オペレーションズ・リサーチ II (3)

田中 俊二

shunji.tanaka@okayama-u.ac.jp

スケジュール

No.	内容
1	導入 (非線形最適化問題，ゲーム理論，多目的最適化問題)
2	非線形計画 1 (勾配，ヘッセ行列，凸性，最適性条件，ニュートン法)
3	非線形計画 2 (最急降下法，準ニュートン法，共役勾配法，信頼領域法)
4	非線形計画 3 (制約つき問題の最適性条件，KKT 条件，ペナルティ関数法，２次計画法，逐次 2 次計画法)
5	ゲーム理論 1 (種々のゲーム，標準形，純粋戦略，混合戦略，ナッシュ均衡)
6	ゲーム理論 2 (展開形ゲーム，繰り返しゲーム)
7	多目的最適化 (パレート最適性，重み付け法，ϵ 制約法，重み付きメトリック法)

降下法 (descent method)

制約なし非線形計画問題 (P0)

$$\begin{array}{ll} \text{min} & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} & \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \end{array}$$

仮定

$f(\boldsymbol{x})$ は C^1 **級**

降下法 (descent method)

- $f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) < f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ が成り立つよう $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を更新
- 勾配 $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ の情報を使うため，勾配法 (gradient method) とも
- ニュートン法と同様停留点を探す
- 運悪く鞍点が見つかる可能性もあるが，極大点は回避可能
- **大域的収束**
- 降下法: **最急降下法** (勾配降下法)，**準ニュートン法**，etc.
- 共役降下法: **共役勾配法**，etc.

最急降下法

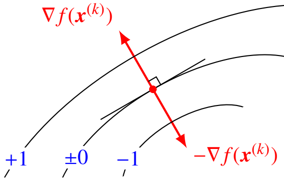
降下法の基本的枠組

$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\boldsymbol{d}^{(k)}$ により解を更新

- $\boldsymbol{d}^{(k)}$: 探索方向 (search direction)
- $\alpha^{(k)}$: ステップ幅 (step size. $\alpha^{(k)} > 0$)

最急降下法 (steepest descent method)

$\boldsymbol{d}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ とする降下法



最急降下とは?

最急降下方向

最急降下方向 (steepest descent direction) $\boldsymbol{d}^*$

$\boldsymbol{x}^{(k)}$ における $f(\boldsymbol{x})$ の方向微分が最小になる方向

最急降下方向の別の表現

$f(\boldsymbol{x})$ の 1 次近似を $h_k(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)})$ として，$h_k(\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{d})$ を最小化する $\boldsymbol{d}$

最急降下方向の計算

$$h_k(\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}$$

$f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ は定数なので，$h_k(\boldsymbol{x})$ を最小化するには，$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}$ を最小化すればよい．

$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}$ は $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ と $\boldsymbol{d}$ の内積，$\boldsymbol{d}$ を単位ベクトルとすると

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} = \|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\| \cdot \|\boldsymbol{d}\| \cos\theta = \|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\| \cos\theta$$

ただし，θ は $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ と $\boldsymbol{d}$ のなす角．したがって，$\theta = \pi$ のとき最小で，最急降下方向 $\boldsymbol{d}^*$ は

$$\boldsymbol{d}^* = -\frac{\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})}{\|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\|}$$

最急降下法

$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\boldsymbol{d}^{(k)}$, $\boldsymbol{d}^{(k)} = -\nabla \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})$ により解を更新

ステップ幅の決定

降下法の基本的枠組

$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\boldsymbol{d}^{(k)}$ により解を更新

- $\boldsymbol{d}^{(k)}$: 探索方向 (search direction)
- $\alpha^{(k)}$: **ステップ幅 (step size．$\alpha^{(k)} > 0$)**

ステップ幅 $\alpha^{(k)}$ の決定

探索方向 $\boldsymbol{d}^{(k)}$ を決定後，ステップ幅 $\alpha^{(k)}$ を決定 $\Rightarrow f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\boldsymbol{d}^{(k)})$ を最小化

直線探索 (line search)

- $f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{d}^{(k)})$ が最小となる α を探索
- $f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{d}^{(k)})$ は α に関する 1 変数関数なので，$f(\boldsymbol{x})$ の最小化より楽
- とはいえ，最小化する (最適解を求める) には計算時間がかかるので，特定の条件を満たす α を探索
  - アルミホ (Armijo) 条件
  - ウルフ (Wolfe) 条件
  - etc.

