



# システム制御理論と統計的機械学習

## 第 11 章：数理最適化

---

加嶋 健司

October 10, 2025

京都大学 情報学研究科

# 本章の流れ

## 11.1 半正定値計画問題

様々な制御問題の半正定値計画問題への帰着・緩和

## 11.2 確率勾配法

ビッグデータに関する評価関数の効率的な局所最適化手法

# 半正定値計画問題

---

## 線形システムの分布制御 (1) 定式化

雑音の無記憶性の仮定のもとでの線形確率システムの分布制御問題

$$x_{k+1} = A_k x_k + B_k u_k + v_k, \mathbb{E}[v_k] = 0, \text{Var}[v_k] = N_k \quad (11.1)$$

線形状態フィードバック (FF のみでは分散は変えられない)

$$u_k = -K_k(x_k - \mathbb{E}[x_k]) + \bar{u}_k + z_k, \mathbb{E}[z_k] = 0, \text{Var}[z_k] = Z_k \quad (11.2)$$

閉ループシステムの挙動は、期待値  $\bar{x}_k := \mathbb{E}[x_k]$  のフィードフォワード制御と分散  $\Sigma_k := \text{Var}[x_k]$  のフィードバック制御に分離

$$\bar{x}_{k+1} = A_k \bar{x}_k + B_k \bar{u}_k, \bar{x}_0 = \mathbb{E}[x_0] \quad (11.3a)$$

$$\Sigma_{k+1} = (A_k - B_k K_k) \Sigma_k (A_k - B_k K_k)^\top + B_k Z_k B_k^\top + N_k, \Sigma_0 = \text{Var}[x_0] \quad (11.3b)$$

## 線形システムの分布制御 (2) 線形制約への変換

### 期待値と分散のダイナミクス (再掲)

$$\bar{x}_{k+1} = A_k \bar{x}_k + B_k \bar{u}_k, \bar{x}_0 = \mathbb{E}[x_0]$$

$$\Sigma_{k+1} = (A_k - B_k K_k) \Sigma_k (A_k - B_k K_k)^\top + B_k Z_k B_k^\top + N_k, \Sigma_0 = \text{Var}[x_0]$$

$\Sigma_k$  と  $K_k$  の積が現れるため,  $\{\Sigma_k, K_k, Z_k, \bar{u}_k, \bar{x}_k\}_k$  の最適化を高速に解くことは難しい.

$$M_k = K_k \Sigma_k K_k^\top + Z_k, P_k = -\Sigma_k K_k^\top \quad (11.4)$$

により変数変換すると, 式(??)は  $\Sigma_k, P_k, M_k$  に関する線形等式制約

$$\Sigma_{k+1} = A_k \Sigma_k A_k^\top + A_k P_k B_k^\top + B_k P_k^\top A_k^\top + B_k M_k B_k^\top + N_k \quad (11.5)$$

## 線形システムの分布制御 (3) SDP への帰着

### 定理 11.1.1 – 変数変換の全単射性

以上の定義のもと,

$$\begin{bmatrix} \Sigma_k & P_k \\ P_k^\top & M_k \end{bmatrix} \succeq O \quad (11.6)$$

が成り立つ. 逆に, 式 (11.6) を満たす  $\Sigma_k, P_k, M_k$  に対して, 式 (11.4) を満たす  $K_k$  と  $Z_k \succeq O$  が存在する.

コスト関数が  $\Sigma_k, M_k, P_k$  の線形関数で表現できれば, 全体として制御問題は**半正定値計画問題** (semi-definite programming ; **SDP**)

たとえば, 二次形式は

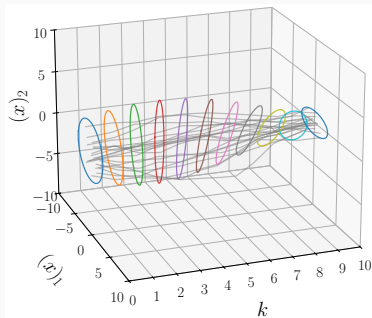
$$\mathbb{E} \left[ \begin{bmatrix} x_k \\ u_k \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} Q_k & S_k \\ S_k^\top & R_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ u_k \end{bmatrix} \right] = \text{tr} \left( \begin{bmatrix} Q_k & S_k \\ S_k^\top & R_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_k & P_k \\ P_k^\top & M_k \end{bmatrix} \right) \quad (11.7)$$

