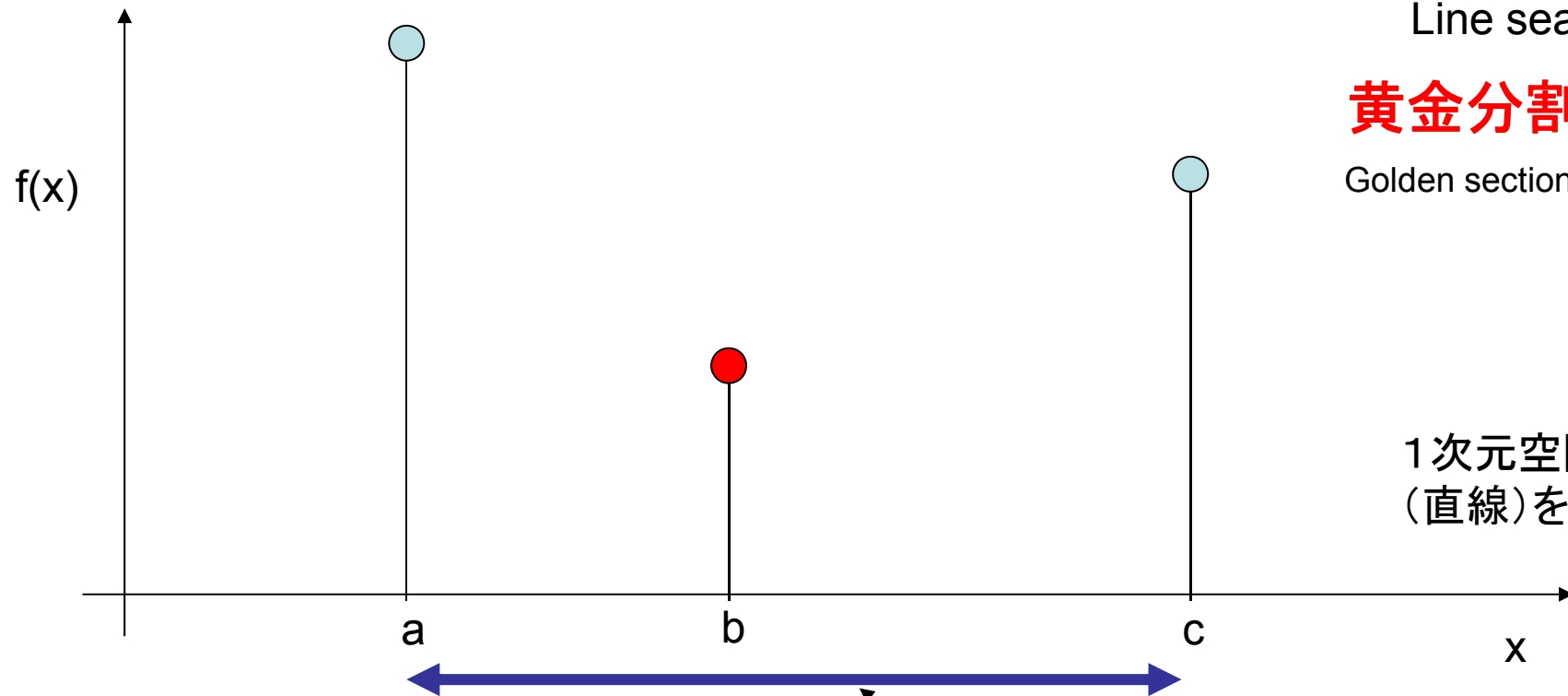
- 1) $a < b < c$ の3点をとる $f(b)$ が最小なら、区間 $[a, c]$ に必ず極小がある。
- 2) $[b, c]$ の区間で新しい点 x をとり、 $f(x)$ を計算する。
- 3) $f(b) < f(x)$ なら、 $a < b < x$ に狭められた範囲に極小がある
 $f(x) < f(b)$ なら、 $b < x < c$ に狭められた範囲に極小がある

【制約のない関数最適化】1次元の最小化: ラインサーチ

Line search

黄金分割法

Golden section search



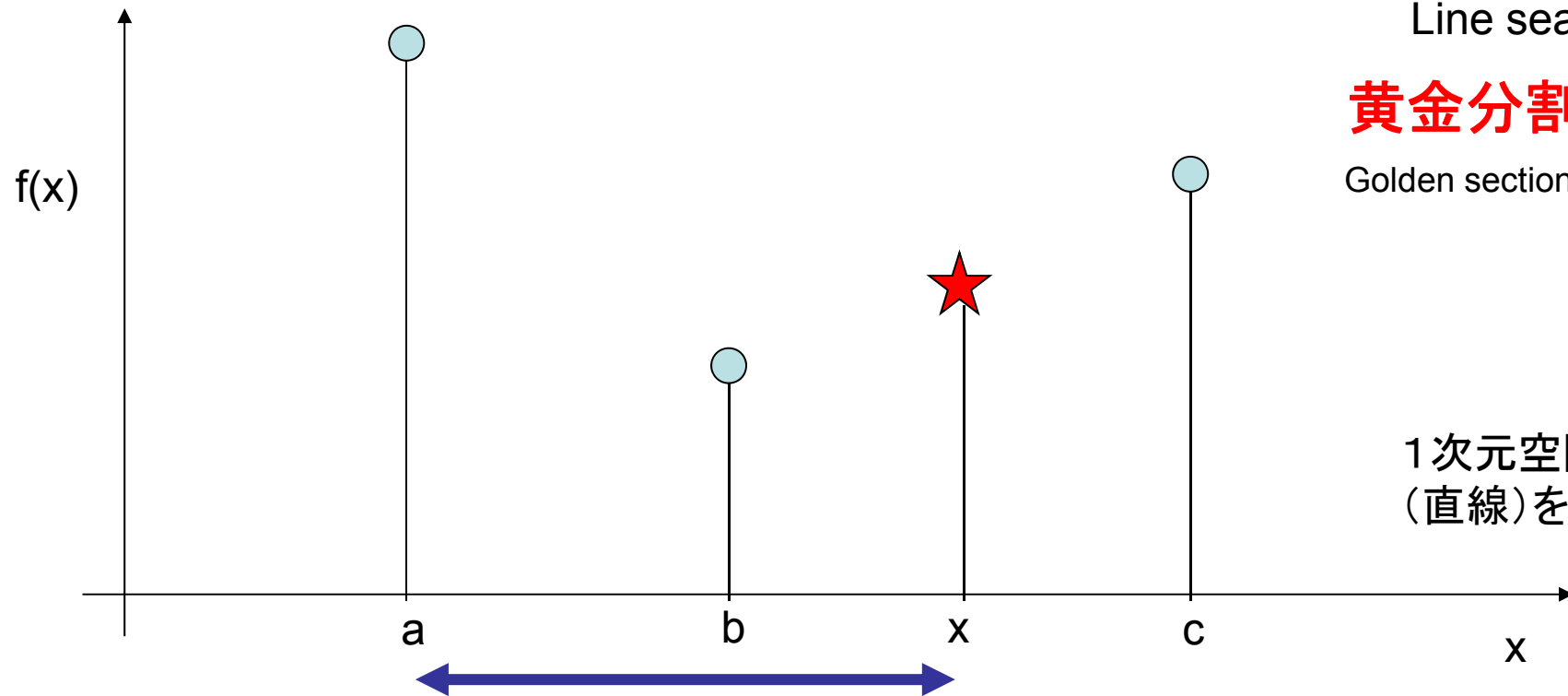
- 1) $a < b < c$ の3点をとる $f(b)$ が最小なら、区間 $[a, c]$ に必ず極小がある。
- 2) $[b, c]$ の区間で新しい点 x をとり、 $f(x)$ を計算する。
- 3) $f(b) < f(x)$ なら、 $a < b < x$ に狭められた範囲に極小がある
 $f(x) < f(b)$ なら、 $b < x < c$ に狭められた範囲に極小がある

【制約のない関数最適化】1次元の最小化:ラインサーチ

Line search

黄金分割法

Golden section search



1次元空間上
(直線)を探索

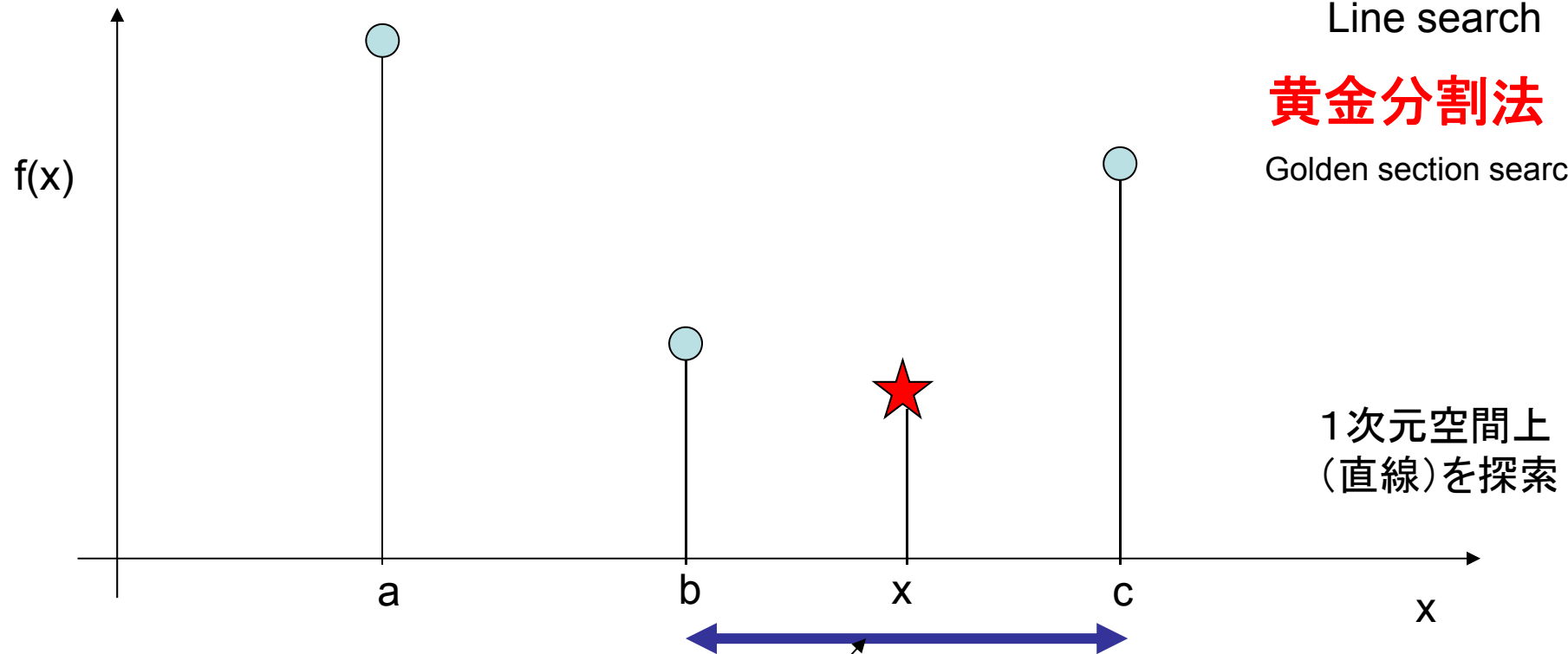
- 1) $a < b < c$ の3点をとる $f(b)$ が最小なら、区間 $[a, c]$ に必ず極小がある。
- 2) $[b, c]$ の区間で新しい点 x をとり、 $f(x)$ を計算する。
- 3) $f(b) < f(x)$ なら、 $a < b < x$ に狭められた範囲に極小がある → a, b, x を a, b, c に置換
 $f(x) < f(b)$ なら、 $b < x < c$ に狭められた範囲に極小がある

【制約のない関数最適化】1次元の最小化: ラインサーチ

Line search

黄金分割法

Golden section search



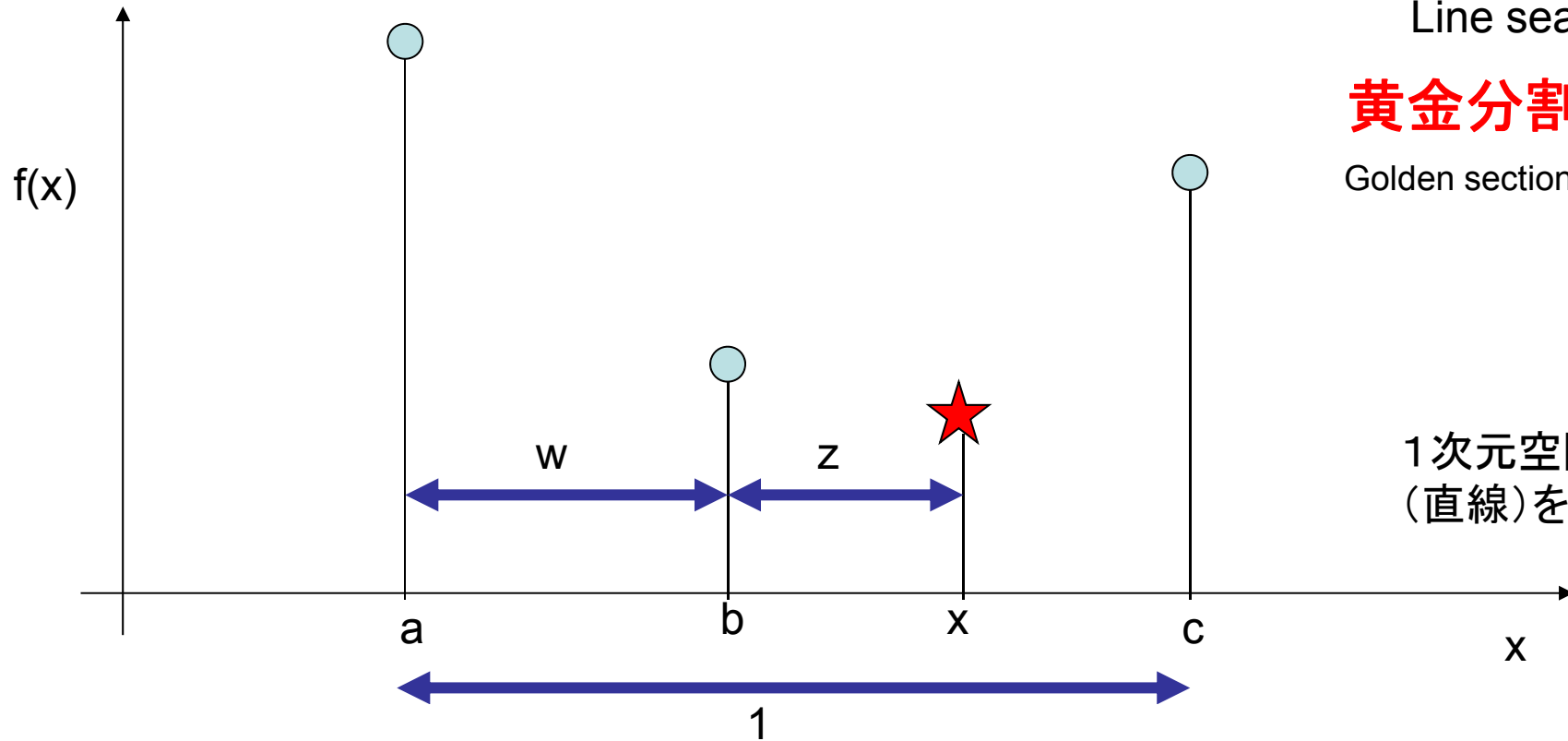
- 1) $a < b < c$ の3点をとる $f(b)$ が最小なら、区間 $[a, c]$ に必ず極小がある。
- 2) $[b, c]$ の区間で新しい点 x をとり、 $f(x)$ を計算する。
- 3) $f(b) < f(x)$ なら、 $a < b < x$ に狭められた範囲に極小がある
 $f(x) < f(b)$ なら、 $b < x < c$ に狭められた範囲に極小がある → b, x, c を a, b, c に置換

