多様体上の高次元アルゴリズム

1G－3

＊下川 信祐 (ATR 環境適応通信研究所)
新上 和正 (ATR 環境適応通信研究所)

概要

高次元アルゴリズム (HA) は，最適化問題を解く考え方で，ハミルトン力学系の運動を用いて実現できます．様々な問題に適用できて極小解に捕まりにくい，変数の数が多いほど有効，パラメータの扱いが易しいなどの様々な利点を持ちます．一般のリーマン多様体上でハミルトン力学系の挙動を分析すると，球面などの拘束条件下で直接 HA を適用できることが解ります．

1 はじめに

ユークリッド空間 $\mathbb{R}^N$ 上に滑かな目的関数 $V(q)$ が与えられたとします．解の近傍を拡大するように問題を変形すれば，解が捕まりやすくなります．変数を添加して問題を高い次元から眺めると，そんな都合の良い変形が簡単にできるというのが，高次元アルゴリズム (HA) の考え方です．このアイデアは，ハミルトンの力学系を利用して具体化できます．それは，ハミルトニアン $H(p,q)=\frac{1}{2\gamma}(p,p)\gamma+V(q)$ が (p,q) 空間 (相空間) に生成する運動

$$\begin{cases} \dot{p} &= -\frac{\partial V(q)}{\partial q} \\ \dot{q} &= p(p,p)^{\gamma-1} \end{cases} \tag{1.1}$$

です．ここで，(p,p) はベクトル p の内積，γ は正定数です．この運動が混合的であれば，q 付近に滞在する時間 τ_q が

$$\tau_q = \mathsf{Const}\cdot(E-V(q))^{\frac{N}{2\gamma}-1} \tag{1.2}$$

となり，$\frac{N}{2\gamma}>1$ の時 $V(q)$ が小さいほど大きくなります．ここで E は運動のエネルギーです．HA は，極小値の近傍で運動量が大きいため local-minimum に捕まりにくい，変数の数が多いほど有効，プログラムが易しい，分散処理に向いているなど多くの利点があります [1, 2].

これまで HA の適用には一つの制限があります．目的関数の定義域がユークリッド空間 $\mathbb{R}^N$ に限られるという点です．例えば，球面，直交行列のなす空間，より一般に，対称空間や Lie 群などの多様体上で目的関数が与えられる場合，HA を直接適用できません．このような場合，通常，定義域の拘束条件をコストとして表現し，目的関数に付加してユークリッド空間上の問題と見なす方法がとられます．この場合，拘束条件にウエイトをつけて調整しますが，目的関数によっては定義域と定義域外の最小解が引き合い，定義域内の最小解に近づかないことがあります．

ここでは，運動そのものを定義域に拘束して解を求める方法について発表します．

2 運動の拘束

運動を部分多様体 $M\subset\mathbb{R}^N$ に拘束するには，例えば，ホロノーム拘束が利用できます [3]. $\mathbb{R}^N$ 上のハミルトン系は，ホロノーム拘束によっていつでも部分多様体 M 上の運動に拘束することができます，ホロノーム拘束は，ラグランジュ系で

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_M}=\frac{\partial L}{\partial q_M},\quad L=\frac{1}{2}(\dot{q},\dot{q})_{\mathbb{R}^N}+V(q), \tag{2.1}$$

と表現されます．ここで，q_M は，q の一部であって，M の局所座標系となるものです．ルジャンドル変換によってこれからハミルトン系を得ることができます．例えば，M が球面 S^{N-1} の場合，ハミルトニアンは

$$H(p[k],q[k])=\frac{(p[k],p[k])-(p[k],q[k])^2}{2}+V(q) \tag{2.2}$$

'Hamiltonian algorithms constrained on manifolds.'

SHIMOGAWA, Shinsuke (simogawa@acr.atr.co.jp) and SHINJO, Kazumasa (shinjo@acr.atr.co.jp).
ATR Adaptive Communications Research Labratories.
2-2 Hikaridai, Seika-cho, Souraku-gun, Kyoto Pref. 619-0288.