直線探索：アルミホ条件

アルミホ条件 (Armijo condition)

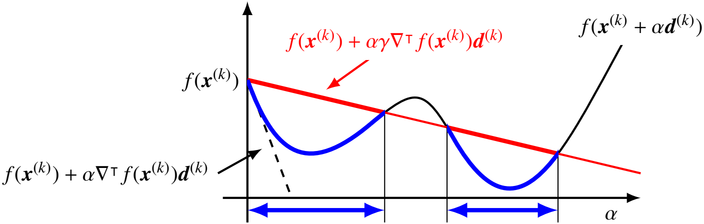
γ $(0 < \gamma < 1)$ をパラメータとして，

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \le f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha\gamma \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \boldsymbol{d}^{(k)}$$

バックトラック法 (backtracking) によるステップ幅の探索

1. (初期化) $\alpha := 1$ とする．
2. (反復) α がアルミホ条件を満たさないなら，$\alpha := \beta\alpha$ として 2 へ．
3. (終了) $\alpha^{(k)} := \alpha$ として終了．

β $(0 < \beta < 1)$，γ $(0 < \gamma < 1)$ はパラメータ



直線探索：ウルフ条件

アルミホ条件の問題点

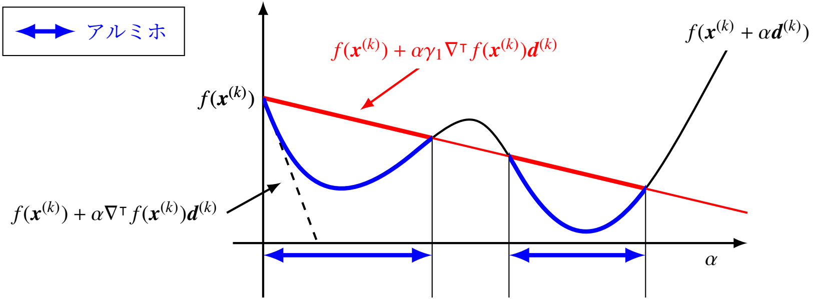
小さな α が選ばれる可能性 $\Rightarrow$ $f(\boldsymbol{x})$ があまり減少しない

弱ウルフ条件 (weak Wolfe conditions)

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \leq f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha\gamma_1 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \quad \text{(アルミホ条件)}$$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \geq \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \quad \text{(曲率条件)}$$

曲率条件 (curvature condition) により，小さすぎる α を回避 $(0 < \gamma_2 < 1)$



直線探索：ウルフ条件

アルミホ条件の問題点

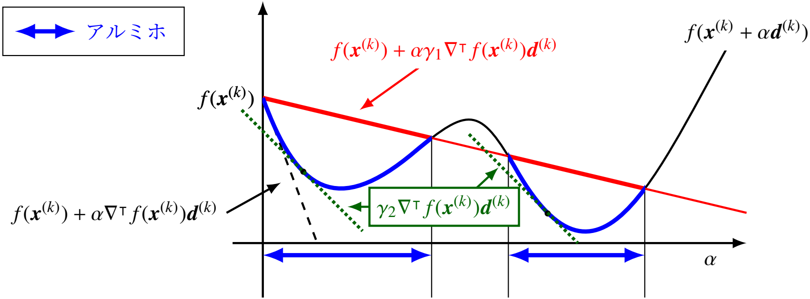
小さな α が選ばれる可能性 $\Rightarrow$ $f(\boldsymbol{x})$ があまり減少しない

弱ウルフ条件 (weak Wolfe conditions)

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \le f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha\gamma_1 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \qquad \text{(アルミホ条件)}$$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \ge \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \qquad \text{(曲率条件)}$$

曲率条件 (curvature condition) により，小さすぎる α を回避 $(0 < \gamma_2 < 1)$



直線探索：ウルフ条件

アルミホ条件の問題点

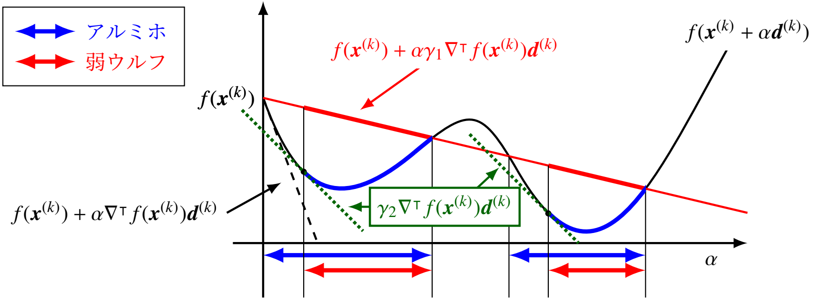
小さな α が選ばれる可能性 $\Rightarrow f(\boldsymbol{x})$ があまり減少しない

弱ウルフ条件 (weak Wolfe conditions)

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \leq f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha\gamma_1 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \quad \text{(アルミホ条件)}$$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \geq \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \quad \text{(曲率条件)}$$

