5L-8

微分を用いない関数最小化におけるPowell法の拡張について

金光秀雄* 宮腰政明** 新保 勝**

(*北海道教育大学·函館分校、 **北海道大学)

1. はじめに

微分を用いない関数最小化アルゴリズムとして、共役方向を利用したPowell法[1][2]が有効であることが知られている。ここでは共役方向の性質を用いて共役方向生成アルゴリズムを構成し、この共役方向群を用いてPowell法を再構成する。次にこの再構成したPowell法のアルゴリズムをもとにPowell法を拡張したアルゴリズムを構成し、その収束性を論じる。最後に本アルゴリズムから得られる具体的なアルゴリズムとPowell法との比較を数値例によりおこなう。

2. 共役方向法

2. 1. 共役方向の性質

定義1:最小化する2次関数f_Qを$f_Q=1/2x^TQx+b^Tx+c$ ($x,b\in R^n,c\in R$,Qはn×n正定値行列)とする。このときk個のベクトル$d_1,d_2,\cdots,d_k\in R^n$が、$d_iQd_j=0(i\neq j)$満足するならば、$d_1,d_2,\cdots,d_k$は互いにQ-共役であるという。

記法:1次独立なベクトル$d_1,d_2,\cdots,d_k\in R^n$の集合を$D_k$とし、$d_1,d_2,\cdots,d_k$の張る部分空間をspan[$D_k$]で表す。また、span[$D_k$]をXだけ平行移動して得られるアフィン集合をAs(x,D_k)と書く。特に$d_1,d_2,\cdots,d_k$が互いにQ-共役であるとき、D_kをC_kで表す。

x_1を起点とし、$d_1,d_2,\cdots,d_k$方向へ順番に最小化して得られた点をx_{k+1}とするとき、このようなアルゴリズムを$x_{k+1}\in Md(x_1,D_k)$記述しておき、以後このアルゴリズムをアルゴリズムMdと呼ぶことにする。

次の2つの定理は、アルゴリズムMdの方向として共役方向を用いたときの2次関数最小化に関する定理であるが、ここでは証明を省略する(文献[1]、[2]を参照)。

定理1:$d_1,d_2,\cdots,d_k$が互いにQ-共役ならばアルゴリズムMdによって得られた点$x_{k+1}\in Md(x_1,C_k)$はアフィン集合As(x_1,C_k)上における2次関数の最小点となる。

定理2:$d_1,d_2,\cdots,d_k$が互いにQ-共役で、x_1とアフィン集合As(x_1,C_k)に含まれない点y_1が与えられたとき、アルゴリズムMdによって得られた2点をそれぞれ$x_{k+1}\in Md(x_1,C_k)$,$y_{k+1}\in Md(y_1,C_k)$とするとき、$y_{k+1}-x_{k+1}$は、span[C_k]の任意のベクトルと互いにQ-共役である。

定理2において、$d_{k+1}=y_{k+1}-x_{k+1}$としたとき、アフィン集合の組As(x_1,C_k)、As(y_1,C_k)をspan[C_{k+1}]上の共役超平面と呼び、Ch(x_1,y_1,C_k)で表す。

2. 2. 共役方向生成アルゴリズム

定理2から、次のような共役方向を生成するアルゴリズムが構成できる。

アルゴリズムMc:$(y_{k+1},C_{k+1})\in Mc(x_1,C_k,e_k,p_k)$

step1 互いにQ-共役な方向の集合$C_k=\{d_1,d_2,\cdots,d_k\}$、$x_1\in R^n$、span[$C_k$]と独立な方向$e_k\in R^n$、$p_k\in R$を定める。

step2 $x_{k+1}\in Md(x_1,C_k)$とする。

step3 $y_1=x_{k+1}+p_ke_k,(p_k\neq 0)$、$y_{k+1}\in Md(y_1,C_k)$とする。

step4 $d_{k+1}=y_{k+1}-x_{k+1}$、$C_{k+1}=\{d_1,d_2,\cdots,d_{k+1}\}$とする。

3. Powell法の拡張

3. 1. 共役方向群を用いたPowell法の記述

アルゴリズムMpc:$x_{n+1}^{(1)}\in Mpc(x_1^{(1)},D_n^{(1)})$

step1 1次独立なベクトルの集合$D_n^{(1)}=\{d_1^{(1)},d_2^{(1)},\cdots,d_n^{(1)}\}$、出発点$x_1^{(1)}\in R^n$を定め、k=r=1とする。

step2 $x_{n+1}^{(1)}\in Md(x_1^{(1)},D_n^{(1)})$とする。

step3 $d_{n+1}^{(1)}=x_{n+1}^{(1)}-x_1^{(1)}$、$C_1^{(1)}=d_{n+1}^{(1)}$、$x_1^{(1)}=x_{n+1}^{(1)}$とする。