【制約のない関数最適化】1次元の最小化: ラインサーチ

Line search

黄金分割法

Golden section search



b や x をどのように決めるか？

次の新しい区間長は $w+z$ または $1-w$ 。これらを等しくすると $z = 1 - 2w$

区間 $[b,c]$ に対する x の位置関係は、区間 $[a,c]$ に対する b の位置関係に等しい



これらの連立方程式を解くと、



$$w = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}$$

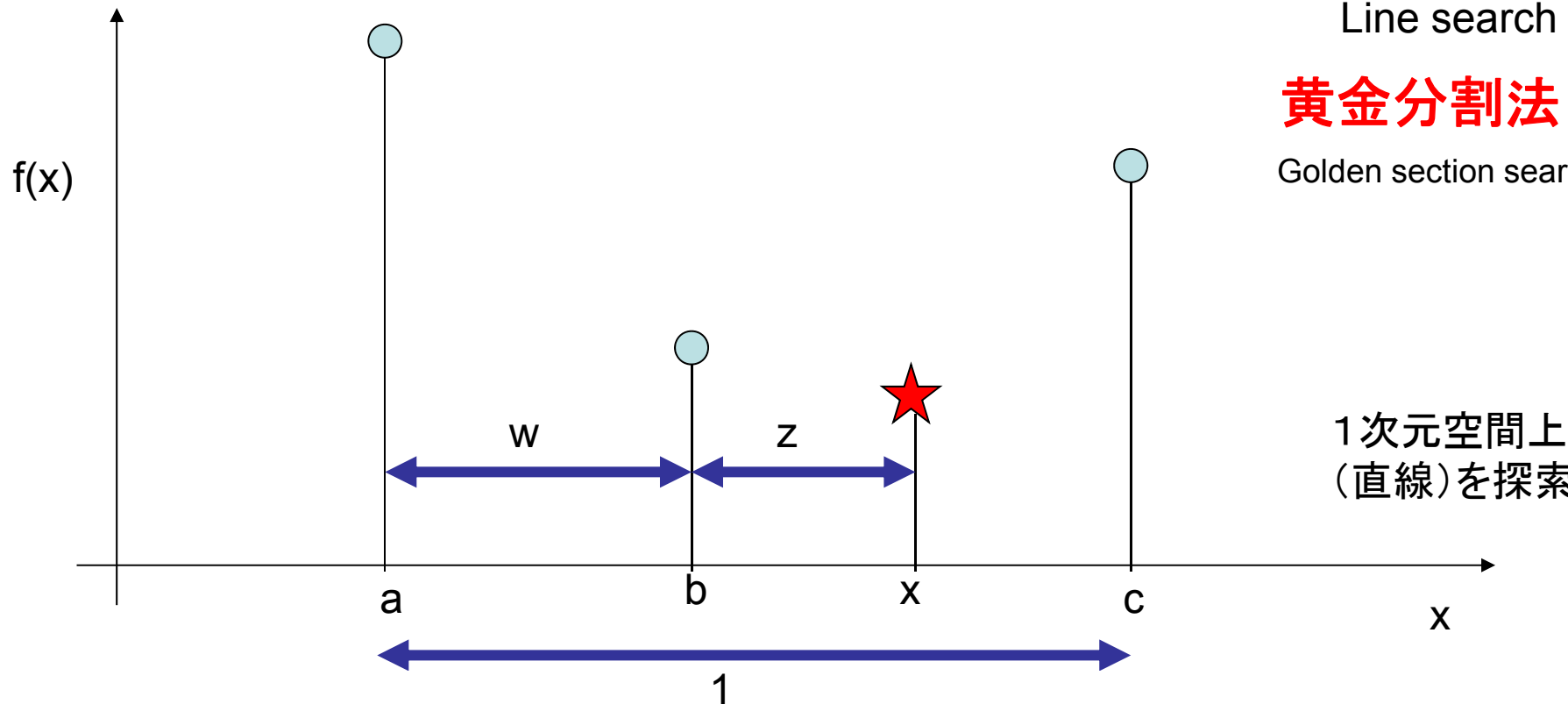
黄金比 ¹¹
Golden section

【制約のない関数最適化】1次元の最小化: ラインサーチ

Line search

黄金分割法

Golden section search



b や x をどのように決めるか？

次の新しい区間長は $w+z$ または $1-w$ 。これらを等しくすると $z = 1 - 2w$

区間 $[b,c]$ に対する x の位置関係は、区間 $[a,c]$ に対する b の位置関係に等しい

$$1 : w = (1 - w) : z$$

これらの連立方程式を解くと、

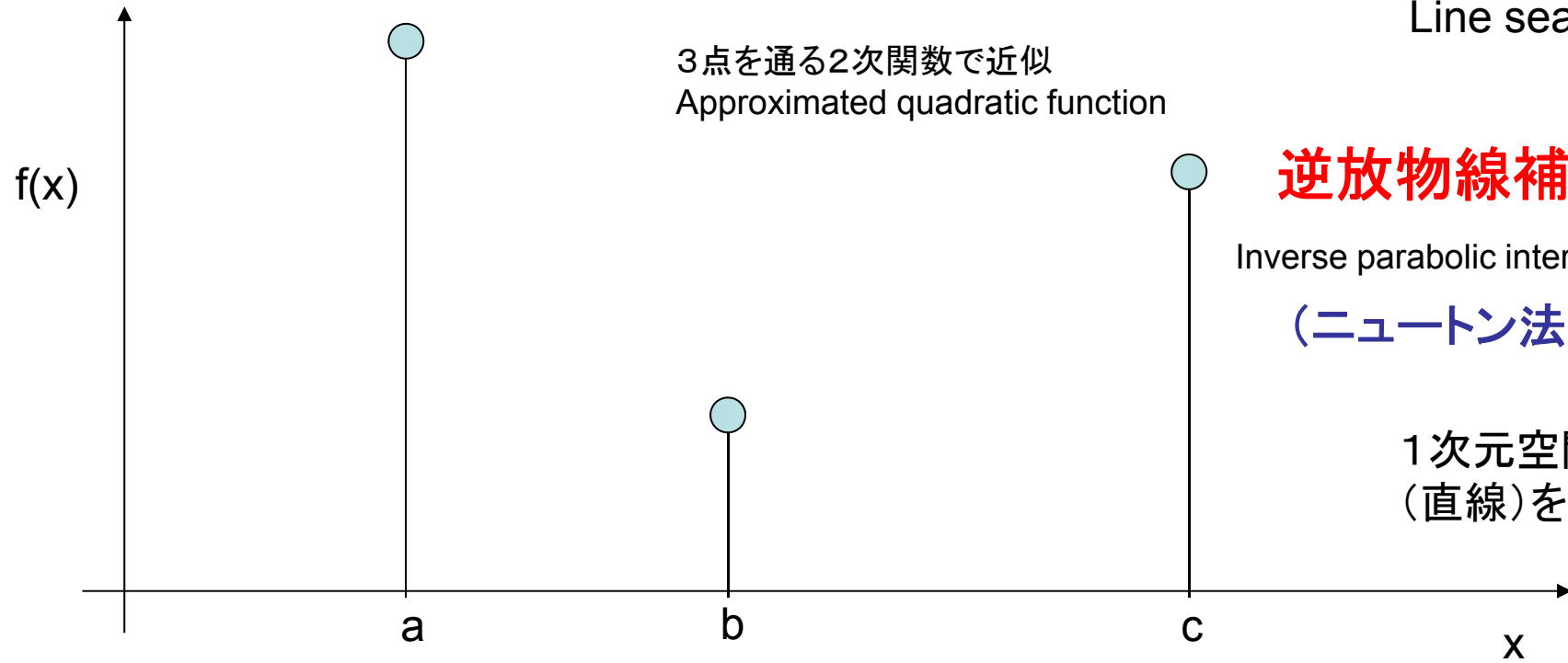
$$w^2 - 3w + 1 = 0$$

$$w = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}$$

黄金比 ¹²
Golden section

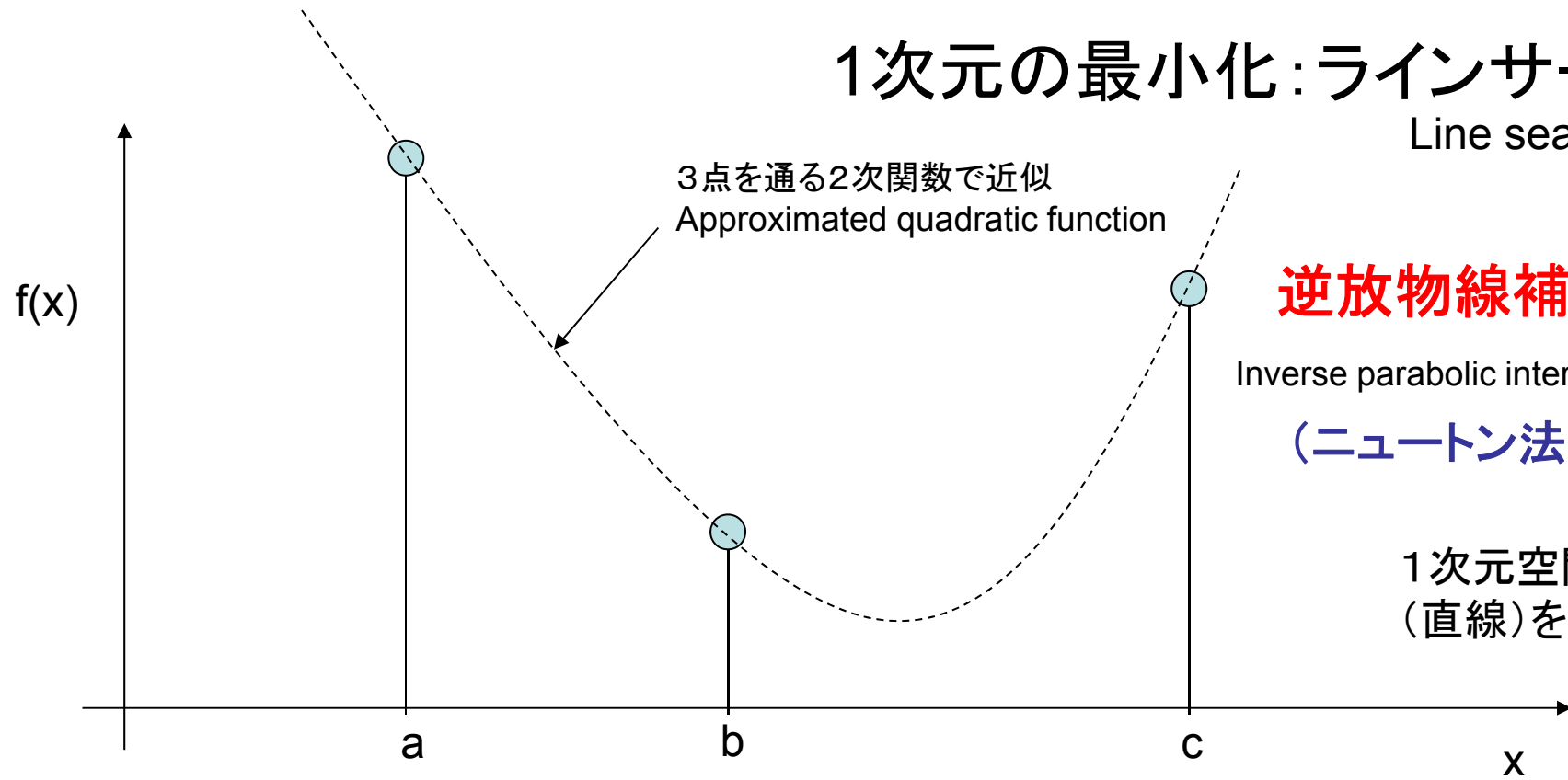
1次元の最小化: ラインサーチ

Line search



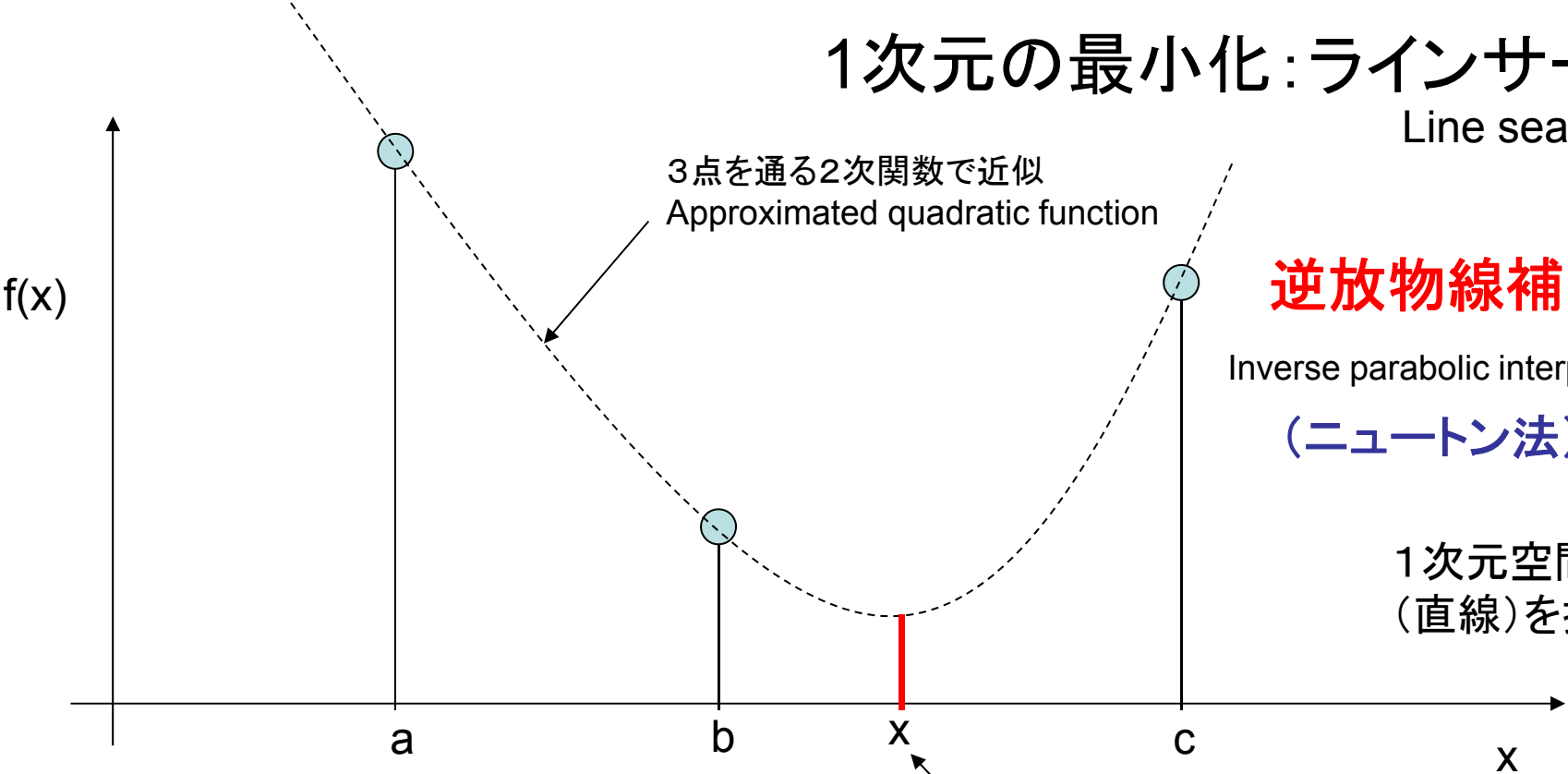