曲率条件 (curvature condition) により，小さすぎる α を回避 $(0 < \gamma_2 < 1)$



直線探索：ウルフ条件

アルミホ条件の問題点

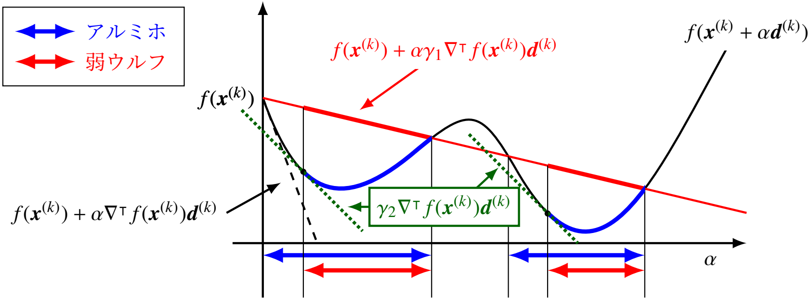
小さな α が選ばれる可能性 $\Rightarrow$ $f(\boldsymbol{x})$ があまり減少しない

強ウルフ条件 (strong Wolfe conditions)

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \leq f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha\gamma_1 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \qquad \text{(アルミホ条件)}$$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \geq \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \qquad \text{(曲率条件)}$$

曲率条件 (curvature condition) により，小さすぎる α を回避 $(0 < \gamma_2 < 1)$



直線探索：ウルフ条件

アルミホ条件の問題点

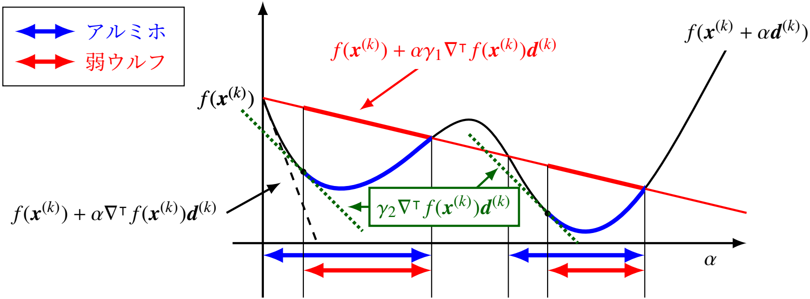
小さな α が選ばれる可能性 $\Rightarrow$ $f(\boldsymbol{x})$ があまり減少しない

強ウルフ条件 (strong Wolfe conditions)

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \leq f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha\gamma_1 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \quad \text{(アルミホ条件)}$$

$$|\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)}| \leq \gamma_2 |\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)}| \quad \text{(曲率条件)}$$

正の大きな曲率を禁止 ($0 < \gamma_2 < 1$)



直線探索：ウルフ条件

アルミホ条件の問題点

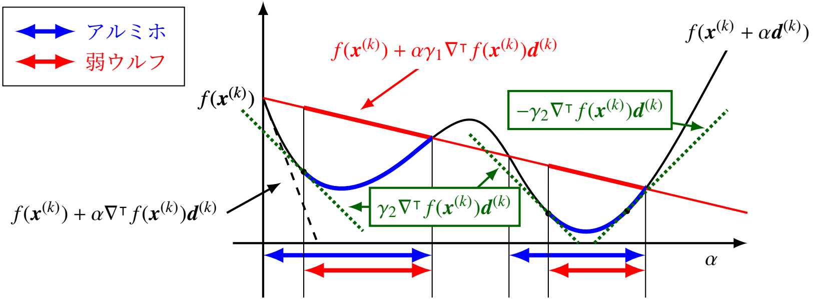
小さな α が選ばれる可能性 $\Rightarrow$ $f(\boldsymbol{x})$ があまり減少しない

強ウルフ条件 (strong Wolfe conditions)

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \leq f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha \gamma_1 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \boldsymbol{d}^{(k)} \quad \text{(アルミホ条件)}$$

$$|\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \boldsymbol{d}^{(k)}| \leq \gamma_2 |\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \boldsymbol{d}^{(k)}| \quad \text{(曲率条件)}$$

正の大きな曲率を禁止 $(0 < \gamma_2 < 1)$



直線探索：ウルフ条件

アルミホ条件の問題点

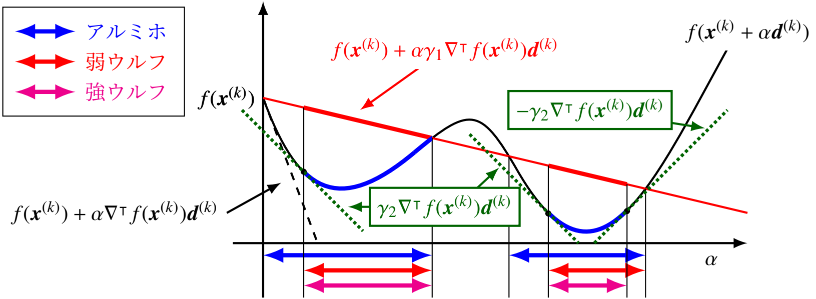
小さな α が選ばれる可能性 $\Rightarrow$ $f(\boldsymbol{x})$ があまり減少しない

