最急降下法

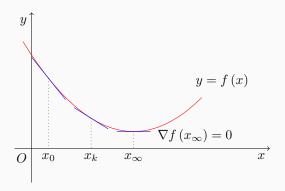
宮澤 彬

総合研究大学院大学 博士前期 1 年 miyazawa-a@nii.ac.jp

July 13, 2015

最急降下法

関数の停留点(特に極小点)を、反復的な計算で求めるにはどうすればよいか、接線の傾きが負である点から、0に近づく方向に移動していけばよさそうである。

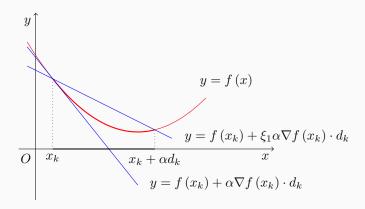


Armijo 条件

 $0 < \xi_1 < 1$ であるような定数 ξ_1 に対して,

$$f(x_k + \alpha d_k) \le f(x_k) + \xi_1 \alpha \nabla f(x_k) \cdot d_k$$

を満たす $\alpha > 0$ を選ぶ. この条件を **Armijo 条件** という.

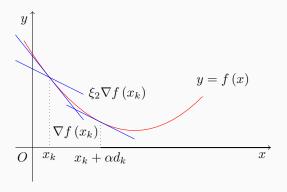


Wolfe 条件

 $0 < \xi_1 < \xi_2 < 1$ であるような ξ_1, ξ_2 に対して

$$\xi_2 \nabla f(x_k) \cdot d_k \le \nabla f(x_k + \alpha d_k) \cdot d_k$$

を満たす $\alpha > 0$ を選ぶ. この条件を**曲率条件 (curvature condition)** と呼ぶ. この条件と Armijo 条件を合わせて **Wolfe 条件**と呼ぶ.



定理 目的関数 f(x) は下に有界で、かつ、初期点 x_0 における準位集合 $\{x\,;\,f(x)\leq f(x_0)\}$ におけるを含む開集合 U において連続的微分可能であるとする。また勾配 $\nabla f(x)$ は U で Lipschitz 連続であるとする。すなわち、ある正定数 L が存在して、任意の $x,y\in U$ に対して

$$\left\|\nabla f\left(x\right) - \nabla f\left(y\right)\right\| \le L \left\|x - y\right\|$$

が成り立つとする.

このとき $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ を以下の条件を満たすようにとる.

- ▶ 各 α_k が Wolfe 条件を満たす.
- ト 各 d_k が降下方向である。 すなわち $\nabla f(x_k) \cdot d_k < 0$ を満たす。 すると点列 $(x_k)_k$ について

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\nabla f(x_k) \cdot d_k}{\|d_k\|} \right)^2 < \infty$$

が成り立つ.

証明 曲率条件と $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$ から

$$\xi_{2}\nabla f\left(x_{k}\right)\cdot d_{k} \leq \nabla f\left(x_{k+1}\right)\cdot d_{k}$$
$$\left(\xi_{2}-1\right)\nabla f\left(x_{k}\right)\cdot d_{k} \leq \left(\nabla f\left(x_{k+1}\right)-\nabla f\left(x_{k}\right)\right)\cdot d_{k}$$

が成り立つ. Lipschitz 条件より

$$(\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)) \cdot d_k \le ||\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)|| ||d_k|| \le L ||x_{k+1} - x_k|| ||d_k|| \le \alpha_k L ||d_k||^2$$

が成り立つ、これらから

$$\alpha_k \ge \frac{\left(\nabla f\left(x_{k+1}\right) - \nabla f\left(x_k\right)\right) \cdot d_k}{L \|d_k\|^2}$$

$$\ge \frac{\xi_2 - 1}{L} \frac{\nabla f\left(x_k\right) \cdot d_k}{\|d_k\|^2}$$

を得る.

得られた α_k を Armijo 条件に代入して

$$f(x_{k+1}) \le f(x_k) + \xi_1 \alpha_k \nabla f(x_k) \cdot d_k \le f(x_k) - \frac{\xi_1 (1 - \xi_2)}{L} \frac{(\nabla f(x_k) \cdot d_k)^2}{\|d_k\|^2}$$

となる. ここで k=0 から m までの和をとると

$$\sum_{k=0}^{m} (f(x_{k+1}) - f(x_k)) \le -\sum_{k=0}^{m} \frac{\xi_1 (1 - \xi_2)}{L} \frac{(\nabla f(x_k) \cdot d_k)^2}{\|d_k\|^2}$$
$$f(x_{m+1}) - f(x_0) \le -\frac{\xi_1 (1 - \xi_2)}{L} \sum_{k=0}^{m} \frac{(\nabla f(x_k) \cdot d_k)^2}{\|d_k\|^2}$$

を得る.

上式の右辺は m が増加するにつれて単調に減少する. また f は下に有界であると仮定していたので

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\nabla f\left(x_{k}\right) \cdot d_{k}\right)^{2}}{\left\|d_{k}\right\|^{2}} < \infty$$
 (Zoutendijk)

を得る.

上の (Zoutendijk) を **Zoutendijk 条件**² と呼ぶ.

Zoutendijk 条件が成り立つとする。このとき $S:=\sum_{k=0}^{\infty}\left(\nabla f\left(x_{k}\right)\cdot d_{k}\right)^{2}/\left\Vert d_{k}\right\Vert ^{2}$ はある有限の値である。Cauchy-Schwarz の不等式から,任意の自然数 m について

$$\left(\sum_{k=0}^{m} \frac{|\nabla f(x_k) \cdot d_k|}{\|d_k\|}\right)^2 \le \sum_{k=0}^{m} \frac{(\nabla f(x_k) \cdot d_k)^2}{\|d_k\|^2} \le S$$

が成り立つ。ゆえに

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left|\nabla f\left(x_{k}\right) \cdot d_{k}\right|}{\left\|d_{k}\right\|} \leq \sqrt{S}$$

となり、この級数は収束することが分かる。したがって

$$\frac{\left|\nabla f\left(x_{k}\right)\cdot d_{k}\right|}{\left\|d_{k}\right\|}\to 0 \ \left(k\to\infty\right)$$

となる.

最急降下法の大域収束性

特に $d_k = -\nabla f\left(x_k\right)$ をとる.この d_k は $\nabla f\left(x_k\right) \cdot d_k = -\left\|f\left(x_k\right)\right\|^2 < 0$ を満たすので,降下方向である.さらに先に示した結果から,

$$\frac{\left|\nabla f\left(x_{k}\right)\cdot d_{k}\right|}{\left\|d_{k}\right\|} = \left\|f\left(x_{k}\right)\right\| \to 0 \ \left(k \to \infty\right)$$

を満たす.

Cauchy-Schwarz の不等式における等号成立条件から、 $\|d_k\|$ を固定して考えたとき、この d_k は $\nabla f\left(x_k\right)\cdot d_k$ を最小にするものである。つまり最も急に減少させるものである。そのため $d_k = -\nabla f\left(x_k\right)$ とする方法を**最急降下法** (steepest descent method) と呼ぶ。

参考文献・おわりに

主に以下を参考にした.

▶ 矢部博, 新・工科系の数学「工学基礎 最適化とその応用」, 数理工学社, 2006.

また、このスライドのソースコードは https://github.com/pecorarista/documents にある.