1次元の最小化: ラインサーチ

Line search



1次元の最小化: ラインサーチ

Line search



3点を通る2次関数で近似
Approximated quadratic function

逆放物線補間

Inverse parabolic interpolation

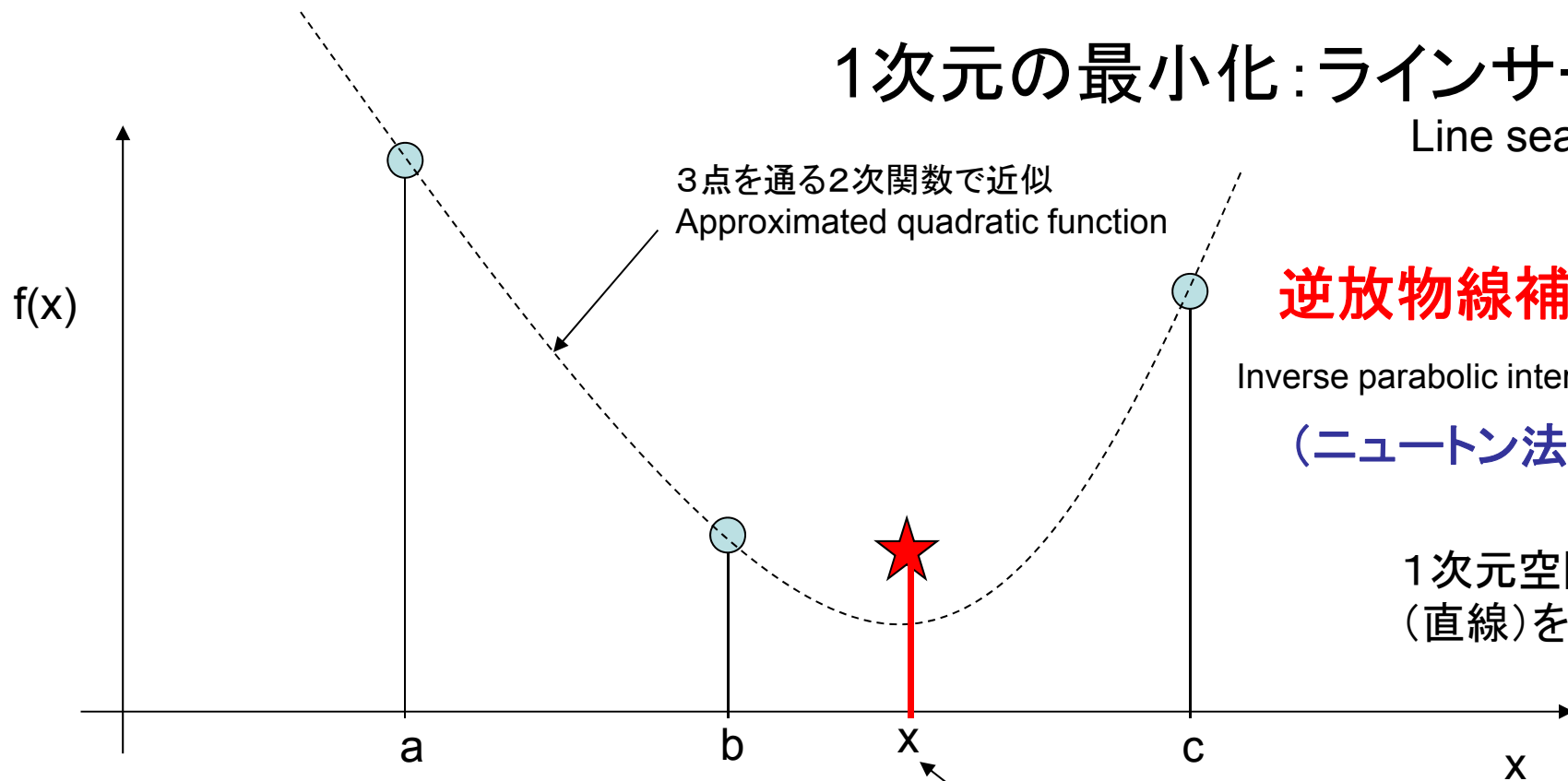
(ニュートン法)

1次元空間上
(直線)を探索

近似した2次関数の極小をサーチ
Search this point where gradient of the approximated function is zero.

1次元の最小化: ラインサーチ

Line search



逆放物線補間

Inverse parabolic interpolation

(ニュートン法)

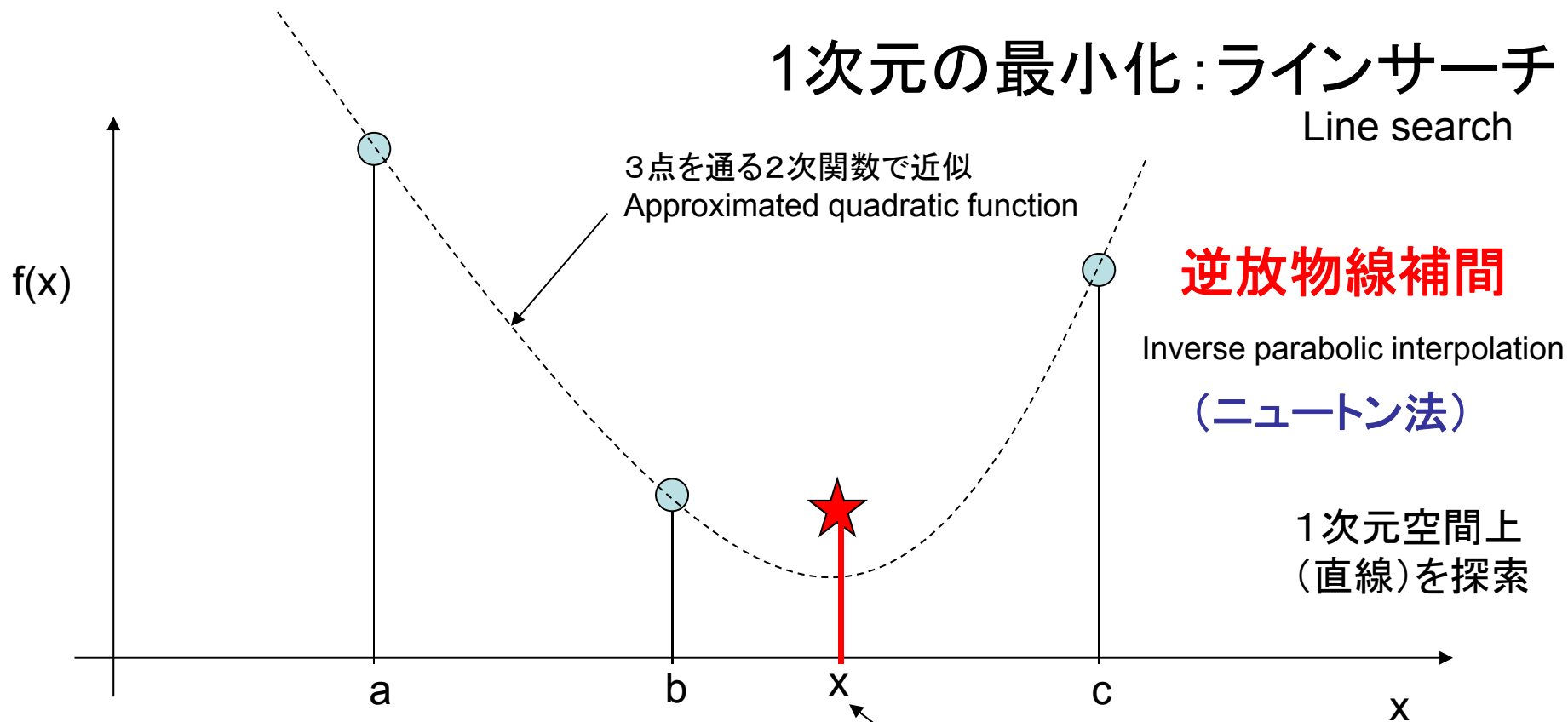
1次元空間上
(直線)を探索

近似した2次関数の極小をサーチ
Search this point where gradient of the
approximated function is zero.

$x =$

1次元の最小化: ラインサーチ

Line search



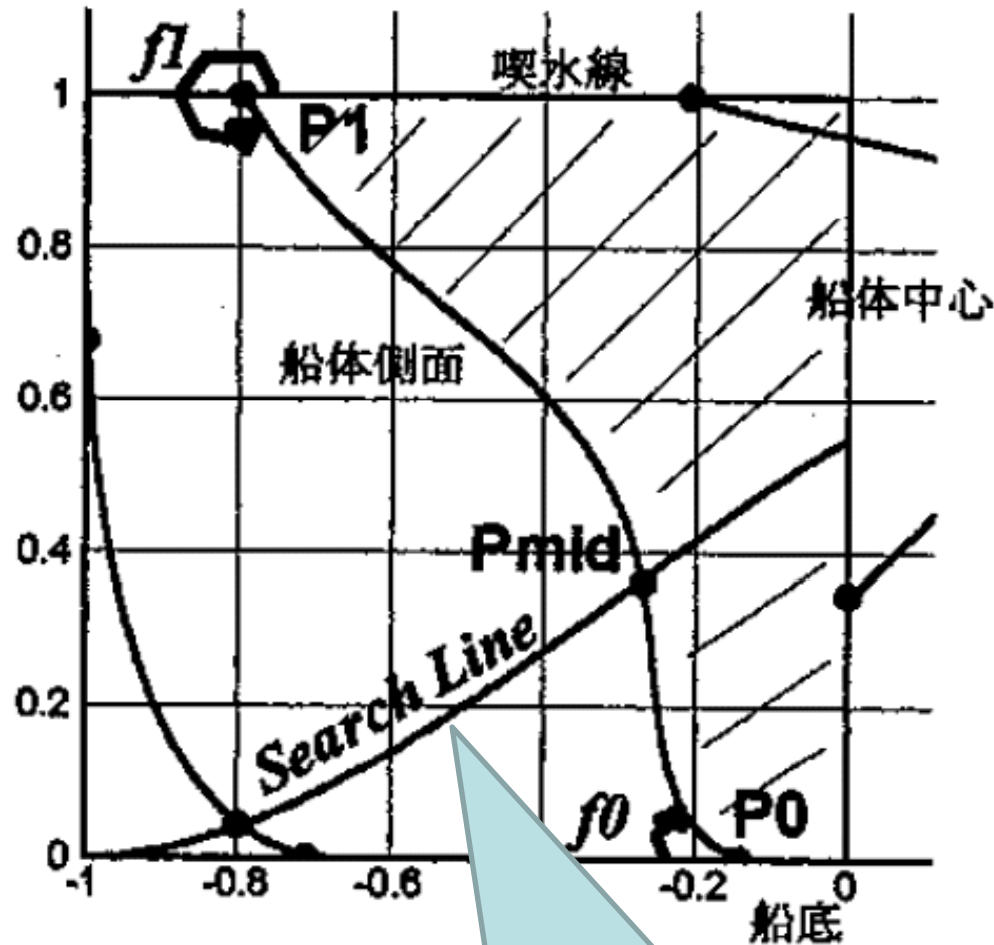
$$x = b - \frac{1}{2} \frac{(b-a)^2(f(b)-f(c)) - (b-c)^2(f(b)-f(a))}{(b-a)(f(b)-f(c)) - (b-c)(f(b)-f(a))}$$

近似した2次関数の極小をサーチ
Search this point where gradient of the approximated function is zero.