強ウルフ条件 (strong Wolfe conditions)

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \le f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha\gamma_1 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)} \quad \text{(アルミホ条件)}$$

$$|\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)}| \le \gamma_2 |\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d}^{(k)}| \quad \text{(曲率条件)}$$

正の大きな曲率を禁止 $(0 < \gamma_2 < 1)$



強ウルフ条件を満たすステップ幅の探索

$\phi(\alpha) = f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)})$ とおく．強ウルフ条件は

$$\phi(\alpha) \le \phi(0) + \alpha\gamma_2\phi'(0) \qquad \text{(アルミホ条件)}$$

$$|\phi'(\alpha)| \le \gamma_2|\phi'(0)| \qquad \text{(曲率条件)}$$

その 1：区間の探索

1. (初期化) $\alpha_0 := 0$ とし，$\alpha_1 > 0$ を適当に選ぶ．$i := 1$ とする．
2. (区間内の探索) $\phi(\alpha_i) > \phi(0) + \alpha_i\gamma_2\phi'(0)$，または $i > 1$ かつ $\phi(\alpha_i) > \phi(\alpha_{i-1})$ ならば，その 2 で $[\alpha_{i-1}, \alpha_i]$ を探索した結果を出力し終了．
3. (解が見つかった) $|\phi'(\alpha_i)| \le -\gamma_2\phi'(0)$ ならば，α_i を出力し終了．
4. (区間内の探索) $\phi'(\alpha_i) \ge 0$ ならば，その 2 で $[\alpha_i, \alpha_{i-1}]$ を探索した結果を出力し終了．
5. (区間の更新) α_{i+1} $(\alpha_{i+1} > \alpha_i)$ を選び，$i := i + 1$ とする．2 へ．

その 2：区間 $[\ell, u]$ 内の探索

1. (区間内の点の選択) 適当な方法で $v \in [\ell, u]$ を選ぶ．
2. (区間の縮小) $\phi(v) > \phi(0) + v\gamma_2\phi'(0)$ または $\phi(v) > \phi(\ell)$ ならば，$u := v$ とする．1 へ．
3. (終了) $|\phi'(v)| \le -\gamma_2\phi'(0)$ ならば，v を出力し終了．
4. (区間の反転) $\phi'(v)(u - \ell) \ge 0$ ならば，$u := \ell$ とする．
5. (区間の縮小) $\ell := v$ として 1 へ．

強ウルフ条件を満たすステップ幅の探索 (続き)

その 1 の概略

- 以下のいずれかが初めて成り立つ α_i を探す

$$\phi(\alpha_i) > \phi(0) + \alpha_i \gamma_2 \phi'(0)$$
$$\phi(\alpha_i) \geq \phi(\alpha_{i-1})$$
$$\phi'(\alpha_i) \geq 0$$

- α_{i-1} がいずれも満たしていないことを使えば，区間 $[\alpha_{i-1}, \alpha_i]$ に強ウルフ条件を満たす α が存在することを示せる
- 区間の更新の際の α_{i+1} は，α_i の定数倍に選べばよい

その 2 の概略

- 以下の関係が成り立つよう ℓ, u を更新
  - ℓ: これまで見つかったアルミホ条件を満たす α のうち，$\phi(\alpha)$ が最も小さいもの
  - u: $\phi'(\ell)(u - \ell) < 0$ を満たす
- $v \in [\ell, u]$ の簡単な決定法は $v = \dfrac{\ell + u}{2}$．$\phi(\alpha)$ の多項式近似を用いる方法もある

この探索法はややこしいので，参考程度

最急降下法の適用例 (その 1)

例題

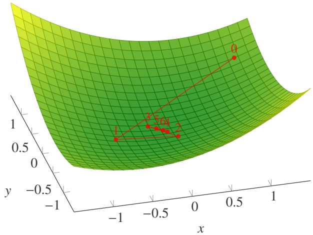
$$\begin{aligned} \text{min} \quad & f(x_1, x_2) = 4(x_1 + x_2)^2 + 9(x_1 - x_2)^2 \\ \text{s.t.} \quad & x_1,\ x_2 \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

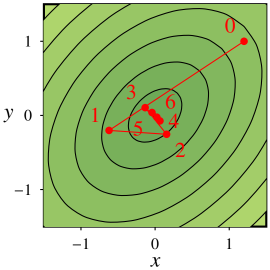
直線探索にはアルミホ条件 (バックトラック法) を用い，ステップ幅の初期値は 1，$\gamma = 0.1$，$\beta = 0.8$ とする

1. 初期解を $\boldsymbol{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} 1.2000 \\ 1.0000 \end{pmatrix}$ とする
2. 探索方向を $\boldsymbol{d}^{(0)} = -\nabla f(1.2000, 1.0000) = \begin{pmatrix} -21.2000 \\ -14.0000 \end{pmatrix}$ とする.
3. バックトラック法でアルミホ条件を満たすステップ幅 $\alpha^{(0)}$ を求める. $\alpha^{(0)} = \beta^{11} \simeq 0.0859$ のときアルミホ条件を満たす.
4. $\boldsymbol{x}^{(1)} := \boldsymbol{x}^{(0)} + \alpha^{(0)}\boldsymbol{d}^{(0)} = \begin{pmatrix} -0.6211 \\ -0.2026 \end{pmatrix}$ と更新する.

