

高速自動微分法を用いた 最適化プログラム用数式入力機能の開発

5L-9

○野中 久典¹ 小林 康弘¹ 田村 正義²
(株)日立製作所¹ エネルギー研究所, ²ソフトウェア工場

1. はじめに

最急降下法、逐次二次計画法等、多くの非線形最適化アルゴリズムは、目的関数および制約関数の微分値の使用を前提としている。次元数が大きい場合、あるいは関数が複雑である場合、偏導関数を手作業で求めるには多大な労力がかかるため、従来、数値微分によって関数の微分値を計算していた。一般に数値微分は、計算時間、微分値の精度ともに数式微分に及ばないので、数式微分を自動化する意義は大きい。本報告では、最適化プログラムへの利用を目的とした、自動微分を中心とする数式入力機能について述べる。

2. 数式入力機能

数式入力機能の処理の流れを図1に示す。特徴的な処理を以下に述べる。

2.1 計算グラフの作成

数式微分の実行に先立ち、関数を計算グラフの形に展開する。本機能では、行列式、総和演算式、総乗演算式など、多様な関数を計算グラフに展開することができる。計算グラフはLISPのS式として明示的な形で記憶される。

2.2 目的関数・制約条件の自動微分

本機能では、高速自動微分法³⁾(FAD: Fast Automatic Differentiation)と呼ばれる手法に基づいて目的関数・制約関数の偏導関数を計算する。高速自動微分法は、計算グラフの理論を偏導関数計算に応用した算法であり、全ての入力変数に関する偏導関数を、変数の数に依らず、関数の評価に必要な手間の高々定数倍の手間で計算することができる。本機能では、計算グラフを深さ優先でたどる過程において要素的偏導関数の積を求め、各入力変数に対する偏導関数を効率的に作成する。

2.3 関数未定義領域の抽出

関数の定義領域に関しては、その引数が正でなくてはならないといった制約条件を適宜与える必要がある。本機能はパターン照合により関数が未定義となる領域を抽出し、逸脱を許さない制約条件に加える。

3. 数式入力機能の評価

非線形最適化問題を、本機能によって求めた数式微分と従来の数値微分(リチャードソン補外)とを用いて解き、本機能の有効性を定量的に評価した。この結果、数式微分を用いた場合、関数の評価回数を、問題によっては数値微分の10%以下に削減すると共に、より厳密に最適解を求められることが明らかになった。

参考文献

- 1) 伊理, 土谷, 星: 偏導関数計算と丸め誤差推定の自動化の大規模非線形方程式系への応用: 情報処理, Vol.26, No.11 (1985)

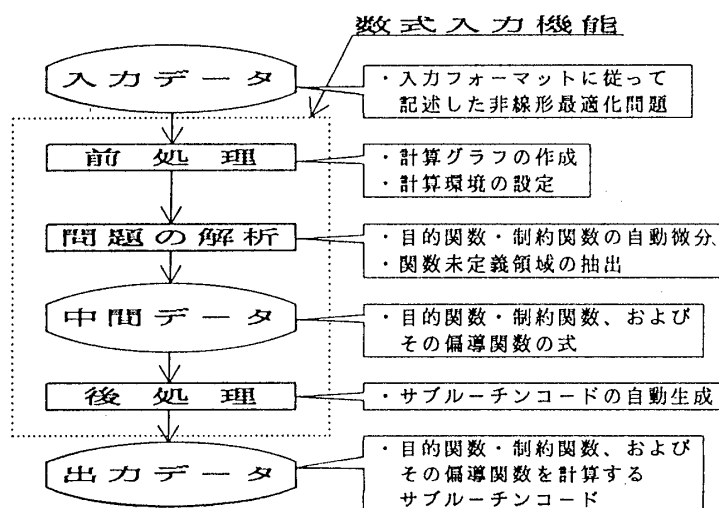


図1 数式入力機能の処理手順

Development of Symbolic Pre-processor for Optimization Program using Fast Automatic Differentiation.

Hisanori Nonaka, Yasuhiro Kobayashi, Masayoshi Tamura: Hitachi, Ltd.