# 線形システムの分布制御 (4) 最適輸送制御の例

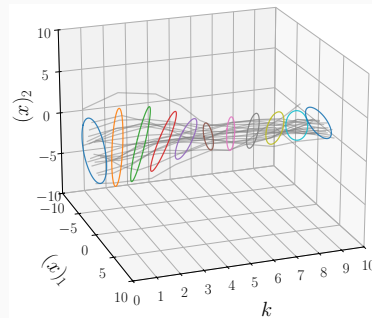
## 例 11.1.2 – 最適輸送制御

$$x_{k+1} = Ax_k + Bu_k + v_k, \quad x_0 \sim \mathcal{N}(0, 3I), \quad v_k \sim \mathcal{N}(0, N) \quad (11.8)$$

$\Sigma_{10} = \text{diag}(2, 0.5)$  を達成し  $\mathbb{E} [\sum_k u_k^2]$  を最小化



制約なし



機会制約 :  $(\Sigma_5)_{2,2} \leq 0.5$

# ベルマン方程式の不等式評価 (1) 多項式システム

遷移密度関数  $\Psi_k$  および初期状態  $x_0 \in \text{rv}(\mathbb{X})$  をもつ確率システム, 終端時刻  $\bar{k}$ ,  
ステージコスト  $l : \mathbb{X} \times \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{R}$ , 終端コスト  $l_f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R}_+$

## 仮定 11.1.3 – 多項式システム

偶数  $r, r' < r$  と整数  $\underline{r} \leq r$  に対して, つぎの  $c_\ell, \ell_f, c_\psi, c_0$  は既知である.

$$\ell(x, u) = c_\ell^\top m_r(x, u), \ell_f(x) = c_f^\top m_r(x) \quad (11.10)$$

$$\int_{\mathbb{X}} m_{\underline{r}}(x') \Psi(x'|x, u) dx' = c_\psi m_r(x, u) \quad (11.11)$$

$$\mathbb{E}_{x_0}[m_{\underline{r}}(x_0)] = c_0 \quad (11.12)$$

$m_r(x, u)$  を  $x, u$  の要素の次数  $r$  以下のすべての単項式からなるベクトルとし, さらに  $u$  を含まない項を抜き出したベクトルを  $m_r(x)$  と表記する.



## ベルマン方程式の不等式評価 (2) 多項式システム (つづき)

- $u$  はスカラー,  $\mathbf{x} := \begin{bmatrix} \bar{x} & \underline{x} \end{bmatrix}^\top$  が二次元であるとする,
 

$$m_2(\mathbf{x}, u) = [1, \bar{x}, \bar{x}^2, \underline{x}, \bar{x}\underline{x}, \underline{x}^2, u, \bar{x}u, \underline{x}u, u^2]^\top, \quad (11.13a)$$

$$m_2(\mathbf{x}) = [1, \bar{x}, \bar{x}^2, \underline{x}, \bar{x}\underline{x}, \underline{x}^2]^\top \quad (11.13b)$$

- 任意の  $r$  次以下の多項式は, 実ベクトル  $c$  と  $m_r(\mathbf{x}, u)$  の内積  $c^\top m_r(\mathbf{x}, u)$
- 制御対象  $x_{k+1} = f(x_k, u_k, v_k)$  において  $f$  が  $x_k, u_k$  に関して  $d$ -次多項式ならば,  $\int m_{\underline{r}}(f(\mathbf{x}, u, v))\varphi(v)dv$  は  $\underline{r}d$ -次多項式ベクトルであり, 式(11.11)から  $r \geq \underline{r}d$  でなければならない.
- $\|\mathbf{x}\|^2 < 1, -1 < u < 2$  のように状態空間や入力制約が多項式の不等式

$$\{(\mathbf{x}, u) : \mathbf{x} \in \mathbb{X}, u \in U(\mathbf{x})\} \subset \{(\mathbf{x}, u) : c_j^\top m_{r'}(\mathbf{x}, u) > 0, \forall j \in [\bar{j}]\} \quad (11.14)$$