step4 $x_{r+1}^{(k)}\in Md(x_r^{(k)},C_r^{(k)})$、k=k+1とする。

step5 $D_{n-r}^{(k)}=\{d_1^{(k)},d_2^{(k)},\cdots,d_{n-r}^{(k)}\}$として、$x_{n+1}^{(k)}\in Md(x_{r+1}^{(k)},D_{n-r}^{(k)})$とする。

step6 $y_1^{(k)}=x_{n+1}^{(k)}$として、$y_{r+1}^{(k)}\in Md(y_1^{(k)},C_r^{(k)})$とする。

step7 $\|y_{r+1}^{(k)}-x_{r+1}^{(k)}\|=0$ならば終了する。

step8 $d_{n+1}^{(k)}=y_{r+1}^{(k)}-x_{r+1}^{(k)}$とする。

step9 $d_i^{(k+1)}=d_{i+1}^{(k)}$、i=1,2,…,n
$C_r^{(k+1)}=\{d_n^{(k+1)},d_{n-1}^{(k+1)},\cdots,d_{n-r+1}^{(k+1)}\}$、
$D_{n-r}^{(k+1)}=\{d_1^{(k+1)},d_2^{(k+1)},\cdots,d_{n-r}^{(k+1)}\}$、
$x_1^{(k+1)}=y_{r+1}^{(k+1)}$、r=min{n-1,r+1}として
step4に戻る。

このアルゴリズムで$e_r^{(k)}=x_{n+1}^{(k)}-x_{r+1}^{(k)}$、$C_{r+1}^{(k)}=\{d_{n+1}^{(k)},d_n^{(k)},\cdots,d_{n-r+1}^{(k)}\}$とすると、step4~8が共役方向生成アルゴリズム$(y_{r+1}^{(k)},C_{r+1}^{(k)})\in Mc(x_1^{(k)},C_r^{(k)},e_r^{(k)},1)$になっていることがわかる。また、rとkの値を比べるとk≧n-1のときはn=n-1となり、このときstep4~6はn次元空間の平行な超平面上の最小化を行っていることがわかる。以上のことから、次に述べるようなアルゴリズム(以下、平行超平面法と呼ぶ)を構成できる。

On An Extension of Powell's Method in Miniminzing a Function without Evaluating Derivatives.

Hideo KANEMITSU*, Masaaki MIYAKOSHI** and Masaru SHIMBO**
*Hokkaido University of Education,Hakodate Campus、**Hokkaido University

3．2．Powell法の拡張

アルゴリズムMh：$y_{n+1}^{(k)} \in Mh(x_1^{(k)}, D_{n-1}^{(k)})$

step1　1次独立なベクトルの集合$D_{n-1}^{(1)} = \{d_1^{(1)}, d_2^{(1)}, \cdots, d_{n-1}^{(1)}\}$、出発点$x_1^{(1)} \in R^n$を定め、k=1とする。

step2　$x_n^{(1)} \in Md(x_1^{(1)}, D_{n-1}^{(1)})$とする。

step3　span$[D_{n-1}^{(k)}]$と独立な方向$e^{(k)}$を定め、$y_1^{(k)} = x_n^{(k)} + q^{(k)} e^{(k)}$, $(q^{(k)} \neq 0)$とする。

step4　$y_n^{(k)} \in Md(y_1^{(k)}, D_{n-1}^{(k)})$

step5　$d_n^{(k)} = y_n^{(k)} - x_n^{(k)}$ とおいて、$y_n^{(k)}$ を起点とし、$d_n^{(k)}$ 方向に最小化して得られた点を$y_{n+1}^{(k)}$とする。

step6　$\| y_{n+1}^{(k)} - x_n^{(k)} \| = 0$ならば終了する。

step7　$d_i^{(k+1)} = \; d_{i+1}^{(k)}$, $i=1,2,\cdots,n-1$
$D_{n-1}^{(k+1)} = \{d_1^{(k+1)}, d_2^{(k+1)}, \cdots, d_{n-1}^{(k+1)}\}$、$x_n^{(k+1)} = y_{n+1}^{(k)}$、k=k+1 としてstep3に戻る。

定理3：平行超平面法において、k=n-1のとき、$d_1^{(n-1)}, d_2^{(n-1)}, \cdots, d_n^{(n-1)}$ が互いにQ-共役な方向となり、2次関数の最小点が求まる(証明についてはは文献[4]を参照)。

このアルゴリズムはstep7で$d_k^{(k)}$が捨てられ、新たな超平面$As(x_n^{(k+1)}, D_{n-1}^{(k+1)})$を定め、その超平面上の方向最小化点が$x_n^{(k+1)}$となる。次にstep3の手続きを経て、step4では、$As(x_n^{(k+1)}, D_{n-1}^{(k+1)})$と平行な超平面$As(y_1^{(k+1)}, D_{n-1}^{(k+1)})$上の方向最小化を行い、両超平面の方向最小化点を通る方向を新たな方向$d_n^{(k+1)}$としている(図1)。