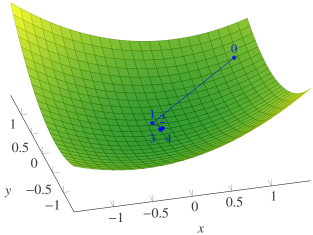
以下，同様に解を更新すると，$\boldsymbol{x}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0.1553 \\ -0.2544 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{x}^{(3)} = \begin{pmatrix} -0.1342 \\ 0.1048 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{x}^{(4)} = \begin{pmatrix} 0.0654 \\ -0.0741 \end{pmatrix}$,
$\boldsymbol{x}^{(5)} = \begin{pmatrix} -0.0419 \\ 0.0394 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{x}^{(6)} = \begin{pmatrix} 0.0233 \\ -0.0241 \end{pmatrix}$. (最適解は $\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{0}$.)

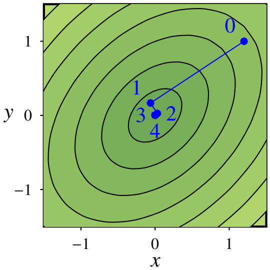
最急降下法の適用例 (その 2)





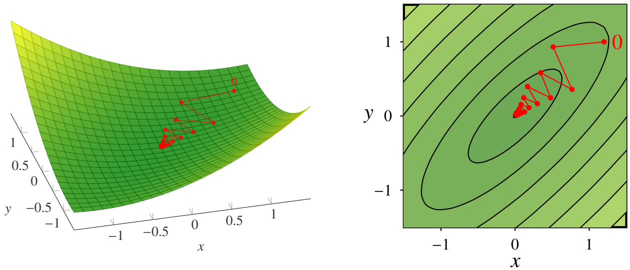
バックトラック法による直線探索



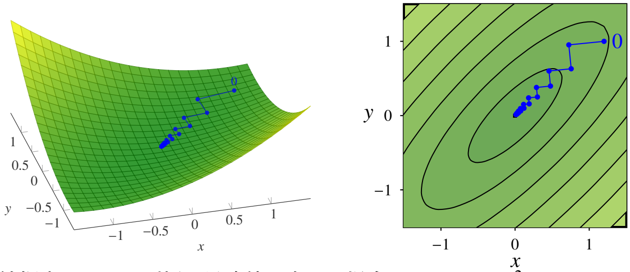


直線探索でステップ幅の最適値を求めた場合

最急降下法の適用例 (その 2)



バックトラック法による直線探索 ($f = (x_1 + x_2)^2 + 9(x_1 - x_2)^2$)



直線探索でステップ幅の最適値を求めた場合 ($f = (x_1 + x_2)^2 + 9(x_1 - x_2)^2$)

最急降下法の長所・短所

最急降下法の長所

- ニュートン法のようにヘッセ行列を用いないため，目的関数が 1 回微分可能なら適用可能
- 大域的収束
- アルゴリズムが簡単で適用が容易
- 降下方向に向かうため，ニュートン法のように極大点を探すことはない
  ただし，運が悪ければ鞍点が見つかることもある

最急降下法の短所

- 収束が遅い．**1 次収束**
  - 探索方向がジグザグ
  - 直線探索で最適なステップ幅を選んでも回避不可能
- 先ほどの 2 つの例：ニュートン法なら 1 回で収束 (凸 2 次関数なので)

ニュートン法再び

ニュートン法のアルゴリズム

1. **(初期化)** 適当に初期解 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ を決める．$k := 0$ とする
2. **(終了判定)** 終了条件を満たしているなら $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を解として出力し終了
3. **(解の更新)** ニュートン方向 $\boldsymbol{d}^{(k)} := -\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ を用いて，解を $\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{d}^{(k)}$ により更新
4. **(次の反復へ)** k を 1 増やして 2 へ

- ニュートン法は降下法と類似
  $\boldsymbol{d}^{(k)}$ 方向に直線探索するニュートン法：直線探索付きニュートン法
- 最急降下法より収束が速い．2 次収束
- ただし，ニュートン方向が降下方向ではない可能性
- 一般に大域的収束の保証はなし
- ヘッセ行列が正則でない可能性も