を満たすとき, その情報も取り入れることができる

# 多項式計画問題 (1) 多項式の状態価値関数の下界

## 定理 4.1.13 – 状態価値関数の下界

$$\check{V}(\bar{k}, x) \leq \ell_f(x), \quad \forall x \in \mathbb{X},$$

$$\check{V}(k, x) \leq (\ell + \mathcal{A}_x[\check{V}])(k, x, u), \quad \forall k \in [\bar{k}], \quad x \in \mathbb{X}, \quad u \in U_k(x),$$

を満たす任意の  $\check{V}$  に対して,  $\inf J(u_{\cdot}) \geq \mathbb{E} [\check{V}(0, x_0)]$  が成り立つ.

## 定理 11.1.4 – 多項式計画問題による評価

$$- \eta_k^{\top} m_{\underline{r}}(x) + c_f^{\top} m_{\underline{r}}(x) = m_{r/2}(x)^{\top} M_{\bar{k}} m_{r/2}(x), \quad (11.17a)$$

$$- \eta_k^{\top} m_{\underline{r}}(x) + (c_{\ell}^{\top} + \eta_{k+1}^{\top} c_{\psi}) m_r(x, u) = m_{r/2}(x, u)^{\top} M_k m_{r/2}(x, u) \quad (11.17b)$$

を満たす  $\eta_k$ ,  $M_k \succeq O$  が存在するならば (等号は多項式の恒等式), 任意の  $u_{\cdot}$  に対して  $J(u_{\cdot}) \geq \eta_0^{\top} c_0$  である.

- $\check{V}(k, x) := \eta_k^{\top} m_{\underline{r}}(x)$

## 多項式計画問題 (2) 二乗和緩和

- **二乗和緩和 (sum-of-squares relaxation)** : 多項式の大域的非負性を二乗和に分解できるという十分条件に置き換える手法  
 $M_{\bar{k}} = \sum_i \xi_i \xi_i^\top$  と分解すると, 式 (11.17a) の右辺は  $\{\xi_i^\top m_{r/2}(x)\}_i$  の二乗の和
- 与えられた  $\eta_k$  に対して, 式 (11.17a) を満たす行列  $M_k$  は必ず存在するが, 一意ではない. この自由度を活用して, 条件を満たす行列を求める構造
  - $m_2(x) = [1, \bar{x}, \bar{x}^2, \underline{x}, \bar{x}\underline{x}, \underline{x}^2]^\top$  に対して  $\Delta(1, 5) - \Delta(2, 4), \Delta(2, 5) - \Delta(3, 4)$  などの線形結合で与えられる行列  $M$  は,  $m_2(x)^\top M m_2(x) = 0$  ( $\Delta(i, j)$  は  $(i, j)$ -成分のみ 1)
- 下界  $\eta_0^\top c_0$  の最大化も SDP

# 一般化モーメント問題 (1) 定式化

## 一般化モーメント問題

$x \in \text{rv}(\mathbb{R})$  および多項式  $h_i, g$  に対して,  $\mathbb{E}[h_i(x)], i = 1, 2, \dots$  の値が与えられたとき,  $\mathbb{E}[g(x)]$  はどのような値を取りうるだろうか.

## 例

例えば,  $b_d := \mathbb{E}[x^d] \geq 0, d = 4, 6$  が既知のときに,  $g(x) = x^5$  の期待値が知りたいければ,

$$\mathbb{E} \left[ \begin{bmatrix} x^2 \\ x^3 \end{bmatrix} [x^2, x^3] \right] = \begin{bmatrix} b_4 & \mathbb{E}[x^5] \\ \mathbb{E}[x^5] & b_6 \end{bmatrix} \succeq O \quad (11.21)$$

から  $(\mathbb{E}[x^5])^2 \leq b_4 b_6$  である.