ただし、3点が1直線にあると、分母がゼロになってこの式は使えない
This equation is void when the three points are on a same straight line.

ラインサーチの使用例：線図創生法

船型設計システムについて—線図創生—
SRC News No.62, Jan., pp.8--9, 2005,
造船技術センター(SRC)



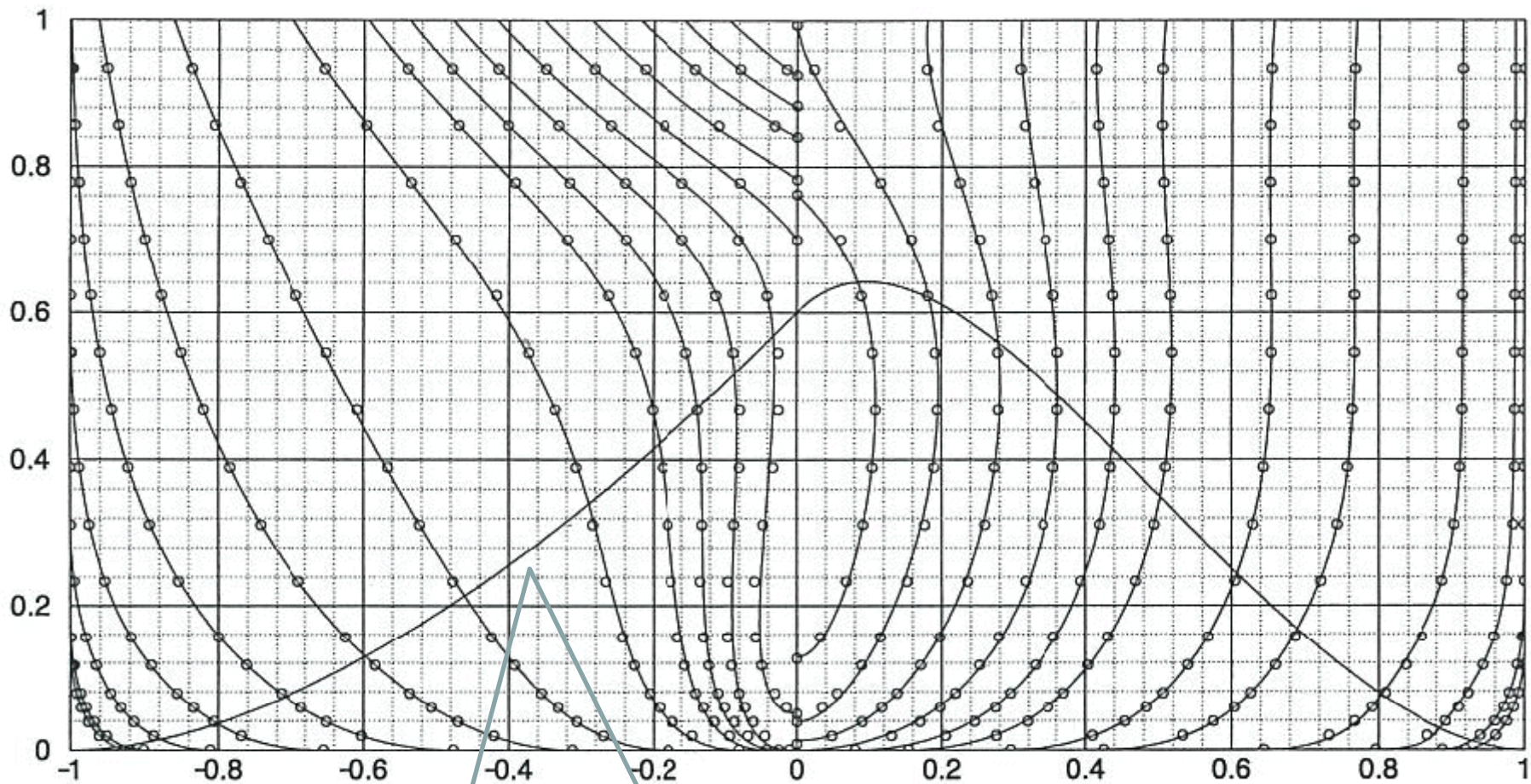
- ・肋骨線形状をサーチライン上に分割点を持つ2分割パラメトリック3次スプライン曲線で表現する。
- ・肋骨線の両端の点の角度と曲率を与える(隣り合う肋骨線同士での値がなめらかに変化するよう配慮)
- ・端点P1, P2の座標(サイドタンジェンシャル・フラットボトム)を適宜与える
- ・船体断面の面積が該当位置の C_p カーブの値 $\times C_m$ と一致するよう、サーチライン上でスプライン曲線の分割点を探索する←**ラインサーチ**

これもパラメトリック3次スプライン曲線
パラメータ t ($0 < t < 1$) で位置を指定

パラメトリック3次スプライン曲線:

$$\begin{cases} x = a_x t^3 + b_x t^2 + c_x t + d_x \\ y = a_y t^3 + b_y t^2 + c_y t + d_y \end{cases}$$

線図創生法で生成された線図の一例



サーチラインは船体の前部と後部で別のものを用いるが、平行部付近(船体下部)では同じ角度と曲率にする

【制約のない関数最適化】 n次元関数の最小化

optimization in n-dimensional function

探索点での関数の値(と勾配の大きさ)に基づいて次の探索点を順次決定する手順により、あたかも山の頂上を目指すように、関数の極大値(あるいは極小値)をすみやかに発見する手法

1) 勾配情報を用いる方法: 勾配法

・最大勾配法(最急降下法)

勾配方向へ少しずつ解を改善

ステップ幅を勾配に比例させて極小点で停止

●ラインサーチと方向転換を繰り返す方法

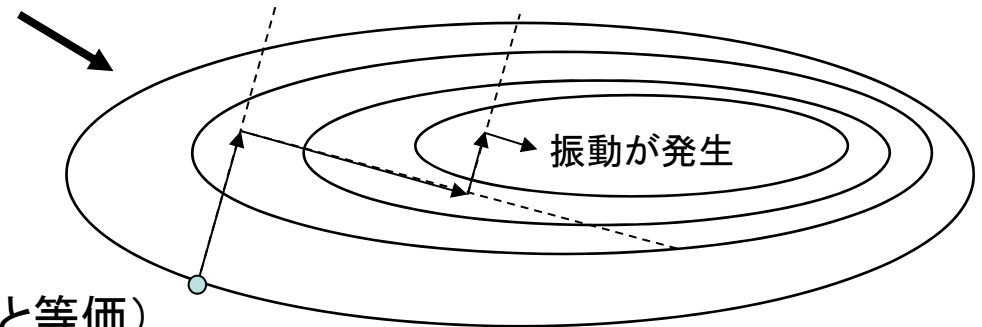
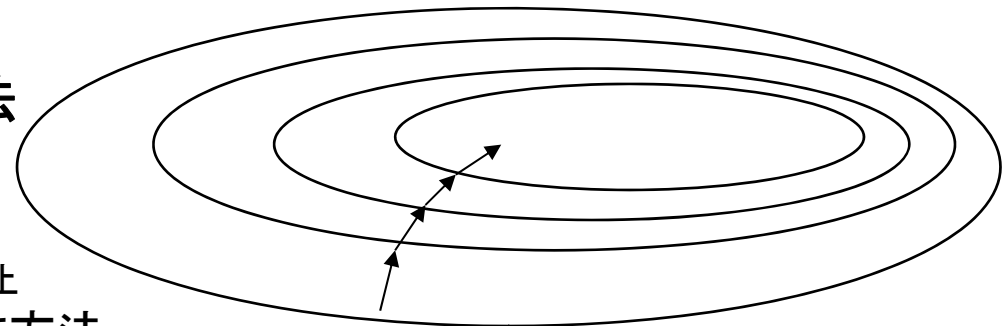
・最適勾配法: 勾配方向にラインサーチを行い、その極小点で再び勾配方向へラインサーチだいたいうまく行くが、2次関数において極めて効率の悪い場合がある

・**共役勾配法** 方向転換するとき、その点の勾配方向だけでなく、今まで下ってきた方向も考える

(関数の2階偏導関数を考慮に入れることと等価)

対象とする関数がn変数の2次形式である場合、

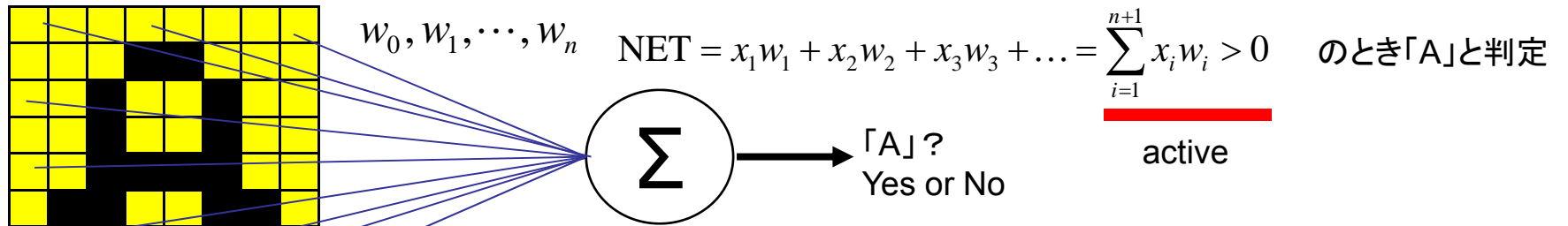
ラインサーチをn回繰り返すことで最大値が求まることが保障される



2) 勾配情報を用いない方法: **滑降シンプレックス法**

たいした計算を要しないで手っ取り早く動くアルゴリズムが欲しい場合に最善の方法

勾配法と「ニューラルネット」との関係



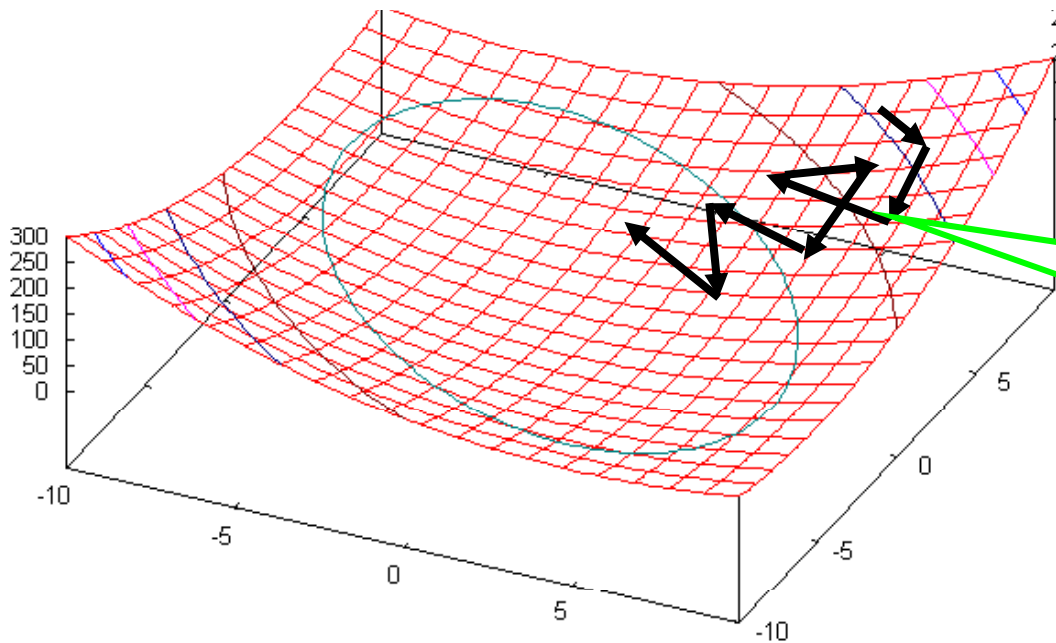
画素 x_1, x_2, \dots, x_n

Hebbの学習則: **興奮しているニューロン同士を結ぶシナプスの重みを強化**

さらに洗練されたニューラルネットの
学習法: 誤差逆伝搬法 (Back-Propagation)