となります．ここで $q[k]$ は $q_k \neq 0$, での局所座標系 $(q_1, \cdots, q_{k-1}, q_{k+1}, \cdots, q_N)$ です．

ホロノーム拘束で得られる力学系は，一般にリーマン多様体上のハミルトン系になっています．これは，リーマン多様体 (M, g_M) の余接束 T^*M を相空間とするハミルトン系で，ハミルトニアンは

$$H := (p^2[g_M^*])^\gamma + \pi^* V : T^*M \to \mathbb{R}, \tag{2.3}$$

で与えられます．ここで，π は，標準射影 $T^*M \to M$, $p^2[g_M^*]$ はリーマン計量 $g_M : TM \times TM \to \mathbb{R}$ の双対双線形形式 g_M^* が定める 2 次関数 $T^*M \ni w \mapsto g_M^*(w, w)$ です．

定義域の多様体 M 上に適当なリーマン計量を与えることができれば，ホロノーム拘束に依らなくても M に運動を拘束することができます．

3 主定理

球面の例 (2.2) にみるように，運動を多様体上に拘束すると，運動量形式が q に依存するようになります．このことは，運動の滞在時間 τ_q の評価式が変わり，運動の最小値探索挙動が影響をうけることを意味します．そこで，HA が適用可能かどうか吟味するには，τ_q の具体的な表現が必要になります．この表現は次の定理の右辺で与えることがで来ます．これが本発表の主要な結果です．

定数 E に対して $H^{-1}(E) := \{w \in T^*M | H(w) = E\}$ とおきます．リュービル不変測度 L_E は，$L_E := \delta_{H^{-1}(E)} |\omega^N|$ で与えられます．ここで ω は，余接束 T^*M の標準的な正準 2 次微分形式です．この時，リュービル測度の射影 $\pi_* L_{E,q}$ は次のように与えられます：

Theorem 3.1. $q \in M$ とします．$\pi^{-1}(q) \cap H^{-1}(E)$ が空でないコンパクト集合とします．この時，等式

$$\pi_* L_{E,q} = \frac{1}{2\gamma}(E - V(q))^{\frac{N}{2\gamma}-1} \mathrm{vol}(S^{N-1}) \Omega_{(M, g_M), q}, \tag{3.1}$$

が成り立ちます．

ここで，$\mathrm{vol}(S^{N-1})$ は $N-1$ 次元単位球面の体積，$\Omega_{(M, g_M)}$ は リーマン多様体 (M, g_M) の体積密度形式で，

$$\Omega_{(M, g_M)} := \sqrt{|\det(g(\frac{\partial}{\partial q_i}, \frac{\partial}{\partial q_j}))|} |dq_1 \wedge \cdots \wedge dq_n| \tag{3.2}$$

と定義されます (c.f, [4])．ここで，$q = (q_1, \cdots, q_n)$ は，M の局所座標系です．

4 主定理の意味

定理は 滞在時間 τ_q の一般的な表現になっています．この結果から，滞在時間の q 依存性には，リーマン多様体としての体積密度形式の因子が出てくることが解ります．球面上のホロノーム拘束 (2.2) の場合，体積密度形式 $\Omega_{(M, g_M)}$ は一様であり，従来の評価式(1.2) が適用できることを意味します．一般の運動の拘束では体積密度形式 $\Omega_{(M, g_M)}$ に注意して滞在時間の q 依存性を吟味する必要があります．

5 おわりに

この予稿では理論的な側面に終始しました．発表では具体的な計算例も紹介します．

参考文献

[1] 新上和正, '高次元アルゴリズム,' bit, vol. 31, No. 7, pp. 2-8(1999).

[2] 新上和正, '高次元アルゴリズム, - 問題を解く一つの方法 -,' 日本ファジー学会誌, vol. 11, No. 3 ,pp. 382-395(1999).

[3] V. I. アーノルド, 古典力学の数学的方法. 安藤他訳, 岩波書店, 1980.

[4] 丹野修吉, 多様体の微分幾何学. 実教出版 1976.