## 一般化モーメント問題 (2) モーメント行列の正定性

### 定理 11.1.5 –モーメント行列の正定性にもとづく評価

$J(\pi) < J^*$  となる制御則  $\pi$  が存在するならば、つぎを満たす  $\zeta_{0:\bar{k}-1}$  が存在する

$$\mathcal{M}_1(\zeta_0) = c_0, \mathcal{M}_1\zeta_{k+1} = c_\psi\zeta_k, \forall k \in [\bar{k} - 1], \quad (11.24a)$$

$$\mathcal{M}_2 \text{diag}(\zeta_k, \dots, \zeta_k) \succeq O, \forall k \in [\bar{k}] \quad (11.24b)$$

$$J(\zeta_{0:\bar{k}-1}) := \sum_{k=0}^{\bar{k}-1} c_\ell^\top \zeta_k + c_f^\top c_\psi \zeta_{\bar{k}-1} < J^* \quad (11.25)$$

線形写像  $\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2$ ,

$$m_{\underline{x}}(x) = \mathcal{M}_1(m_r(x, u)) \quad (11.23a)$$

$$m_{r/2}(x)m_{r/2}(x)^\top = \mathcal{M}_2(m_r(x)) \quad (11.23b)$$

## 一般化モーメント問題 (3) 考察

- 対偶をとると、「式 (11.24) と  $J(\zeta) < J^*$  を満たす  $\zeta$  が存在しないならば  $J(\pi) < J^*$  となる  $\pi$  は存在しない」。こうした  $\zeta$  の存在性が失われる最大の  $J^*$ , つまり

$$\underset{\{\zeta_k\}_{k=0}^{k-1}}{\text{minimize}} J(\zeta) \quad \text{subject to (11.24)} \quad (11.27)$$

の最小値は最適制御性能の下界となる

- 次数  $r$  の増加とともに制約条件が増えるため最小値の値は増加し, よりよい下界が得られる構造となっている.
- モーメント行列の正定性にもとづく正定値計画問題の代わりに, チェビシェフの不等式を用いて線形計画問題に帰着することもできる.

## 確率勾配法

---

# 確率勾配法

回帰での標準的なコスト関数

$$L(p) := \frac{1}{\bar{s}} \sum_{s=1}^{\bar{s}} L_s(p), \quad (11.30)$$

$$L_s(p) := \|f(x_s; p) - y_s\|^2 \quad (11.31)$$

$f(x; p)$  がパラメータ  $p_l$  をもつ単純な非線形関数  $\Psi_l(z_l; p_l)$ ,  $l = 0, 1, \dots$  の合成関数

- 関数の入れ子構造と  $p$  の調整によって複雑な非線形性の表現
- $l$  を層 (layer) とよび,  $p := p_{0:\bar{l}}$  を用いて,

$$z_{l+1} := \Psi_l(z_l; p_l), \quad L_s(p) := z_{\bar{l}+1} \quad (11.32)$$

- 勾配法により得られる局所最適化で妥協

11.2.1 勾配ベクトルの効率的計算法, 11.2.2 誤差の収束性への影響



# 誤差逆伝播 (1) ニューラルネットワーク

## 注意 11.2.2 – ニューラルネットワーク

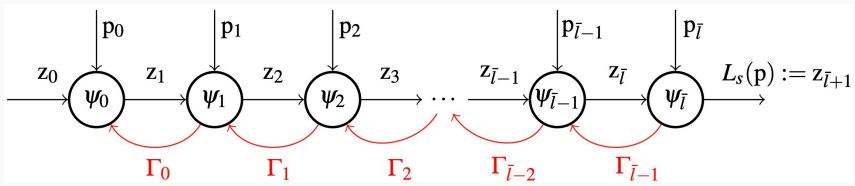
ニューラルネットワーク (neural networks) の一種である多層パーセプトロン (multi-layer perceptron) :

$$z_{l+1} = \Psi_l(z_l; p_l) := \bar{\psi}_l(W_l z_l + b_l) := \begin{bmatrix} \psi((W_l z_l + b_l)_1) \\ \vdots \\ \psi((W_l z_l + b_l)_{n_{l+1}}) \end{bmatrix}, \quad p_l := (W_l, b_l) \quad (11.36)$$