ニュートン法再び

ニュートン法のアルゴリズム

1. **(初期化)** 適当に初期解 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ を決める．$k := 0$ とする
2. **(終了判定)** 終了条件を満たしているなら $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を解として出力し終了
3. **(解の更新)** ニュートン方向 $\boldsymbol{d}^{(k)} := -\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ を用いて，解を $\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{d}^{(k)}$ により更新
4. **(次の反復へ)** k を 1 増やして 2 へ

- ニュートン法は降下法と類似
  $\boldsymbol{d}^{(k)}$ 方向に直線探索するニュートン法：直線探索付きニュートン法
- 最急降下法より**収束が速い**．2 次収束
- ただし，ニュートン方向が**降下方向**ではない可能性
- 一般に**大域的収束**の保証はなし
- ヘッセ行列が**正則**でない可能性も

$\Downarrow$

準ニュートン法
(quasi-Newton method)

準ニュートン法 (Quasi-Newton method)

基本方針

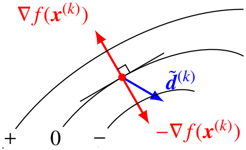
- ヘッセ行列 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ の代わりに正定行列 $B^{(k)}$
- ニュートン方向 $\boldsymbol{d}^{(k)} = -\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ の代わりに $\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} = -(B^{(k)})^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$
- $B^{(k)}$ の選び方
  - $\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)}$ が降下方向
  - $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ を近似

降下方向

最急降下方向 $-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ となす角が ±90° 以内 (内積が正) なら降下方向

$$(\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)})^\top (-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})) = \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)}) (B^{(k)})^{-1} \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)}) > 0$$

$B^{(k)}$ が正定行列なら $(B^{(k)})^{-1}$ も正定行列であることに注意！



準ニュートン法 (Quasi-Newton method)

基本方針

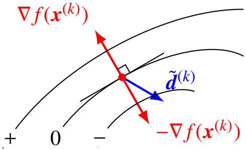
- ヘッセ行列 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ の代わりに正定行列 $B^{(k)}$
- ニュートン方向 $\boldsymbol{d}^{(k)} = -\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ の代わりに $\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} = -(B^{(k)})^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$
- $B^{(k)}$ の選び方
  - **$\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)}$ が降下方向**
  - $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ を近似

降下方向

最急降下方向 $-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ となす角が ±90° 以内 (内積が正) なら降下方向

$$(\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)})^\top(-\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})) = \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})(B^{(k)})^{-1}\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)}) > 0$$

$B^{(k)}$ が正定行列なら $(B^{(k)})^{-1}$ も正定行列であることに注意！



準ニュートン法 (続き)

基本方針

- ヘッセ行列 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ の代わりに正定行列 $B^{(k)}$
- ニュートン方向 $\boldsymbol{d}^{(k)} = -\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ の代わりに $\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} = -(B^{(k)})^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$
- $B^{(k)}$ の選び方
  - $\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)}$ が降下方向
  - **$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ を近似**

ヘッセ行列 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ の近似

- $\nabla f(\boldsymbol{x})$ の 1 次近似

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) \simeq \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \simeq \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}) \qquad (*)$$

- (*) 式を用いて $B^{(k)}$ を決定 ⇒ **セカント条件 (secant condition)**

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = B^{(k+1)}(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)})$$

準ニュートン法のアルゴリズム

準ニュートン法のアルゴリズム

1. (初期化) 適当に初期解 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ および $B^{(0)}$ を決める．$k := 0$ とする
2. (終了判定) 終了条件を満たしているなら $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を解として出力し終了
3. (解の更新) 準ニュートン方向 $\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} := -(B^{(k)})^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ を用いて，解を $\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)}$ により更新
4. ($B^{(k+1)}$ の計算) $B^{(k+1)}$ を計算
5. (次の反復へ) $k := k + 1$ として 3 へ

- ステップ幅 $\alpha^{(k)}$ は直線探索により計算
- $B^{(k)}$ の計算には，**BFGS 更新**がよく用いられる
- $B^{(0)}$ は正定行列を選ぶ．たとえば $B^{(0)} = I$ など
- 準ニュートン法は大域的収束で**超 1 次収束**

BFGS 更新 (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update)

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \frac{(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top\boldsymbol{y}^{(k)}}$$

ただし，$\boldsymbol{y}^{(k)} = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$，$\boldsymbol{s}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}$

準ニュートン法のアルゴリズム (続き)

BFGS 更新 (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update)

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \frac{(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}$$

ただし，$\boldsymbol{y}^{(k)} = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$， $\boldsymbol{s}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}$

- $B^{(k+1)}$ は**セカント条件**を満たす
- $B^{(k)}$ が正定行列かつ $(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)} > 0$ なら，$B^{(k+1)}$ は正定行列
- 弱ウルフ条件の**曲率条件**を満たすステップ幅を用いると，$(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)} > 0$ は成り立つ

セカント条件

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = B^{(k+1)}(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)})$$

