論 文

逆行列ルーチンを用いた逐次座標増加法による極値探索*

安居院 猛** 中嶋 正之**

Abstract

In this paper, a new algorithm of the Searching Method is described.

Previously we suggested the new serching method SCAM (Sequential Coordinate Addition Method) and this algorithm has given the good results. However, in SCAM, linear searching is necessary and it takes much more time.

Here, we propose the SCAM using the Matrix Inversion Routine. If the object function is the quadratic form, linear searching is not necessary in this method. In this paper, we describe this new algorithm and the comparison of the convergency with orther methods.

1. はじめに

非線形計画法は極値探索法ともよばれ，Hook Jeeves 法や，シーケンシャル探索法のような試行探索法，最急降下法．Newton-Raphson 法のような傾斜探索法および共役勾配法，Variable Metric 法のような共役方向法がある．

筆者らは先に極値探索法の一手法として逐次座標増加法 (SCAM ; Sequential Coordinate Addition Method) を提案した[1]．本方式は，座標増加という考え方を極値探索に導入したものであり，共役方向法に属しており，各探索方向が互に共役方向となっているため極めて速い収束性が示されている．また逐次座標増加法は，従来 Variable Metric 法が持っていた極値到達後，その極値付近の形状が，二次形式近似として求まるという特徴を持つため，この二次形式近似から未知システムの同定が行えるという可能性を持っていた．しかしこの方法は，最適方向決定後その方向に沿っての極値を求める線形探索を必要とし，この線形探索に多大の時間を必要とし，また線形探索の精度が極値探索結果に大きな影響を与えている．そこで筆者らは線形探索の代りに新たに逆行列ルーチンを持つ逐次座標増加法について提案する．本方式は，最適方向決定後，最適方向に歩進を行い，この歩進により評価関数の同定を行い，さらに逆行列ルーチンを用いて最適点へ移行する方法である．

以下，二次形式の評価関数を用いて，逆行列ルーチンを持つ逐次座標増加法のアルゴリズムについて述べる．

記 号 表

A_i, A_i^{-1}: i 行 i 行の行列およびその逆行列

H_i: i 行 i 行の行列

A_J: n 行 n 列の対称正定行列

$\mathcal{A}_i$: n 行 i 列の矩形行列

$\mathcal{A}_{-i}$: n 行 $(n-i)$ 列の矩形行列

Λ_i: $\mathcal{A}_i$ の主座 i 行 i 列の行列

a_i: n 次元ベクトル，$\mathcal{A}_i$ の i 列目

a_{ii}: a_i の第 i 行目の要素

$a_i{}^i$: a_i の第1から第 i 番目の要素からなるベクトル

${}_s\gamma_i, {}_\alpha\gamma_i$: n 次元のこう配ベクトル

${}_s\gamma_i{}^i, {}_\alpha\gamma_i{}^i$: ${}_s\gamma_i, {}_\alpha\gamma_i$ の第1から第 i 番目の要素からなるベクトル

$u_\alpha{}^i, u_s{}^i, v_i$: i 次元ベクトル

u_{opt}, u^n: n 次元ベクトル

v_{ii}: v_i の第 i 番目の要素

α: スカラ

$(\cdot)^T$: 転置を表わす．

* Search Method by Sequential Coordinate Addition Method using the Matrix Inversion Routine by Takeshi AGUI and Masayuki NAKAJIMA (Tokyo Institute of Technology, Faculty of Engineering, Laboratory of Image science and Technology)

** 東京工業大学工学部像情報工学研究施設

2. 逐次座標増加法

評価関数 J が次式に示すように n 次元入力ベクトル u^n の二次形式で与えられ，かつ A_J, u_f^n が未知だとして，J を最小にする u^n を決定する問題を考える．

$$J=\{u^n-u_f^n, A_J(u^n-u_f^n)\}/2 \qquad (1)$$

ただし u^n: 入力ベクトル，u_f^n: $J=0$ とする u^n の値，A_J: 対称正定行列

ここで A_J を対称としたのは，A_J が非対称であっても対称行列へ変換できるためである[4]．逐次座標増加法は，入力座標数を順次増加しながら，ある部分空間の最適点から一次元上の部分空間の最適点へ進み，最終的に極値に達する方法である[1]．