活性化関数 (activation function) とよばれる非線形関数  $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  :

- ・ シグモイド関数  $\varsigma(z) := \frac{1}{1+e^{-z}} = \frac{\tanh(z/2)+1}{2}$
- ・ 正規化線形関数 (rectified linear unit; **ReLU**)  $\text{ReLU}(z) := \max(0, z)$   
勾配消失や勾配爆発の抑制

## 誤差逆伝播 (2) 合成関数の微分の連鎖律



層数  $\bar{l}$  や  $p$  の次元が大きい場合などは、解析的に求めた導関数を保持するには膨大な記憶容量が必要となり、それに繰り返し値を代入することも効率的ではない。

微分の連鎖律

$$\frac{\partial L_s}{\partial p_l}(p) = \underbrace{\frac{\partial \Psi_{\bar{l}}}{\partial z_{\bar{l}}} \Big|_{(z_{\bar{l}}(p), p_{\bar{l}})} \cdots \frac{\partial \Psi_{l+1}}{\partial z_{l+1}} \Big|_{(z_{l+1}(p), p_{l+1})}}_{=: \Gamma_l(p)} \frac{\partial \Psi_l}{\partial p_l} \Big|_{(z_l(p), p_l)} \quad (11.33)$$

$$\Gamma_{\bar{l}} := I, \quad \Gamma_{l-1} := \Gamma_l \times \frac{\partial \Psi_l}{\partial z_l} \Big|_{(z_l(p), p_l)} \quad (11.34)$$

## 誤差逆伝播 (3) アルゴリズム

与えられた  $\tilde{p}$ ,  $l$  に対する「 $p = \tilde{p}$  における  $L_s$  の  $p_l$  に対する勾配ベクトル  $\left. \frac{\partial L_s}{\partial p_l} \right|_{p=\tilde{p}}$ 」

### 誤差逆伝播 (back propagation)

1.  $z_i(\tilde{p})$  を  $i = 1$  から順に  $\bar{l}$  まで計算 (順伝播)

$$z_{l+1} := \Psi_l(z_l; p_l), \quad L_s(p) := z_{\bar{l}+1} \quad (11.32)$$

2. 1. で求めた  $z_i(\tilde{p})$  と  $\tilde{p}$  を用いて,  $\Gamma_i$  を  $i = \bar{l}$  から  $l - 1$  まで逆順に計算 (逆伝播)

$$\Gamma_{\bar{l}} := I, \quad \Gamma_{l-1} := \Gamma_l \times \left. \frac{\partial \Psi_l}{\partial z_l} \right|_{(z_l(p), p_l)}, \quad \left. \frac{\partial L_s}{\partial p_l} \right|_{p=\tilde{p}} = \Gamma_{l-1} \times \left. \frac{\partial \Psi_l}{\partial p_l} \right|_{(z_l(\tilde{p}), \tilde{p}_l)} \quad (11.34)$$

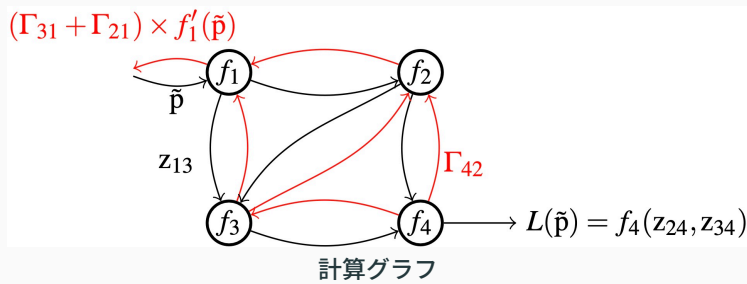
- 行列の積が現れるため, 層数  $\bar{l}$  が増える (深層になる) につれて勾配が 0 になったり (勾配消失), 発散したりする (勾配爆発) ことがしばしば生じるが, 近年はこうした問題を回避するさまざまな手法が研究されている.