「勾配法」による誤差関数の最小化

勾配法と「確率的学習」や「遺伝的アルゴリズム」との関連



試行錯誤による学習
= 強化学習

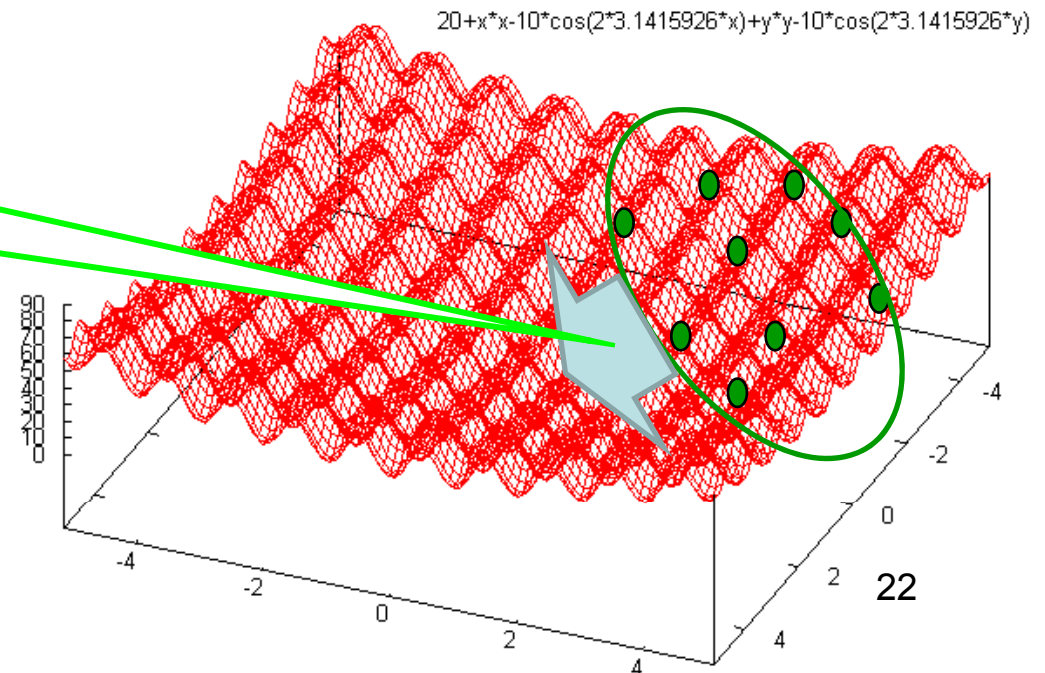
「確率的学習」では1つの
解候補がランダムウォークし
つつコスト関数の勾配を下る

解候補の移動方向の期待値
= コスト関数の勾配

「遺伝的アルゴリズム」では
解候補の集団全体が
平均したコスト関数の勾配を下る

解候補集団分布の移動方向の期待値
= 平均コスト関数の勾配

勾配法は様々な
数値最適化の基本



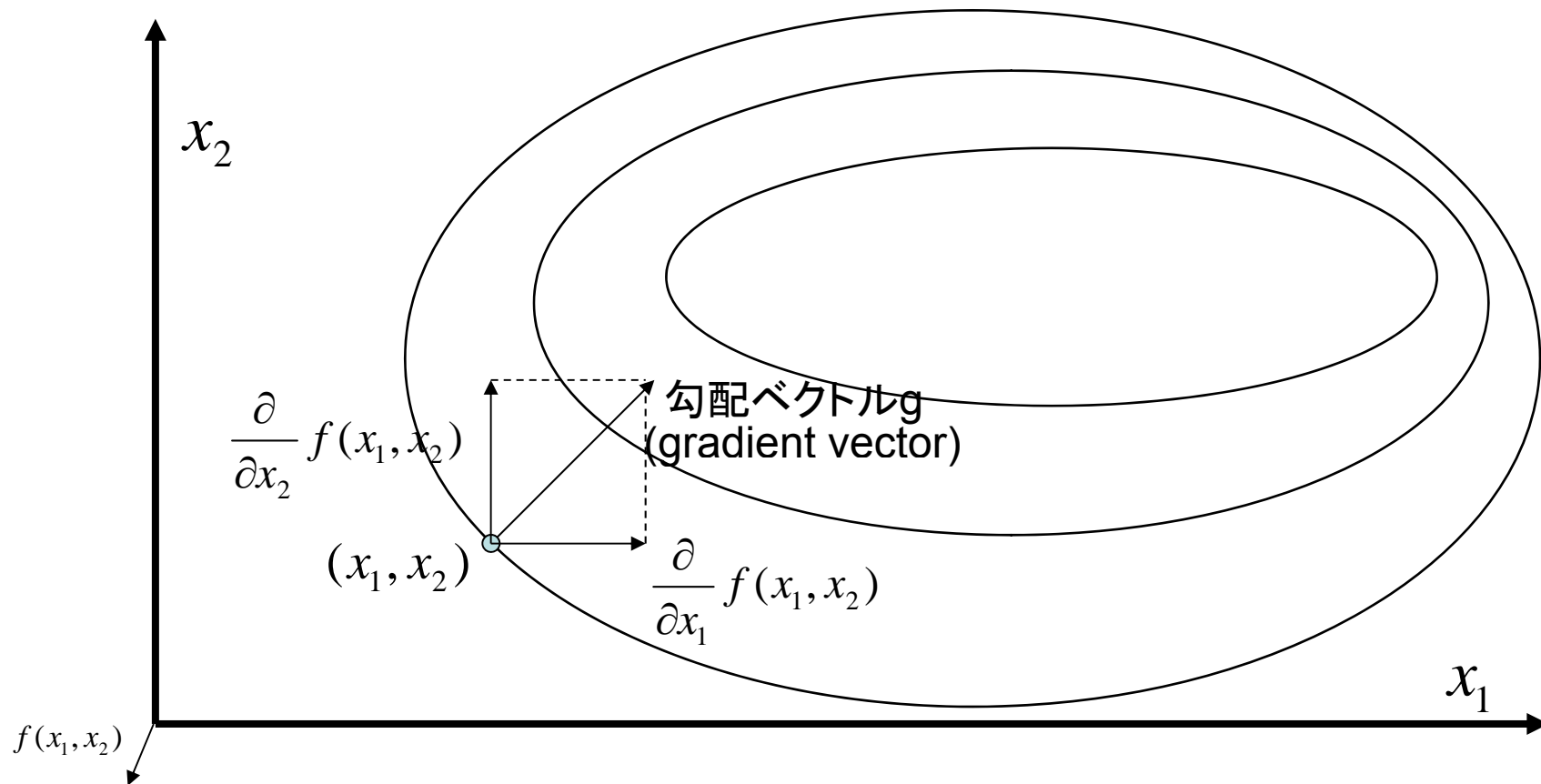
【復習】関数の勾配とは？

(gradient)

2変数関数 $f(x_1, x_2)$

探索すべき
パラメータベクトル $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$

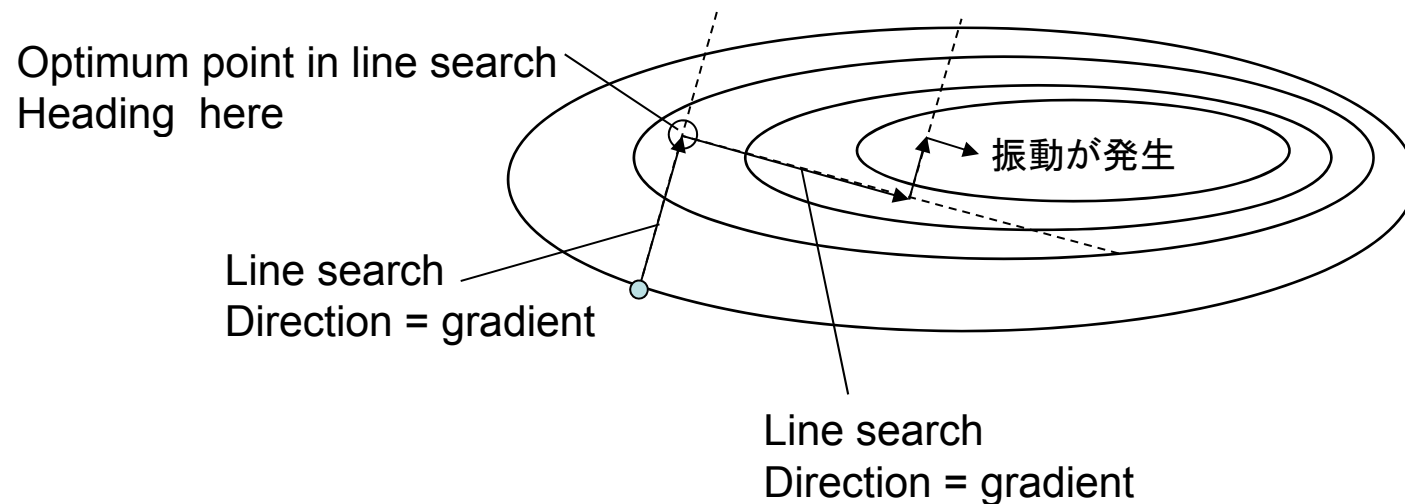
勾配ベクトル
(gradient vector) $\mathbf{g} = \nabla f(x_1, x_2) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} f(x_1, x_2), \frac{\partial}{\partial x_2} f(x_1, x_2) \right)$



ラインサーチと方向転換を繰り返す方法(1)

最適勾配法 (Optimal gradient method)

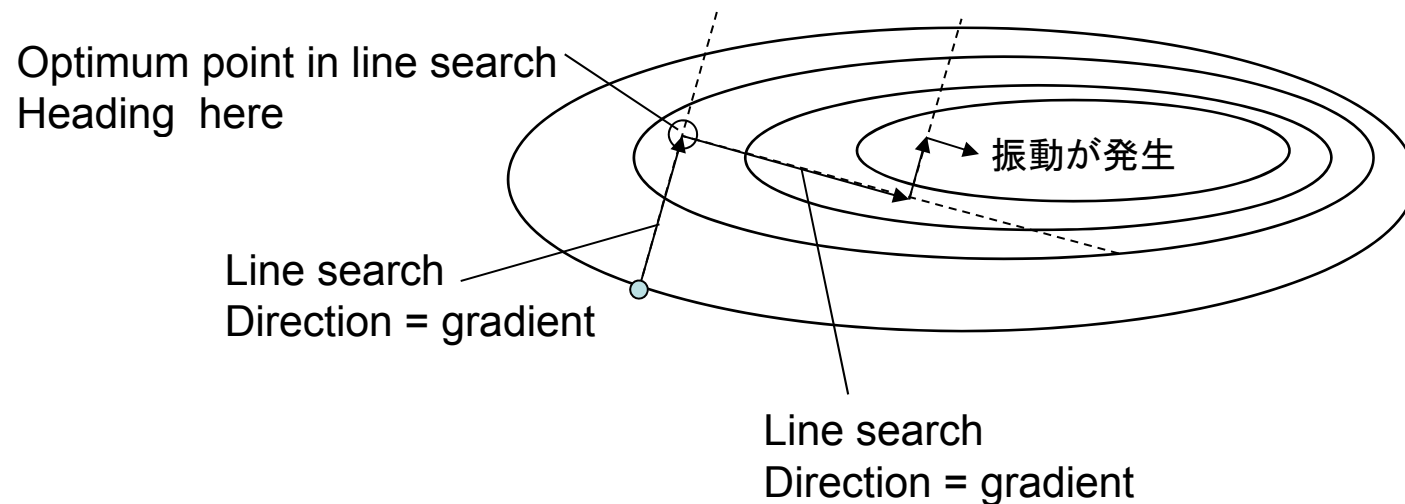
勾配方向にラインサーチを行い、極小点で再び勾配を求め、その方向へラインサーチする
Execute line search in direction of the gradient toward its optimum point,
and turn to the new gradient direction, and execute line search again.



ラインサーチと方向転換を繰り返す方法(1)

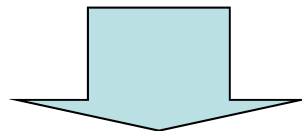
最適勾配法 (Optimal gradient method)

勾配方向にラインサーチを行い、極小点で再び勾配を求め、その方向へラインサーチする
Execute line search in direction of the gradient to its optimum point,
and turn to the new gradient direction, and execute line search again.



【問題点】

2次関数において、細かいステップで方向転換を繰り返しながら
同じような方向を何度もラインサーチを行い、谷底に着くまで多数のステップを要する
It needs many steps in quadratic functions repeating the line search
in similar direction.



新しい探索方向は、今までの全ての探索方向とも干渉しない(直交・共役である)
ことが望ましい A new direction should be conjugate against all past directions.²⁵

なぜ「2次形式」が重要なのか？

(quadratic)

ある特定の点Pを原点とし、この点の近傍座標をxとする。
すると、**どんな関数 f もテイラー級数で近似できる**：
(Taylor series)

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{P}) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots$$

なぜ「2次形式」が重要なのか？

(quadratic)

ある特定の点Pを原点とし、この点の近傍座標をxとする。
すると、**どんな関数 f もテイラー級数で近似できる**：
(Taylor series)

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{P}) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots$$
$$= f(\mathbf{P}) + \nabla f|_{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \dots$$

2次形式
(quadratic)

この行列Aはf(x)のHesse行列
(Hessian matrix)
各要素はPにおける2階偏導関数

$$[\mathbf{A}]_{ij} \equiv \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{P}}$$

【復習】「2次形式」と「共役」な方向とは？

(quadratic) (conjugate)

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \boxed{\phantom{a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + \dots + a_{nn}x_n^2 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n}} \quad \leftarrow \text{2次形式 (quadratic)}$$

ただし

探索すべきパラメータベクトル (parameter vector)

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Positive definite symmetrical matrix

$N \times N$ 正定値対称行列 \mathbf{A} に対して、2つの方向を表すベクトル \mathbf{p} と \mathbf{q} が $\mathbf{p}^t \mathbf{A} \mathbf{q} = 0$ を満たすとき、 \mathbf{p} と \mathbf{q} は \mathbf{A} に関して互いに共役であるという (conjugate)

参考: \mathbf{A} を単位行列とすると、上の式は直交条件となり、共役性は直交性の拡張概念
また、「複素共役」とは無関係

【復習】「2次形式」と「共役」な方向とは？

(quadratic) (conjugate)

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \mathbf{X}^t \mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{B}^t \mathbf{X} + C \quad \leftarrow \text{2次形式 (quadratic)}$$

ただし

探索すべきパラメータベクトル (parameter vector)