一般に i 次元部分空間 ($n\geq i>0$) における現位置 u_s^i から最適点 u_{opt}^i までのベクトルを $\hat{v}_i$ とすると $\hat{v}_i$ は，Newton-Raphson 法[5]より，u_s^i でのこう配 $\gamma_i^i A_J$ より決まる逆行列 A_i^{-1} が既知であれば，次式より与えられる．

$$\hat{v}_i=A_i^{-1}(-\gamma_i^i) \qquad (2)$$

上式より，1回の試行で i 次元部分空間上の極値へ達することができる．しかしこの A_i^{-1} は存在するが，未知である．そこで A_i^{-1} を次に示すアルゴリズムにより定めるのが本方式である．

従来の極値探索法においては，各ステップごとに探索方向のみを決定し，最適点への移行は線形探索によって行っていた．これに対し本方式においては，線形探索を行うことなく極値探索を行えるようになっている．

3. 逆行列ルーチンを持つ逐次座標増加法

いま，A_i と A_{i-1} との間に次式の関係があるとする．

$$A_i=\begin{bmatrix} A_{i-1} & a_i^{i-1} \\ a_i^{i-1T} & a_{ii} \end{bmatrix} \qquad (3)$$

A_i の逆行列 A_i^{-1} は，次式で与えられる．

$$A_i^{-1}=\begin{bmatrix} A_{i-1}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}+\hat{\alpha}H_i \qquad (4)$$

ただし，$\hat{\alpha}=1/(a_{ii}-a_i^{i-1T}A_{i-1}^{-1}a_i^{i-1})$ (5)

$$H_i=\begin{bmatrix} A_{i-1}^{-1}a_i^{i-1}a_i^{i-1T}A_{i-1}^{-1} & -A_{i-1}^{-1}a_i^{i-1} \\ -a_i^{i-1T}A_i & 1 \end{bmatrix} \qquad (6)$$

そこで A_{i-1}^{-1} を前回の探索より既知とすると(4)式において，未知数は，$\hat{\alpha}$ と H_i である．(6)式で与えられる H_i において A_{i-1} は既知なので，a_i^{i-1} が与えられれば H_i は既知となる．そこで a_i^{i-1} として，

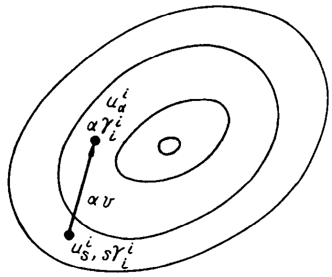

Fig. 1 The searching direction $_\alpha v$.

後に(16)式で，逐次求められる $\mathcal{A}_{i-1}$(以下同定行列という) の第 i 行目を用いる．このように H_i を定めると，探索方向 $\hat{v}_i$ は次式で与えられる．

$$\begin{aligned}\hat{v}_i&=A_i^{-1}(-{}_s\gamma_i^i)\\&=A_{i-1}^{-1}(-{}_s\gamma_i^{i-1})+\hat{\alpha}H_i(-{}_s\gamma_i^i)\end{aligned} \qquad (7)$$

(7)式において $\hat{\alpha}$ が未知数なので，$\hat{\alpha}$ の代りにある任意の正数 α を与え，そのときの v_i を ${}_\alpha v_i$ とする．

$${}_\alpha v_i=A_{i-1}^{-1}(-{}_s\gamma_i^{i-1})+\alpha H_i(-{}_s\gamma_i^i) \qquad (8)$$