## 誤差逆伝播 (4) 自動微分

**自動微分** (automatic differentiation あるいは algorithmic differentiation; AD) :

計算機上で表現された関数の勾配を効率的かつ正確に計算する技術の総称

- ・ 複雑な構造をもつ合成関数も系統的に扱うための**計算グラフ** (computation graph)
- ・ 繰り返しあらわれるベクトルとヤコビアン積 (vector-Jacobian product) も, 効率的に計算可能



## 確率近似法 (1) ミニバッチ最適化

### 注意 11.22.3 – ミニバッチ最適化

データ数  $\bar{s}$  が非常に大きい場合，毎ステップ  $\nabla L_s(p_k)$  をすべての  $s \in [\bar{s}]$  に対して計算することは効率が悪い．そこで確率的に  $[\bar{s}]$  の部分集合  $S_k$  を選択し ( $S_k$  をミニバッチ (mini-batch)， $S_k$  の要素数をバッチサイズとよぶ)， $\nabla L(p_k)$  の近似値として

$$(1/|S_k|) \sum_{s \in S_k} \nabla L_s(p_k)$$

がしばしば用いられる．また，ミニバッチの確率性より，勾配法が局所最適解に陥ることを抑制する効果もある．

- このように不確実な（確率雑音が付加された）勾配の情報にもとづいて実行される勾配法を，一般に **確率勾配法**（stochastic gradient decent; SGD）とよぶ．

## 確率近似法 (2) 学習率

学習率ともよばれるステップ幅  $a_k > 0$  を用いて,

$$p_{k+1} = p_k - a_k y_k, \quad y_k := \nabla L(p_k) + e_k \quad (11.39)$$

$\nabla L(p_k)$  が十分 0 に近づいた後など, 観測誤差  $e_k$  の影響で  $y_k$  と  $\nabla L(p_k)$  の符号が一致しない可能性が残り続けても, 適切な意味での収束は望めるか?

### 補題 11.2.4

非負の確定的な数列  $\{b_k\}_k, \{c_k\}_k, \{d_k\}_k$  が  $\sum_k c_k < \infty$  および

$$b_{k+1} \leq b_k - d_k + c_k, \quad \forall k \quad (11.40)$$

を満たすとき,  $\sum_{i=0}^k d_i, b_k$  はともに  $k \rightarrow \infty$  で有限の値に収束する.

## 確率近似法 (3) 収束の十分条件

### 定理 11.2.5 – 確率勾配法

時間的に独立な確率過程  $e_i$ , 非負の確定的な数列  $a_i$  に対して  
 $p_{k+1} = p_k - a_k y_k$ ,  $y_k := g(p_k) + e_k$  ( $p_0$  は定数) を考える. このとき,

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k = \infty, \quad \sum_{k=0}^{\infty} a_k^2 < \infty \quad (11.42)$$

$$g(p_*) = 0, \quad g(p)^\top (p - p_*) \geq \kappa_1 \|p - p_*\|^2, \quad \forall p \quad (11.43)$$

$$\|g(p)\|^2 \leq \kappa_2 + \kappa_3 \|p - p_*\|^2, \quad \forall p \quad (11.44)$$

$$\mathbb{E}[e_k] = 0, \quad \mathbb{E}[\|e_k\|^2] \leq \kappa_4, \quad \forall k \quad (11.45)$$

を満たす定数  $\kappa_i > 0$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$  および  $p_* \in \mathbb{R}^n$  が存在するならば,  $p_i$  は  $p_*$  に二次平均収束する.