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

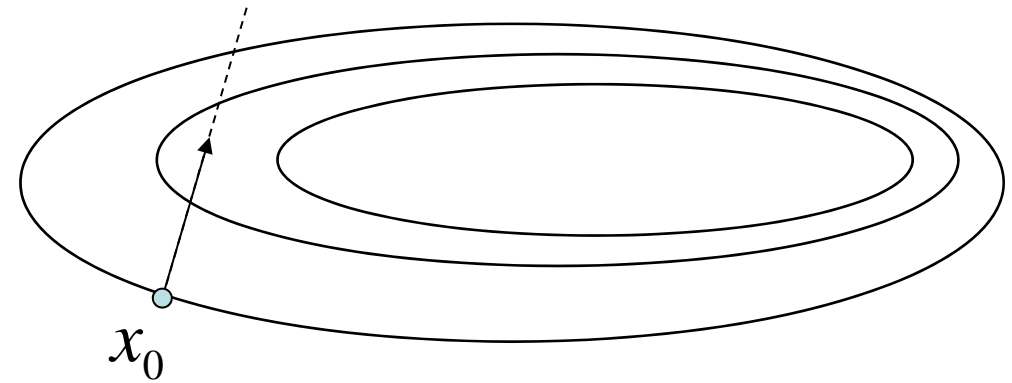
Positive definite symmetrical matrix

$N \times N$ 正定値対称行列 \mathbf{A} に対して、2つの方向を表すベクトル \mathbf{p} と \mathbf{q} が $\mathbf{p}^t \mathbf{A} \mathbf{q} = 0$ を満たすとき、 \mathbf{p} と \mathbf{q} は \mathbf{A} に関して互いに共役であるという (conjugate)

参考: \mathbf{A} を単位行列とすると、上の式は直交条件となり、共役性は直交性の拡張概念
また、「複素共役」とは無関係

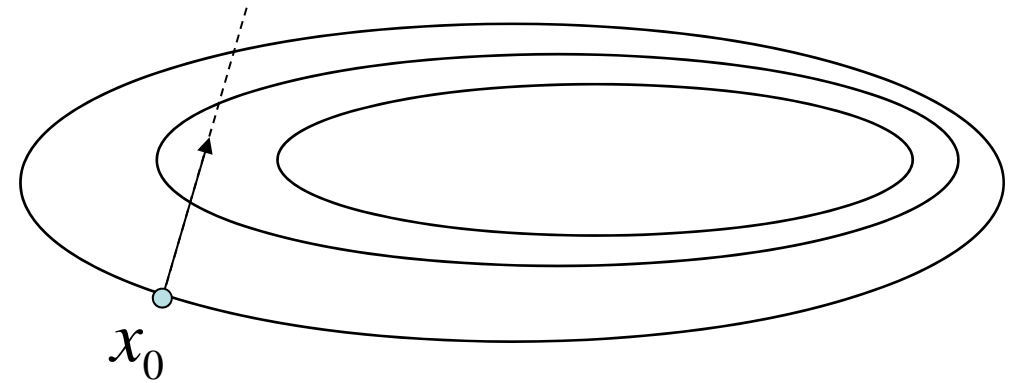
【制約のない関数最適化】 共役勾配法 Conjugate Gradient Method: CG法

- x_i i 番目の点の座標ベクトル
Coordinate of the i^{th} search point
- g_i 点 x_i における勾配ベクトル
Gradient vector at x_i
- p_i 点 x_i からラインサーチを行う方向ベクトル
Direction of line search at x_i



【制約のない関数最適化】 共役勾配法 Conjugate Gradient Method: CG法

- x_i i 番目の点の座標ベクトル
Coordinate of the i^{th} search point
- g_i 点 x_i における勾配ベクトル
Gradient vector at x_i
- p_i 点 x_i からラインサーチを行う方向ベクトル
Direction of line search at x_i

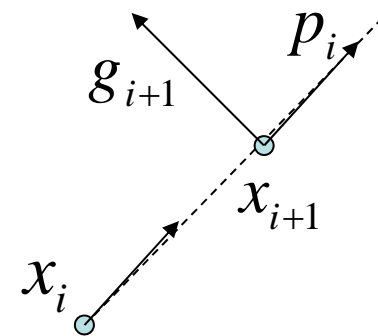


まず最初は勾配の反対方向へラインサーチ

$$p_0 = -g_0$$

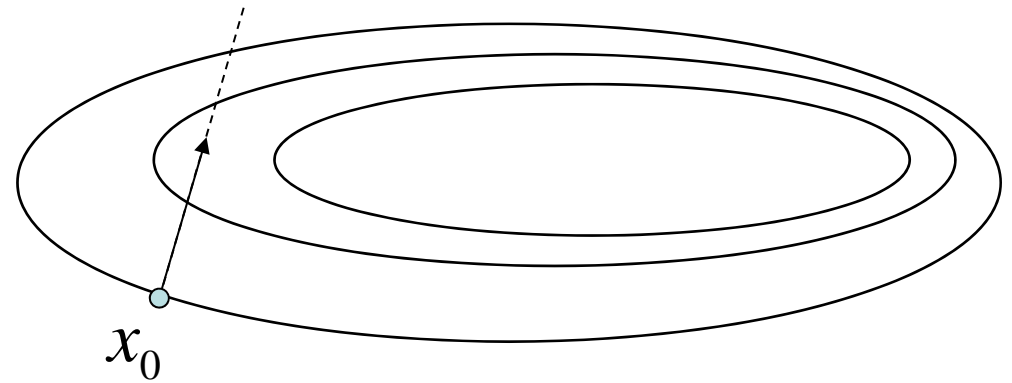
x_i の次の点 x_{i+1} を、ラインサーチで見つけた最小点とする

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i \quad \text{Optimum point in line search}$$



【制約のない関数最適化】 共役勾配法 Conjugate Gradient Method: CG法

x_i	i 番目の点の座標ベクトル Coordinate of the i^{th} search point
g_i	点 x_i における勾配ベクトル Gradient vector at x_i
p_i	点 x_i からラインサーチを行う方向ベクトル Direction of line search at x_i

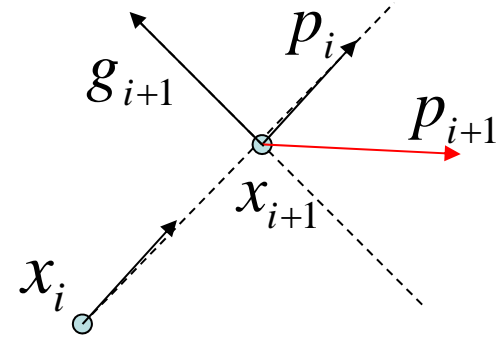


まず最初は勾配の反対方向へラインサーチ

$$p_0 = -g_0$$

x_i の次の点 x_{i+1} を、ラインサーチで見つけた最小点とする

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i \quad \text{Optimum point in line search}$$



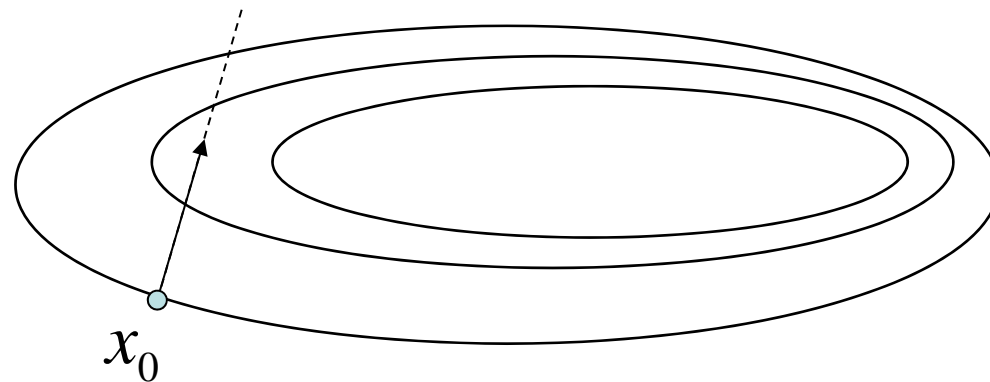
次の点 x_{i+1} での新しい探索方向 p_{i+1} は、前の探索方向 p_i と共役であるようにする。そのため、点 x_{i+1} での勾配と前の探索方向 p_i とを結合する:

$$p_{i+1} = -g_{i+1} + \beta_{i+1} p_i$$

重み係数

【制約のない関数最適化】 共役勾配法 Conjugate Gradient Method: CG法

x_i	i 番目の点の座標ベクトル Coordinate of the i^{th} search point
g_i	点 x_i における勾配ベクトル Gradient vector at x_i
p_i	点 x_i からラインサーチを行う方向ベクトル Direction of line search at x_i

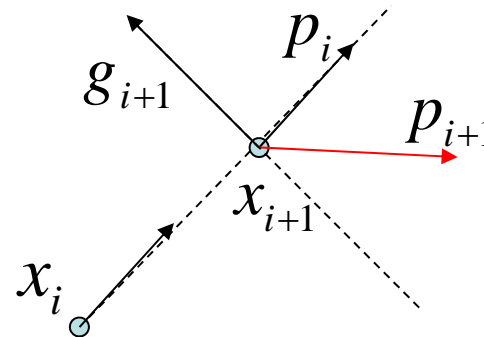


まず最初は勾配の反対方向へラインサーチ

$$p_0 = -g_0$$

x_i の次の点 x_{i+1} を、ラインサーチで見つけた最小点とする

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i \quad \text{Optimum point in line search}$$



次の点 x_{i+1} での新しい探索方向 p_{i+1} は、前の探索方向 p_i と共役であるようにする。そのため、点 x_{i+1} での勾配と前の探索方向 p_i とを結合する:

$$p_{i+1} = -g_{i+1} + \beta_{i+1} p_i$$

ただし、重み係数 β_{i+1} は次の式のどちらかで与える:

(Polak-Ribiere法)

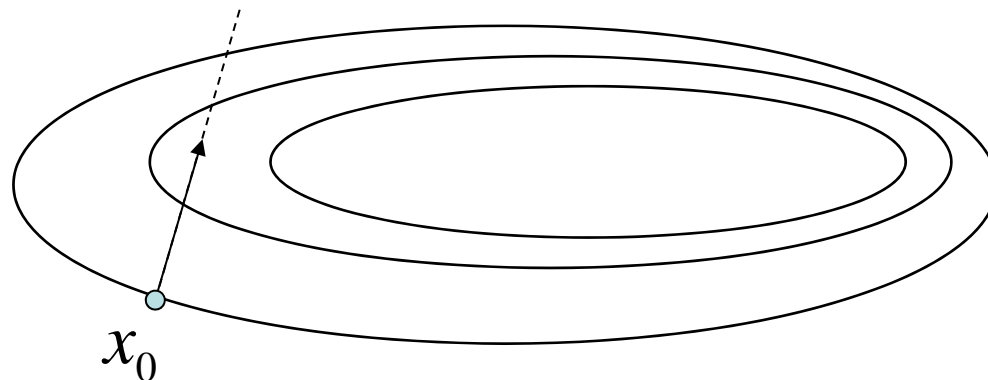
$$\beta_{i+1} =$$

(Fletcher-Reeves法)

$$\beta_{i+1} =$$

【制約のない関数最適化】 共役勾配法 Conjugate Gradient Method: CG法

x_i	i 番目の点の座標ベクトル Coordinate of the i^{th} search point
g_i	点 x_i における勾配ベクトル Gradient vector at x_i
p_i	点 x_i からラインサーチを行う方向ベクトル Direction of line search at x_i

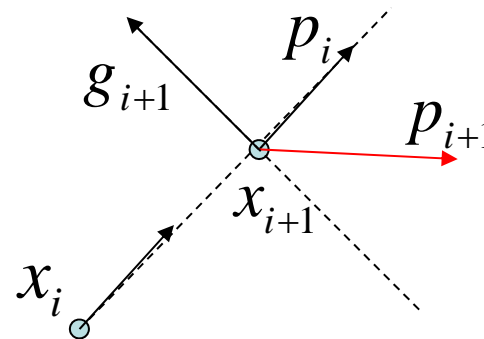


まず最初は勾配の反対方向へラインサーチ

$$p_0 = -g_0$$

x_i の次の点 x_{i+1} を、ラインサーチで見つけた最小点とする

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i \quad \text{Optimum point in line search}$$



次の点 x_{i+1} での新しい探索方向 p_{i+1} は、前の探索方向 p_i と共役であるようにする。そのため、点 x_{i+1} での勾配と前の探索方向 p_i とを結合する:

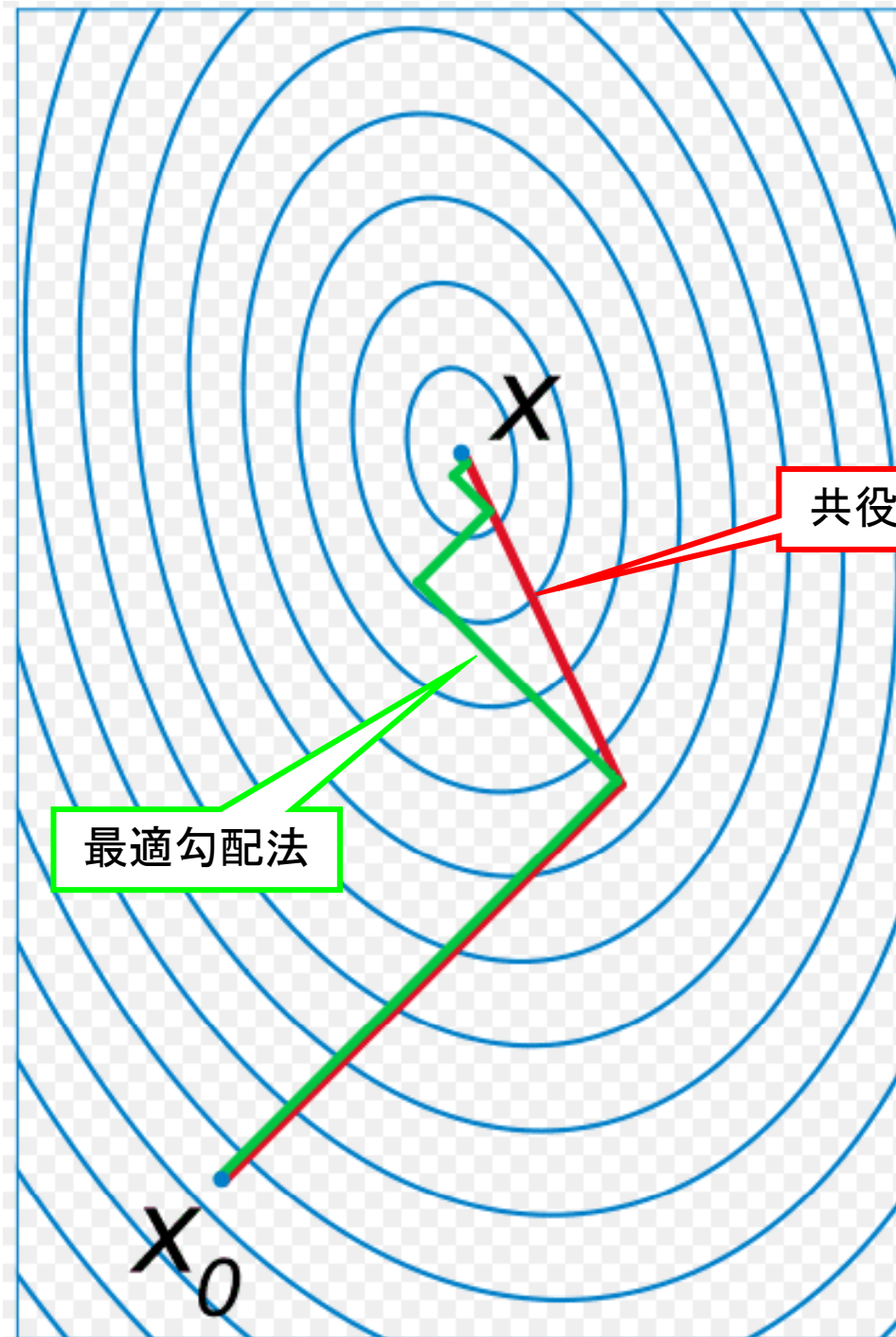
$$p_{i+1} = -g_{i+1} + \beta_{i+1} p_i$$

ただし、重み係数 β_{i+1} は次の式のどちらかで与える:

$$\beta_{i+1} = \frac{g_{i+1}^T g_{i+1}}{g_i^T g_i} = \frac{\|g_{i+1}\|^2}{\|g_i\|^2} \quad \text{(Fletcher-Reeves法)}$$

(Polak-Ribiere法)

$$\beta_{i+1} = \frac{(g_{i+1} - g_i)^T g_{i+1}}{g_i^T g_i}$$



線形方程式の2次形式を最小化するための、最適なステップサイズによる最適勾配法の収束と共役勾配法の収束の比較

出典: フリー百科事典『ウィキペディア (Wikipedia)』

【共役勾配法が2次形式関数でn回のラインサーチで最適解を見つける理由】

次式を満たす n 個の n 次元ベクトル $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n$ を考える:

$$\mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_j = \begin{cases} \text{const.} & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n \text{ は共役ベクトル集合}$$

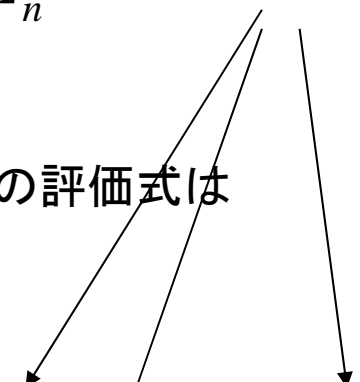
【共役勾配法が2次形式関数でn回のラインサーチで最適解を見つける理由】

次式を満たす n 個の n 次元ベクトル $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n$ を考える:

$$\mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_j = \begin{cases} \text{const.} & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n \text{ は共役ベクトル集合}$$

次に、ベクトル \mathbf{X} を $\mathbf{X} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \mathbf{Z}_j$ と表すと、2次形式の評価式は

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \mathbf{X}^t \mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{B}^t \mathbf{X} + C$$

$$= \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j \mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_j \right) + \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{B}^t \mathbf{Z}_i \right) + C = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_i + \alpha_i \mathbf{B}^t \mathbf{Z}_i + C$$


【共役勾配法が2次形式関数でn回のラインサーチで最適解を見つける理由】

次式を満たす n 個の n 次元ベクトル $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n$ を考える:

$$\mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_j = \begin{cases} \text{const.} & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n \text{ は共役ベクトル集合}$$

次に、ベクトル \mathbf{X} を $\mathbf{X} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \mathbf{Z}_j$ と表すと、2次形式の評価式は

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2, \dots, x_n) &= \mathbf{X}^t \mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{B}^t \mathbf{X} + C \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j \mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_j \right) + \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{B}^t \mathbf{Z}_i \right) + C = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_i + \alpha_i \mathbf{B}^t \mathbf{Z}_i + C \end{aligned}$$

ここで $g_i(\alpha_i) = \alpha_i^2 \mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_i + \alpha_i \mathbf{B}^t \mathbf{Z}_i$ とおくと、上の式は以下のようになる:

各共役ベクトル毎にインデックス表示

【共役勾配法が2次形式関数でn回のラインサーチで最適解を見つける理由】

次式を満たす n 個の n 次元ベクトル $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n$ を考える:

$$\mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_j = \begin{cases} \text{const.} & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n \text{ は共役ベクトル集合}$$

次に、ベクトル \mathbf{X} を $\mathbf{X} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \mathbf{Z}_j$ と表すと、2次形式の評価式は

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2, \dots, x_n) &= \mathbf{X}^t \mathbf{A} \mathbf{X} + \mathbf{B}^t \mathbf{X} + C \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j \mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_j \right) + \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{B}^t \mathbf{Z}_i \right) + C = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_i + \alpha_i \mathbf{B}^t \mathbf{Z}_i + C \end{aligned}$$

ここで $g_i(\alpha_i) = \alpha_i^2 \mathbf{Z}_i^t \mathbf{A} \mathbf{Z}_i + \alpha_i \mathbf{B}^t \mathbf{Z}_i$ とおくと、上の式は以下のようになる:

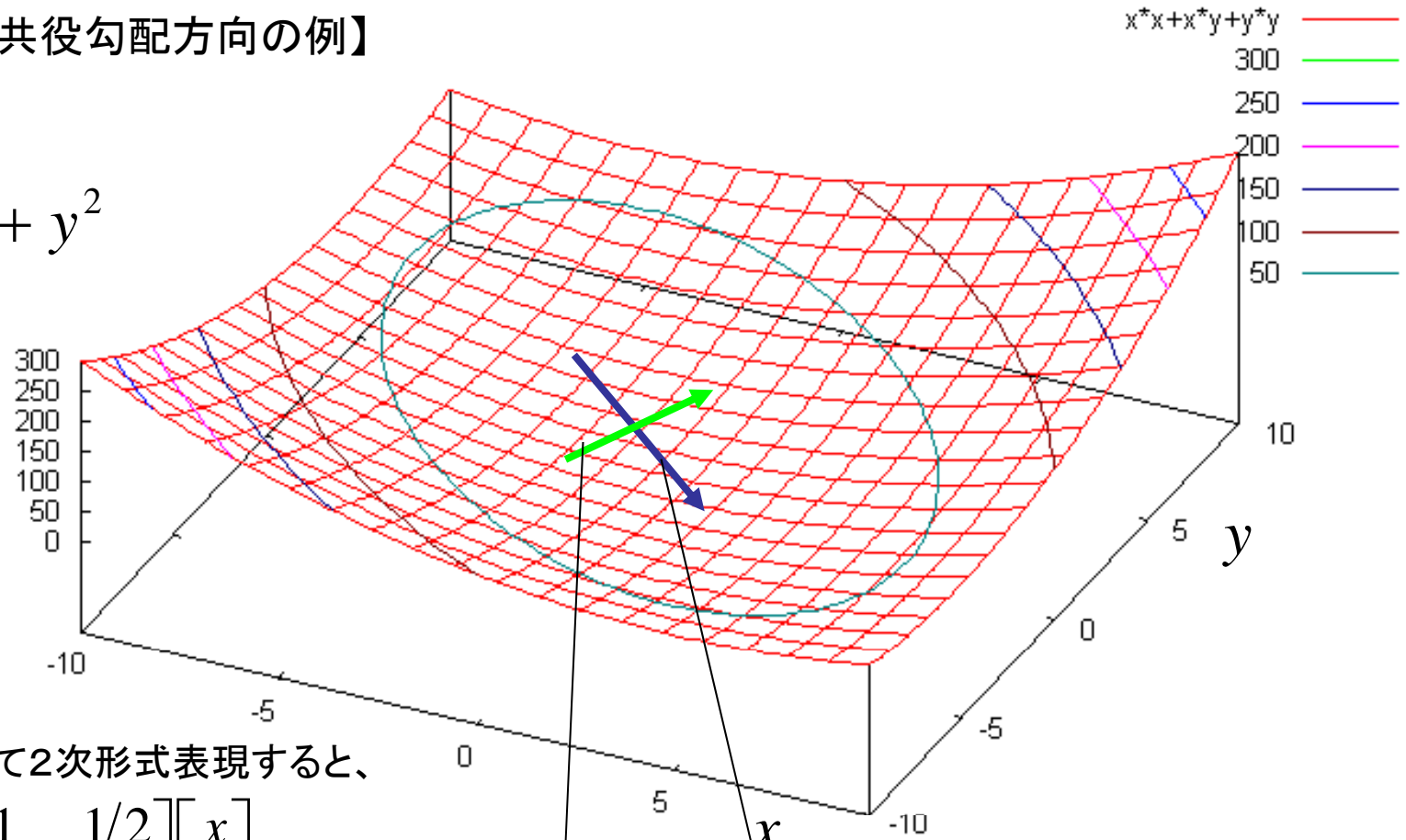
$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n g_i(\alpha_i) + C \quad \Rightarrow \quad \text{これより、関数 } f \text{ はそれぞれ } \alpha_i \text{ に対する } n \text{ 個の関数の代数和で表される}$$

探索開始点から順次 $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_n$ 方向
の関数の断面について $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ の最小化
を行えばn回のラインサーチで最適解を得る

よって $g_1(\alpha_1), g_2(\alpha_2), \dots, g_n(\alpha_n)$
のそれぞれについて最小値を求めれば良い

【2次形式関数と共役勾配方向の例】

$$f = x^2 + xy + y^2$$



対称行列Aを用いて2次形式表現すると、

$$f = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

このとき

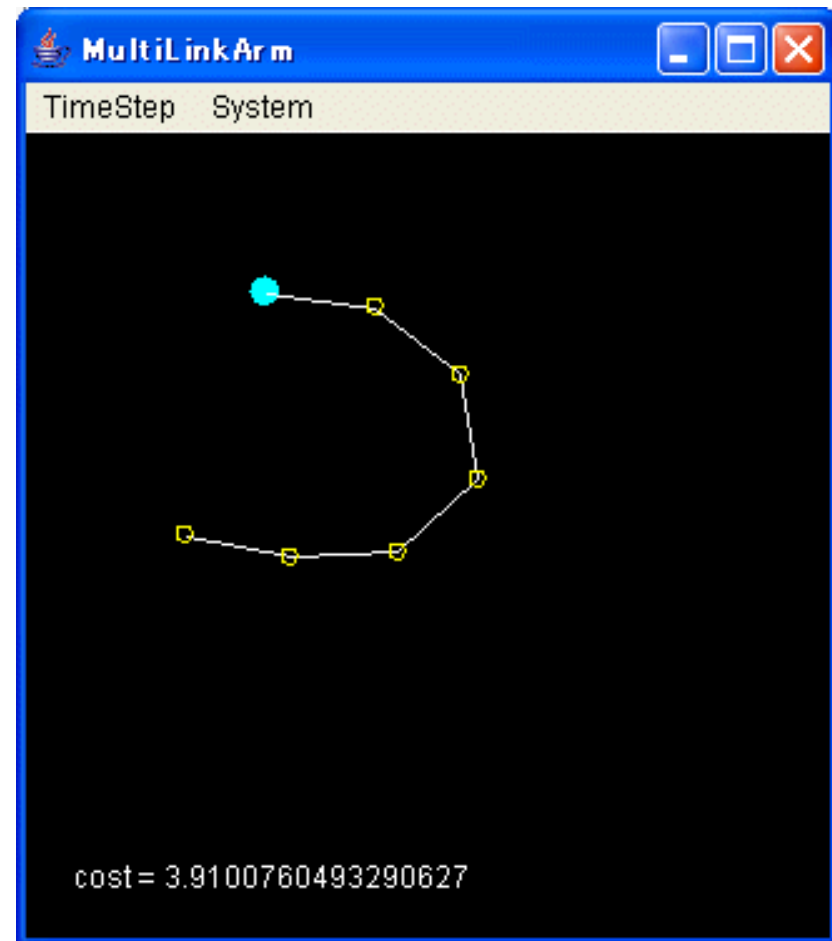
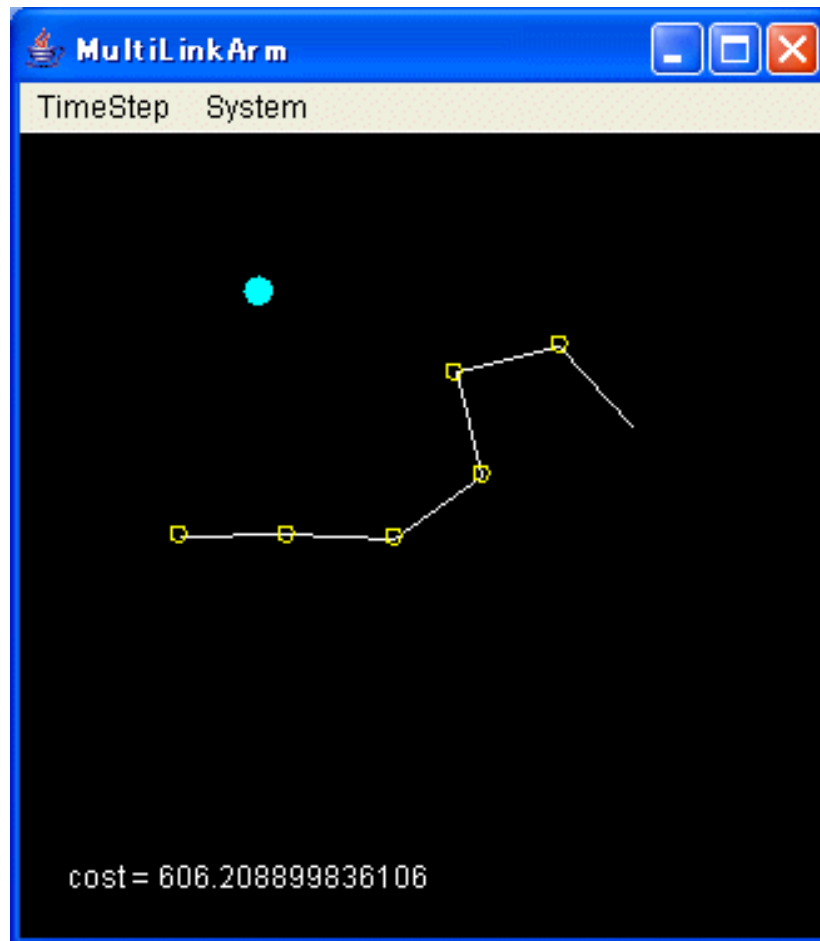
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = 0$$