また u_α^i として

$$u_\alpha^i=u_s^i+{}_\alpha v_i \qquad (9)$$

とおき u_α^i におけるこう配を ${}_\alpha\gamma_i$ とすると次式が求まる．

$${}_\alpha\gamma_i=A_J\left\{\begin{bmatrix} u_\alpha^i \\ 0^* \end{bmatrix}-u_{opt}\right\} \qquad (10)$$

ただし 0* は ($i+1$) 行目以下は 0

これより次式が求まる．

$$\begin{aligned}{}_\alpha\gamma_i-{}_s\gamma_i&=A_J\left\{\begin{bmatrix} u_\alpha^i \\ 0^* \end{bmatrix}-u_{opt}\right\}-A_J\left\{\begin{bmatrix} u_s^i \\ 0^* \end{bmatrix}-u_{opt}\right\}\\&=A_J\begin{bmatrix} u_\alpha^i-u_s^i \\ 0^* \end{bmatrix}\\&=A_J\begin{bmatrix} {}_\alpha v_i \\ 0^* \end{bmatrix}\end{aligned} \qquad (11)$$

ここで A_J を分解し次式とする．

$$A_J=[\mathcal{A}_{i-1}, a_i, \mathcal{A}_{-i}] \qquad (12)$$

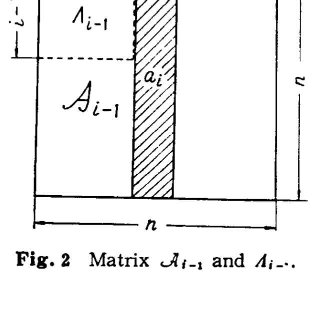

Fig. 2 Matrix $\mathcal{A}_{i-1}$ and A_{i-1}.

$$v_i=\begin{bmatrix} v_{i-1} \\ v_{ii} \end{bmatrix} \tag{13}$$

(12), (13)式を(11)式に代入すると次式が求まる.

$${}_\alpha\gamma_i-{}_s\gamma_i=\mathcal{A}_{i-1}v_{i-1}+a_iv_{ii} \tag{14}$$

この式を a_i について解くと次式のようになる.

$$a_i=({}_\alpha\gamma_i-{}_s\gamma_i-\mathcal{A}_{i-1}v_{i-1})/v_{ii} \tag{15}$$

これより A_J の第 i 行目が計算されたことになる.

$i-1$ 回目までの試行により $\mathcal{A}_{i-1}$ が求められているとすると(15)式により A_J の中で $\mathcal{A}_i(n\times i)$ まで定まることによる.

$$\mathcal{A}_i=[\mathcal{A}_{i-1}, a_i] \tag{16}$$

このように $\mathcal{A}_i$ が定まれば $\mathcal{A}_i$ の主座 $i\times i$ 行列 Λ_i を用いて Λ_i の逆行列 Λ_i^{-1} を掃出法，直交化法のような逆行列を求めるルーチンを用いて定めれば，(12)式より，極値まで歩進するベクトル $\hat{v}_i$ が次式のように定まる.

$$\hat{v}_i=\Lambda_i^{-1}(-{}_s\gamma_i{}^i) \tag{17}$$

これより i 次元部分空間上の極値が求まるので，このアルゴリズムを n 回繰り返すことにより，n 変数の評価関数における極値探索が行える.

以上が，逆行列ルーチンを持つ逐次座標増加法のアルゴリズムである．そのフローチャートを **Fig. 3** に示す.