- $g = \nabla L$  の場合は,  $L$  が強凸関数であり,  $p_*$  が  $L$  の最小化解

## 確率近似法 (4) 平均値推定の例

### 例 11.2.6 – 平均値推定における学習率の影響

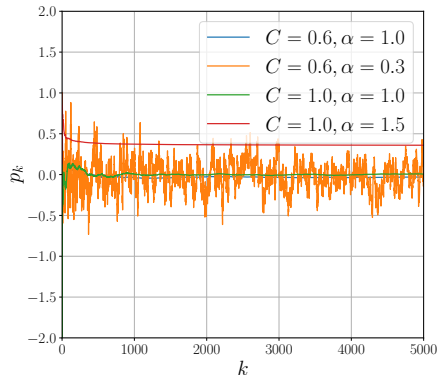
$z \in \text{rv}(\mathbb{R})$  の期待値  $p_* := \mathbb{E}[z]$  を求める  
( $g(p) := p - \mathbb{E}[z] = 0$  を解く)

標本  $z_k \sim z$ , i.i.d. が利用可能

$e_k := \mathbb{E}[z_k] - z_k$  は平均 0, i.i.d.

$$p_{k+1} = p_k - a_k y_k, \quad y_k = g(p_k) + e_k = p_k - z_k$$

- ロビンズ・モンロー (Robbins-Monro) 条件  
とよばれる  $\sum_{k=0}^{\infty} a_k = \infty, \sum_{k=0}^{\infty} a_k^2 < \infty$
- 典型的には  $Ck^{-\alpha}, C > 0, \alpha \in (1/2, 1]$



$$z \sim \mathcal{N}(0, 1), a_k = Ck^{-\alpha}, p_0 = 1.0$$



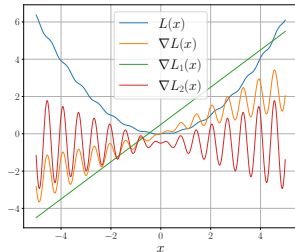
# 確率近似法 (5) ミニバッチにもとづく確率勾配法の例

## 例 11.2.7 – ミニバッチにもとづく確率勾配法

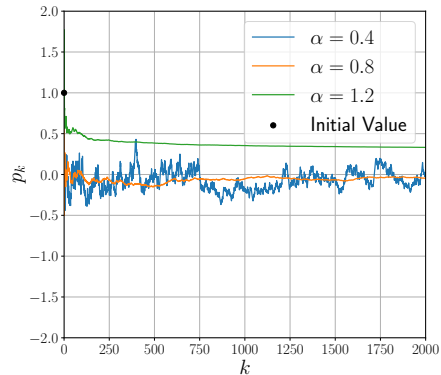
$$L := (L_1 + L_2)/2$$

$\iota_k$  : 独立同分布で 1 か 2 を確率 1/2 で出力

$$p_{k+1} = p_k - a_k y_k, \quad y_k := \nabla L_{\iota_k}(p_k)$$



$$L = (L_1 + L_2)/2$$



## 確率近似法 (6) 更新方法の改良

$p_{k+1} = p_k - a_k y_k$ ,  $y_k \approx \nabla L(p_k)$  の改良

### 注意 11.2.8 – 学習率の自動調整

- ・ 勾配を時間方向に平滑化した  $v_k$  を更新方向として用いる **モーメント法**

$$p_{k+1} = p_k - a v_k, \quad v_{k+1} = \beta v_k + y_k \quad (11.50)$$

- ・ 勾配を（二乗と平方根は要素ごと）擬似的に正規化する **RMSProp**

$$p_{k+1} = p_k - a \frac{y_k}{\sqrt{y_k^2 + \epsilon}} m_k, \quad m_{k+1} = \rho m_k + (1 - \rho) y_k^2 \quad (11.51)$$

- ・ これらの考え方を取り入れた **Adam**

# 第 11 章

## 1. 半正定値計画問題

線形システムの分布制御

ベルマン方程式の不等式評価

多項式計画問題

一般化モーメント問題

## 2. 確率勾配法

誤差逆伝播

確率近似法