弱ウルフ条件

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)}) \leq f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha\gamma_1 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \qquad \text{(アルミホ条件)}$$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \geq \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \qquad \text{(曲率条件)}$$

$B^{(k+1)}$ の正定性を示すのは少し面倒なので，それ以外の部分を示す

練習問題：BFGS 更新がセカント条件を満たすことの証明

BFGS 更新 (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update)

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \frac{(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}$$

セカント条件

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = B^{(k+1)}(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)})$$

練習問題：BFGS 更新がセカント条件を満たすことの証明

BFGS 更新 (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update)

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \frac{(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}$$

セカント条件

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = B^{(k+1)}(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$\boldsymbol{y}^{(k)} = B^{(k+1)}\boldsymbol{s}^{(k)}$$

練習問題：BFGS 更新がセカント条件を満たすことの証明

BFGS 更新 (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update)

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \frac{(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}$$

セカント条件

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) = B^{(k+1)}(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$\boldsymbol{y}^{(k)} = B^{(k+1)}\boldsymbol{s}^{(k)}$$

$$\begin{aligned}
B^{(k+1)}\boldsymbol{s}^{(k)} &= B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)} - \frac{(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}}\boldsymbol{s}^{(k)} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}\boldsymbol{s}^{(k)} \\
&= B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)} - \frac{1}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}}(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top\boldsymbol{s}^{(k)} + \frac{1}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top\boldsymbol{s}^{(k)} \\
&= B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)} - \frac{1}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}}(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)} + \frac{1}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top\boldsymbol{y}^{(k)} \\
&= B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)} - B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)} + \boldsymbol{y}^{(k)} \\
&= \boldsymbol{y}^{(k)}
\end{aligned}$$

曲率条件を満たすステップ幅に対し条件式が成り立つことの証明

BFGS 更新 (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update)

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \frac{(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}$$

条件式

$$(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)} > 0$$

曲率条件 $(0 < \gamma_2 < 1)$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \geq \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)}$$

曲率条件を満たすステップ幅に対し条件式が成り立つことの証明

BFGS 更新 (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update)

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \frac{(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}$$

条件式

$$(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)} > 0$$

$$\alpha^{(k)}(\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)}))\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} > 0$$

曲率条件 $(0 < \gamma_2 < 1)$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \geq \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)}$$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \geq \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \tag{*}$$

曲率条件を満たすステップ幅に対し条件式が成り立つことの証明

BFGS 更新 (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno update)

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \frac{(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})(B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top B^{(k)}\boldsymbol{s}^{(k)}} + \frac{\boldsymbol{y}^{(k)}(\boldsymbol{y}^{(k)})^\top}{(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)}}$$

条件式

$$(\boldsymbol{s}^{(k)})^\top \boldsymbol{y}^{(k)} > 0$$

$$\alpha^{(k)}(\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)}))\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} > 0$$

曲率条件 $(0 < \gamma_2 < 1)$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \geq \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)}$$

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \geq \gamma_2 \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \qquad (*)$$

$B^{(k)}$ が正定行列なので $(B^{(k)})^{-1}$ も正定行列であり，

$$\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} = -\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})(B^{(k)})^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) < 0$$

したがって，条件式は，(*) 式より

$$\alpha^{(k)}(\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)}))\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} \geq \alpha^{(k)}(\gamma_2 - 1)\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\tilde{\boldsymbol{d}}^{(k)} > 0$$

共役 (きょうやく) 勾配法

基本的な考え方

- 最急降下法の問題点：探索方向がジグザグ ⇒ 前々回の探索方向が使われる
- 過去に探索した方向とは異なる方向を探索 ⇒ **共役方向**

まず凸 2 次計画問題で考える．すなわち $f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\top Q\boldsymbol{x} + \boldsymbol{q}^\top\boldsymbol{x}$ (Q は $n \times n$ 正定行列).

共役方向 (conjugate direction)

$\boldsymbol{d}_i \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{d}_j \in \mathbb{R}^n$ が $\boldsymbol{d}_i^\top Q\boldsymbol{d}_j = 0$ を満たすとき，$\boldsymbol{d}_i, \boldsymbol{d}_j$ は Q **共役** (Q-conjugate) であるという．

凸 2 次計画問題に対する共役勾配法 (conjugate gradient method)

探索方向，ステップ幅を以下で決定 ($\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)}$)

$$\alpha^{(k)} = -\frac{\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)}}{(\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)})^\top Q\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)}}, \quad \bar{\boldsymbol{d}}^{(k)} = \begin{cases} -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) & (k = 0) \\ -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \dfrac{\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})Q\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)}}{(\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)})^\top Q\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)}}\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)} & (k \geq 1) \end{cases}$$