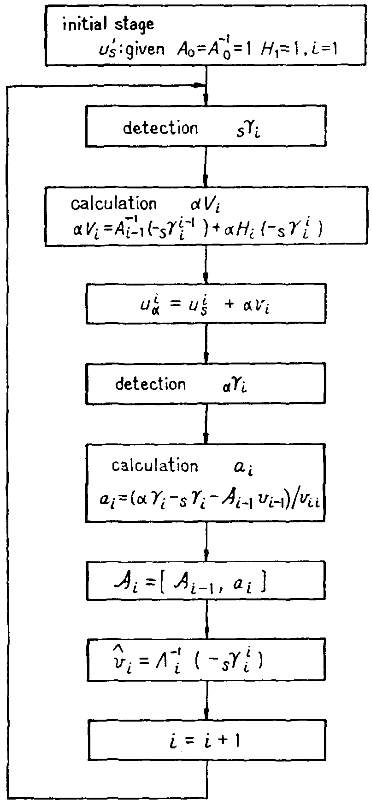

Fig. 3　Flow chart.

4.　数値計算例

本方式による極値探索を行った数値計算例を示す．ここでは評価関数として次式に示す二次形式評価関数を取りあげる.

$$J=u^{nT}A_Ju^n$$

$$A_J=\begin{pmatrix} 10.0 & 3.0 & 1.0 & 7.0 & 2.0 \\ 3.0 & 20.0 & 5.0 & 1.0 & 3.0 \\ 1.0 & 5.0 & 40.0 & 3.0 & 4.0 \\ 7.0 & 1.0 & 3.0 & 20.0 & 1.0 \\ 2.0 & 3.0 & 4.0 & 1.0 & 30.0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

行列 A_J は正定行列なので，評価関数 J は凸関数となり，$u^n=[0,0,0,0,0]$ のとき，最小値 $J=0$ をもつ．そこで初期位置 $u^{nT}=[1,1,1,1,1]$ として探索を行った結果を **Table 1** に示す．これより座標数の探索回数で，ほぼ極値 $J=0.1\times10^{-10}$ に到達していることが分かる．なお逆行列ルーチンは，掃出法を用いた．また逐次座標増加法の特徴は，極値到達後，評価関数の二次形式近似が同定されることにある．本方式より同定された Λ_5^{-1} を **Table 2** (次頁参照)に示す．比較のため，A_J^{-1} を掃出法により直接求めた結果を示すが，これより小数点第4位までは正しく求められていることが分かる.

Table 1　The searching result.

searching number	1 coord.	2 coord.	3 coord.	4 coord.	5 coord.	J Function value
initial value	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	180.0
1	−1.3000	1.0	1.0	1.0	1.0	127.0
2	−0.9057	−0.3141	1.0	1.0	1.0	94.11
3	−0.8757	−0.3135	−0.1492	1.0	1.0	42.95
4	−0.1830	−0.1029	−0.0850	0.0319	1.0	29.02
5	-0.374×10^{-6}	0.891×10^{-7}	0.124×10^{-6}	0.161×10^{-6}	0.529×10^{-6}	0.100×10^{-10}

Table 2 Matrix Λ_s^{-1} and A_J^{-1}.

	0.14032E 0	−0.18449E−1	0.30537E−2	−0.48334E−1	−0.63060E−2
	0.18449E−1	0.54651E−1	−0.63799E−2	−0.48591E−2	−0.35465E−2
Λ_s^{-1}	0.30537E−2	−0.63800E−2	0.26356E−1	−0.45568E−2	−0.29278E−2
	0.48334E−1	−0.48591E−2	−0.45568E−2	0.67302E−1	0.11005E−2
	0.63060E−2	−0.35465E−2	−0.29278E−2	0.11005E−2	0.34462E−1
	0.14032E 0	−0.18449E−1	0.30537E−2	−0.48333E−1	−0.63060E−2
	−0.18449E−1	0.54651E−1	−0.6357E−1	0.48590E−2	−0.35465E−2
A_j^{-1}	0.30537E−2	−0.63799E−2	0.26355E−1	−0.45567E−2	−0.29277E−2
	−0.48333E−1	0.48590E−2	0.45567E−2	0.67302E−1	0.11005E−2
	−0.63060E−2	−0.35464E−2	−0.29277E−2	0.11005E−2	0.34462E−1