平行超平面法の立場からPowell法を考えてみる。Powell法における方向$d_1^{(k)}, d_2^{(k)}, \cdots, d_n^{(k)}$を$e^{(k)} = d_1^{(k)}$、$D_{n-1}^{(k)} = \{d_2^{(k)}, d_3^{(k)}, \cdots, d_n^{(k)}\}$とすると、k=1の場合と平行超平面法のstep3の手続きを除き、平行超平面と同じ手続きである。したがって、Powell法において、$d_1^{(k)}$ は他の方向とは別の役割を果たしており、$d_1^{(k)}$が定理2を満足するように定めると、結局、平行超平面法のstep3の条件が必要となる。

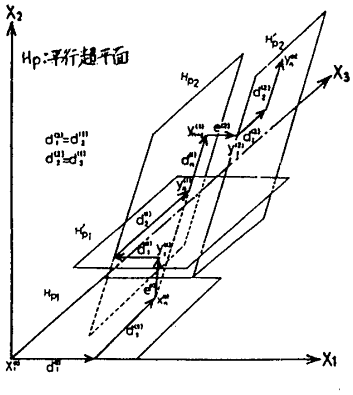

図1　3次元における平行超平面法

以上のことから、Powell法において、$d_1^{(k)}$ 方向の移動がなされなかった場合、強制的に$d_1^{(k)}$方向のステップの移動を行わなければ、新たな共役方向は生成されず、2次関数最小点が有限回で求まることが保証されなくなる(step3の条件がないPowell法の問題点については文献[3]でも指摘されている)。

以上の考察により、平行超平面法はPowell法を改良し、かつ$e^{(k)}$ に自由度を持たせたことから、Powell法の拡張アルゴリズムと考えられる。

4．数値例による比較

平行超平面法のstep3では$e^{(k)}$はspan$[D_{n-1}^{(k)}]$と独立な方向を定めるとあるだけで実際のアルゴリズムでは$e^{(k)}$を一意に定めなければならない。また、$q^{(k)}$についても具体的に定めてないので、次のようにして$e^{(k)}$, $q^{(k)}$を定める。

アルゴリズムMho：$e^{(k)}$を $e^{(k)} \perp$ span$[D_{n-1}^{(k)}]$とし、$q^{(k)}$は、$x_n^{(k)}$から$e^{(k)}$方向の最小化によって定める。

また、Powell法は前節に述べたように、$d_1^{(k)}$方向のステップの移動がなければ、新たな共役方向が生成されないという問題点が発生する。そのため、$d_1^{(k)}$方向への移動がない場合は強制的に$d_1^{(k)}$の方向にステップ移動を行うというように、Powell法を修正する。次のようなテスト関数を用い、2手法の比較を行った(結果を図2-a、bに示す)。

① $f(x)=100(x_2-x_1^2)^2+(1-x_1)^2$
　初期値：$f(-1.2,1.0)=24.2$、最小値：$f(1,1)=0$

② $f(x)=(x_1+10x_2)^2+5(x_3-x_4)^2+(x_2-2x_3)^4+10(x_1-x_4)^4$
　初期値：$f(3,-1,0,1)=215$、最小値：$f(0,0,0,0)=0$

両方法も、共役方向法の性質が生かされ、最小点近傍での収束が速い。全般的にアルゴリズムMhoがPowell法よりも優れている。このことから複雑な関数の最小化を行う場合は、方向の共役性より方向の1次独立性の方が重要であると考えられる。

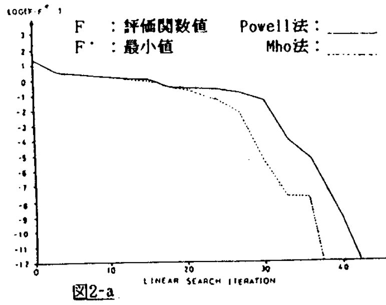

図2-a

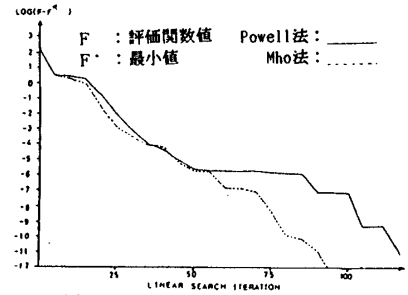

図2-b

5．おわりに

Powell法を拡張したアルゴリズムを構成し、検討した。

今後の課題としては、探索方向の共役性や独立性の尺度を本アルゴリズムにどう反映して行くかの検討が必要である。

この研究にあたって、有益な助言を頂いた北海道大学・伊達惇教授に深く感謝致します。

文献

[1] 今野浩・山下浩，非線形計画法．日科技連，1978.

[2] M.J.D.Powell, An Efficient Method for Finding the Minimum of a Function of Several Variables without Calculating Derivatives. Computer J., 7(1964), 155-162.

[3] W.I.Zangwill, Minimizing a Function without Calculating Derivatives. Computer J., 10 (1967), 293-296.

[4] 金光秀雄・宮腰政明・新保勝，平行超平面を用いたPowell法について．北海道大学工学部研究報告，107(1982), 95-104.