となるので $(1, 1)$ と $(1, -1)$ が対となる共役ベクトル

【例：冗長自由度アームのリーチング問題】

- 各関節の角度をパラメータとして、アーム先端がターゲット座標に一致するパラメータを求める問題。ただし、各関節はリンク同士を±90度以内で繋ぐ制約があるので、なるべく関節の可動角度中央付近の角度にすることが好ましい。

コスト関数 = (アーム先端座標とターゲット座標の偏差の2乗)
+ (各関節の可動中央角度からの偏差の2乗)



流体の数値計算における共役勾配法の利用

圧力のポアソン方程式を離散化 → 大規模な連立1次方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を解く

係数行列: 隣接する領域
のみの関係なので、
疎な実対称正定値行列

未知量ベクトル(圧力)
要素数は数万~数百万

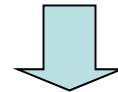
2次形式

$$f(\mathbf{x}) =$$



とおき、これを最小化する \mathbf{x} を共役勾配法で求める

「最小点」では $df(\mathbf{x})/d\mathbf{x} = \mathbf{0}$ より $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を満たす



求めようとする解そのもの

大規模な連立方程式を数值的に解く場合、逆行列を直接計算するよりも共役勾配法のほうが、はるかに効率良く計算できる場合がある

流体の数値計算における共役勾配法の利用

圧力のポアソン方程式を離散化 → 大規模な連立1次方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を解く

係数行列: 隣接する領域
のみの関係なので、
疎な実対称正定値行列

未知量ベクトル(圧力)
要素数は数万~数百万

2次形式

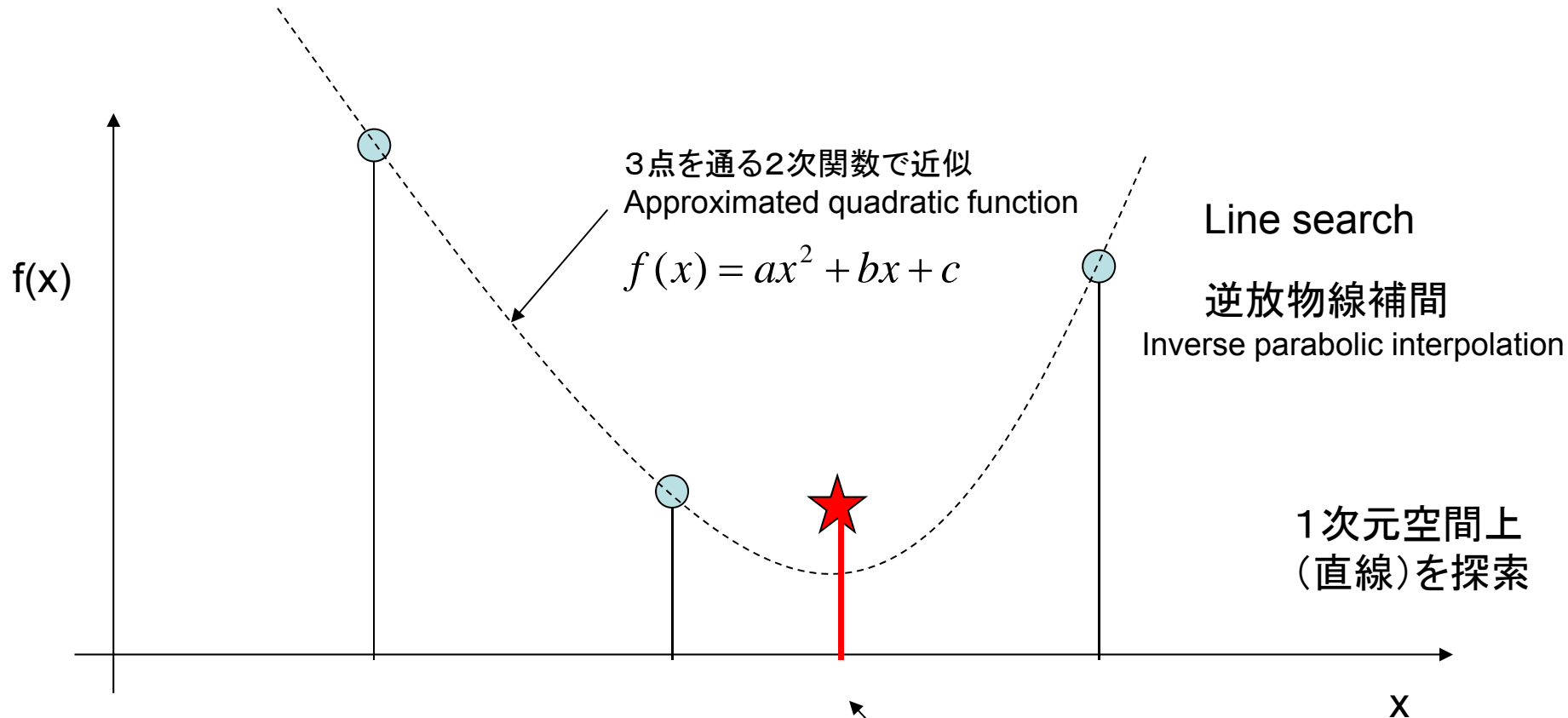
$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} - 2\mathbf{x}^T \mathbf{b}$ とおき、これを最小化する \mathbf{x} を共役勾配法で求める

「最小点」では $df(\mathbf{x})/d\mathbf{x} = \mathbf{0}$ より $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を満たす

求めようとする解そのもの

大規模な連立方程式を数値的に解く場合、逆行列を直接計算するよりも共役勾配法のほうが、はるかに効率良く計算できる場合がある

【制約のない関数最適化】 ニュートン法 Newton method

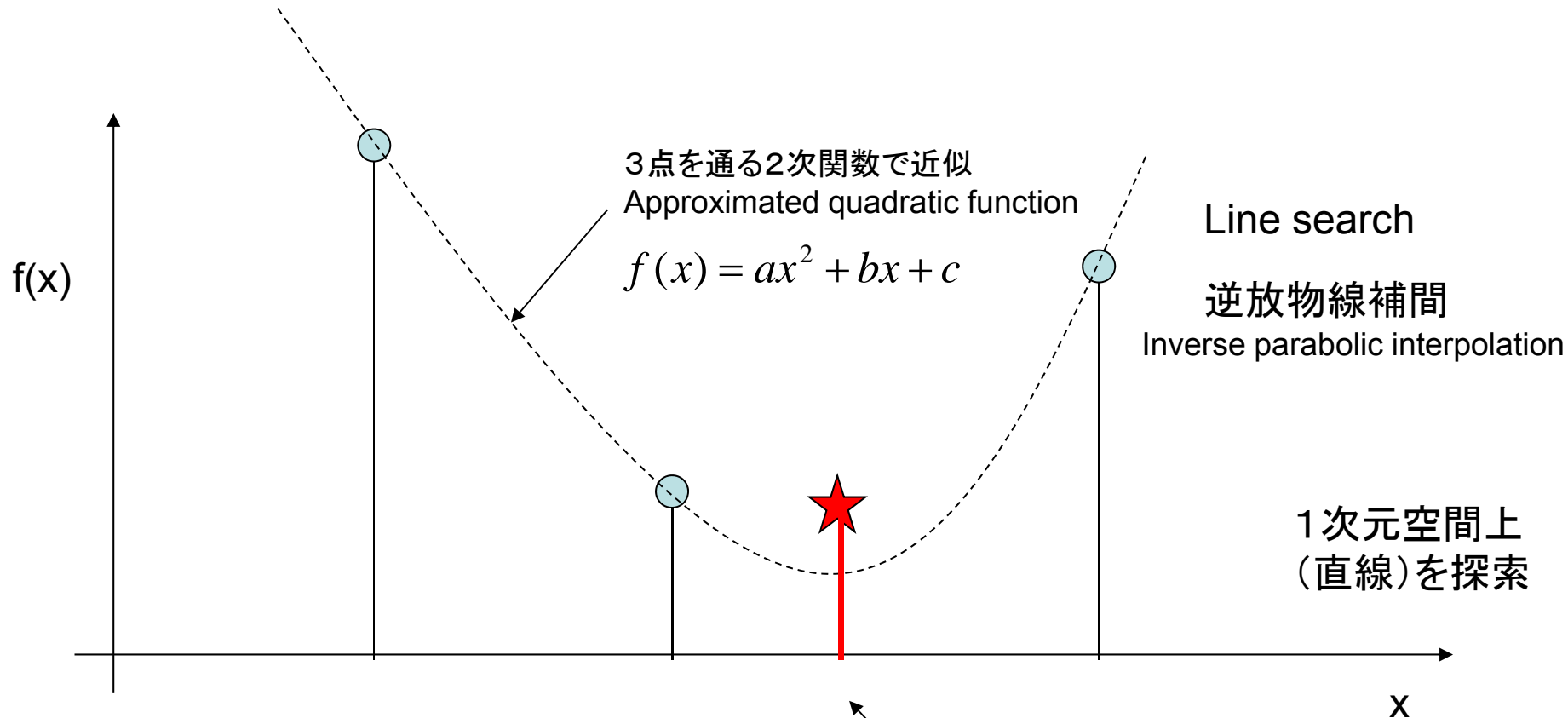


$$\frac{df}{dx} = 0 \quad \text{より、} 2ax + b = 0$$

$$x =$$

近似した2次関数の極小をサーチ
Search this point where gradient of the approximated function is zero.

【制約のない関数最適化】 ニュートン法 Newton method



$$\frac{df}{dx} = 0 \quad \text{より、} 2ax + b = 0$$

$$x = (2a)^{-1}(-b)$$

近似した2次関数の極小をサーチ
Search this point where gradient of the approximated function is zero.

【制約のない関数最適化】 準ニュートン法

Quasi-Newton method

関数 $f(\mathbf{x})$ をテイラー級数で近似
(Taylor series)

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{P}) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots$$

$$= f(\mathbf{P}) + \nabla f|_{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \dots$$

この行列 \mathbf{A} は $f(\mathbf{x})$ の Hesse 行列
(Hessian matrix)

各要素は \mathbf{P} における 2 階偏導関数

$$[\mathbf{A}]_{ij} \equiv \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{\mathbf{P}}$$

2次形式
(quadratic)

【制約のない関数最適化】 準ニュートン法

Quasi-Newton method

関数 $f(\mathbf{x})$ をテイラー級数で近似
(Taylor series)

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{P}) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots$$

この行列 \mathbf{A} は $f(\mathbf{x})$ の Hesse 行列
(Hessian matrix)

$$= f(\mathbf{P}) + \nabla f|_{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \dots$$

各要素は \mathbf{P} における 2 階偏導関数

$$[\mathbf{A}]_{ij} \equiv \left. \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{P}}$$

2次形式
(quadratic)

極小点では勾配ゼロだから上の式を微分すると

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \nabla f|_{\mathbf{P}} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{0}$$

これを解くと

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} (-\nabla f|_{\mathbf{P}}) \quad \text{次はこの点を探査すべし}$$

【制約のない関数最適化】 準ニュートン法

Quasi-Newton method

関数 $f(\mathbf{x})$ をテイラー級数で近似
(Taylor series)

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{P}) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots$$

この行列 \mathbf{A} は $f(\mathbf{x})$ の Hesse 行列
(Hessian matrix)

$$= f(\mathbf{P}) + \nabla f|_{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \dots$$

各要素は \mathbf{P} における 2 階偏導関数

$$[\mathbf{A}]_{ij} \equiv \left. \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{P}}$$

2次形式
(quadratic)

極小点では勾配ゼロだから上の式を微分すると

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \nabla f|_{\mathbf{P}} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{0}$$

これを解くと

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} (-\nabla f|_{\mathbf{P}}) \quad \text{次はこの点を探査すべし}$$

しかし、行列 \mathbf{A} は未知 なので、探索の過程から逐次的に近似する

Since matrix \mathbf{A} is unknown, it is estimated from the process of the optimization incrementally.

(計算には勾配の情報とラインサーチを用いる)

準ニュートン法の処理手順

現在の探索点を \mathbf{x}_i 次の探索点を \mathbf{x}_{i+1} と表わす

...あまりに式が複雑なので途中で投げ出しました

詳細は省略。最適化するなら共役勾配法を使え。

勾配法の補足:

関数の厳密な勾配の計算ができない場合は、**差分近似で代用**すること。

まとめ

- ・1次元関数の最小化(ラインサーチ)
 - 黄金比分割法** △ニュートン法

- ・n次元関数の最小化:

勾配を用いる方法

×最急降下法 △最適勾配法 ○**共役勾配法(CG法)**

逆放物線補間を用いる方法

○準ニュートン法(ただし計算過程で勾配とラインサーチを用いる) 50

ラインサーチを利用