5. 他の手法との比較

本方式と，他の極値探索法との収束の比較を行う．ここでは(17)式で与えた評価関数を用いて，共役こう配法，D.F.P. 法との比較を行う．

一般に，線形探索を必要とする極値探索手法は，アルゴリズムの計算時間に対して直線探索に要する時間の割合が多い．例えば，線形探索を，4回歩幅を変化させ，毎回5ステップずつ進むとすると直線探索に必要とされる計算時間は，D.F.P. 法では全計算時間中の約 85%，共役こう配法では約 90% である．このように直線探索を必要とする極値探索手法が，多大の時間を直線探索に費やすのに対し，逆行列ルーチンを持つ逐次座標増加法は，直線探索の代りに逆行列ルーチンを用いるので，逆行列を求める時間は，座標数が少ない段階では，極めて短くて済む．そのため，D.F.P. 法に較べて約 1/3 の時間で探索が行える．

Fig. 4 に，探索回数を用いて，収束の比較を行った結果を示す．これより本方式は，4回までの探索では共役こう配法，D.F.P. 法より収束は遅いが，5回目の探索において急速な収束が示されていて，他のいずれの方法よりも良い収束性が示されている．これは，4回までの探索では，全座標が導入されていないためであり，5回目の探索により Λ_5^{-1} が同定されて，全座標軸でのニートン法による歩進が行われるためである．

これより，本方式は，計算時間においても，収束性においても，従来の極値探索手法より良い結果となっていることが分かる．

6. おわりに

ここでは，非線形計画法の手法として，直線探索を行う代りに逆行列を用いる逐次座標増加法を提案したものである．本方式は，従来多大の時間を費やした直線探索を行わないため計算時間が大幅に短縮され，かつ収束性においても極めて良い結果を与えている．

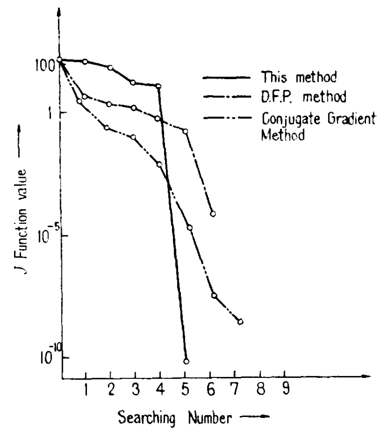

Fig. 4 Comparison of convergence.

しかし本方式は直線探索を行わないため，二次形式以外の非線形な評価関数には用いることができないという欠点がある．しかし，評価関数は，二次形式で与えられる場合が多く，また極値付近では，多くのシステムが二次形式に近似できるので，このような場合，始めに，直線探索を行う極値探索を用いて探索を行い，極値付近に到達後本方式に切り換える方法が有効であると思われる．また，本方式による各種の応用を，目下研究中である．

参 考 文 献

1) 長谷川，渡辺，中嶋：逐次座標増加による極値探索とその応用，電気学会論文誌，47-C, 6, pp. 250～257 (1972).
2) 長谷川，渡辺，中嶋：逐次座標増加による極値探索，昭和 46 年電気学会全国大会講演論文集，1385 (1971).
3) 安居院，中嶋：逆行列ルーチンを持った逐次座標増加法による極値探索，昭和 50 年電気学会全国大会講演論文集，1456 (1975).
4) 安居院，中嶋：予備探索を用いた逐次座標増加

法，計測自動制御学会論文集，Vol. 12, No. 4 (1976).
5) J. Kowalik, and M. R. Osborne : Methods for Unconstrained Optimization Problems, American Elsevier Publ. (1968).
5) L. C. W. Dixon : Nonlinear Optimisation, The English Universities Press, (1972).
6) 志水：システム制御と数理計画法，pp. 43～47. コロナ社 (1971).

(昭和 51 年 3 月 18 日受付)
(昭和 51 年 4 月 14 日再受付)