一般の非線形最適化問題に対する共役勾配法

凸 2 次計画問題に対する共役勾配法

探索方向，ステップ幅を以下で決定 ($\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)}$)

$$\alpha^{(k)} = -\frac{\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)}}{(\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)})^\top Q\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)}}, \quad \bar{\boldsymbol{d}}^{(k)} = \begin{cases} -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) & (k=0) \\ -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \dfrac{\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})Q\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)}}{(\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)})^\top Q\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)}}\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)} & (k \geq 1) \end{cases}$$

- 共役勾配法の方向 $\bar{\boldsymbol{d}}_{(k)}$: $\bar{\boldsymbol{d}}^{(0)}, \ldots, \bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)}$ と Q 共役
- Q が正定行列なら，n 反復以内に (大域的) 最適解に収束
  (ニュートン法は 1 反復で収束)

一般の非線形最適化問題に対する共役勾配法

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)}$$
$$\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \beta^{(k)}\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)}$$

- ステップ幅 $\alpha^{(k)}$ は直線探索で決定
- Q の代わりにヘッセ行列 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})$．ただし，直接計算しない
  $\beta^{(k)}$ を Q に依存しない形に変更

一般の非線形最適化問題に対する共役勾配法の探索方向

一般の非線形最適化問題に対する共役勾配法

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)}$$
$$\bar{\boldsymbol{d}}^{(k)} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \beta^{(k)}\bar{\boldsymbol{d}}^{(k-1)}$$

$\beta^{(k)}$ の決定法：Fletcher-Reeves 法

$$\beta^{(k)} = \frac{\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})}{\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k-1)})\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k-1)})} = \frac{\|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\|^2}{\|\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k-1)})\|^2}$$

$\beta^{(k)}$ の決定法：Polyak-Polak-Ribiére 法

$$\beta^{(k)} = \frac{(\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k-1)}))^\top \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})}{\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k-1)})\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k-1)})} = \frac{(\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k-1)}))^\top \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})}{\|\nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k-1)})\|^2}$$

信頼領域法

基本的な考え方

- 探索方向の決定に目的関数の 2 次近似を用いる (ニュートン法と同様)

$$m_k(\boldsymbol{s}) = \tilde{f}_k(\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{s}) = f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{s} + \frac{1}{2}\boldsymbol{s}^\top \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{s}$$

- $\boldsymbol{x}^{(k)}$ から半径 $\Delta^{(k)}$ の領域 (**信頼領域**) 内で 2 次近似が信頼できると考える
- 探索方向 $\boldsymbol{s}^{(k)}$ は，信頼領域内で $m_k(\boldsymbol{s})$ を最小化する点を用いて計算
- 最小化する点は必ず存在．厳密に求める，もしくは降下法などで近似的に求める
- ステップ幅は 1 に固定 (ニュートン法と同様)
- 現在の信頼領域を元の目的関数とその 2 次近似との差 (近似度) で評価し，信頼半径 $\Delta^{(k)}$ を増減させる
- 大域的収束

信頼領域法のアルゴリズム

信頼領域法 (trust region method) のアルゴリズム

1. **(初期化)** 適当に初期解 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ および初期信頼半径 $\Delta^{(0)}$ を決める．また，パラメータ $\eta_1, \eta_2, \gamma_1, \gamma_2$ を $0 < \eta_1 < \eta_2 < 1, 0 < \gamma_2 < 1 \leq \gamma_1$ の範囲で設定する．$k := 0$ とする
2. **(終了判定)** 終了条件を満たしているなら $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を解として出力し終了
3. **(探索方向・近似度の計算)** 問題 $(\mathrm{M}^{(k)})$ の最適解 (もしくは近似解) を求めて $\boldsymbol{s}^{(k)}$ とし，近似度を $\rho^{(k)} = \dfrac{f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{s}^{(k)}) - f(\boldsymbol{x}^{(k)})}{m_k(\boldsymbol{s}^{(k)}) - m_k(\boldsymbol{0})}$ とする
4. **(解の更新)** $\rho^{(k)} \geq \eta_1$ なら $\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{s}^{(k)}$，そうでなければ $\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)}$ とする
5. **(信頼半径の更新)** $\Delta^{(k+1)}$ を以下で決定
   - $\eta_2 \leq \rho^{(k)}$: $\Delta^{(k+1)} := \max(\gamma_2 \|\boldsymbol{s}^{(k)}\|, \Delta^{(k)})$
   - $\eta_1 \leq \rho^{(k)} < \eta_2$: $\Delta^{(k+1)} := \Delta^{(k)}$
   - $\rho^{(k)} < \eta_1$: $\Delta^{(k+1)} := \gamma_1 \Delta^{(k)}$
6. **(次の反復へ)** k を 1 増やして 2 へ

問題 $(\mathrm{M}^{(k)})$

$$\begin{aligned} \min\ & m_k(\boldsymbol{s}) - m_k(\boldsymbol{0}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{s}^\top \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{s} + \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{s} \\ \text{s.t.}\ & \|\boldsymbol{s}\| \leq \Delta^{(k)} \end{aligned}$$