Optimization Algorithm on Riemannian Manifolds

小泉孝弥

立命館大学大学院 修士 2 年

April 13, 2022

Contents

Introduction

本発表では制約空間 M がリーマン多様体となっている非線形連続最小化問題を扱う．すなわち，関数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ が与えられたとき，

$$\left|\begin{array}{ll} \text{minimize} & f(x) \\ \text{subject to } x \in M & \end{array}\right.$$

制約空間 M がリーマン多様体となっている場合，f を M に制限することで，制約なしの問題と考えることができる．今回は，勾配降下法をリーマン多様体上に拡張し，数値計算を行なった結果を報告する．

Contents

Riemmannian Manifold

Definition (Riemmannian Manifold)

M を可微分多様体とする．各点 $x \in M$ の接空間 T_xM に内積 $g_x : T_xM \times T_xM \to \mathbb{R}$ が定まっているとき, $g = (f_x)_{x \in M}$ をリーマン計量と呼び, 組 (M, g) をリーマン多様体 *(Riemmannian Manifold)* という．

Definition (Gradient)

(M, g) をリーマン多様体とし, $f : M \to \mathbb{R}$ を可微分関数とする．$x \in M$ について f の x での勾配 $\mathrm{grad} f(x) \in T_xM$ を以下で定める．

$$\forall \xi \in T_xM, g(\mathrm{grad} f(x), \xi) = Df(x)[\xi]$$

Sphere

Example (Sphere)

自然数 $n \geq 2$ に対して，球面 $S^{n-1} := \{x \in \mathbb{R}^n \mid x^\top z = 0\}$ は可微分多様体となる．また，$x \in S^{n-1}$ での接空間 $T_x S^{n-1}$ は

$$T_x S^{n-1} = \{z \in \mathbb{R}^n \mid x^\top z = 0\}$$

となる．ここで，$g_x : T_x S^{n-1} \times T_x S^{n-1} \to \mathbb{R}$ を

$$g_x(\xi, \eta) = \xi^\top \eta$$

と定めれば，g_x は $T_x S^{n-1}$ の内積となるので，S^{n-1} はリーマン多様体である．

Stiefel Manifold

Example (Stiefel Manifold)

$X = [x_1 x_2 \ldots x_p] \in \mathbb{R}^{n\times p} (n \geq p)$ で，$\{x_i\}_{i=1}^{p} \subset \mathbb{R}^n$ が正規直交系であるような $n \times p$ 行列全体は可微分多様体となる．この多様体をシュティーフェル多様体 *(Stiefel Manifold)* といい，$\mathrm{St}(p, n)$ と表す．すなわち

$$\mathrm{St}(p, n) = \{X \in \mathbb{R}^{n\times p} \mid X^\top X = \mathbb{I}_p\}.$$

である．

$X \in \mathrm{St}(p, n)$ での接空間 $T_X St(p, n)$ は,

$$T_X \, \mathrm{St}(p, n) = \left\{ Z \in \mathbb{R}^{n \times p} \mid X^T Z + Z^T X = 0 \right\}$$
$$= \left\{ X\Omega + X_\perp K \mid \Omega \in \mathrm{Skew}(p), K \in \mathbb{R}^{(n-p) \times p} \right\}$$

となる．ここで $\mathrm{Skew}(p) = \{\Omega \in \mathbb{R}^{p \times p} \mid \Omega^\top = -\Omega\}$ であり, $X_\perp$ は $\mathrm{span}(X)^\perp = \mathrm{span}(X_\perp)$ を満たす $n \times (n-p)$ 行列である.
$g_X : T_X \, \mathrm{St}(p, n) \times T_X \, \mathrm{St}(p, n) \to \mathbb{R}$ を,

$$g_X(\xi, \eta) = \mathrm{tr}(\xi^\top \eta)$$

と定めれば, g_X は内積となるので, $\mathrm{St}(p, n)$ はリーマン多様体である.

Contents

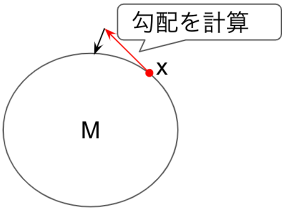
Gradient Decent

Algorithm 1 Gradient Decent(GD)

Require: f: differentiable function on $\mathbb{R}^n$
Require: $0 < t < 1$:
$x \leftarrow x_0 \in \mathbb{R}^n$
while x not converged **do**
$x \leftarrow x - t \,\mathrm{grad}_{\mathbb{R}^n} f(x) \in \mathbb{R}^n$
end while
return x

Motivation

勾配降下法を制約空間がユークリッド空間に埋め込まれたリーマン部分多様体に拡張する．その際に，勾配の部分をリーマン多様体上の勾配に変更するだけでは，リーマン多様体からはみ出てしまうため，制約条件を満たすことが出来ない．そこで，はみ出てしまった点をリーマン多様体に戻す写像を考えることで，制約を満たす点列 $\{x_k\}$ を得ることができる．



Gradient Decent

Algorithm 2 Gradient Decent(GD)

Require: f: differentiable function on $\mathbb{R}^n$

Require: $0 < t < 1$:

$x \leftarrow x_0 \in M$

while x not converged **do**

$x \leftarrow x - t\, \mathrm{grad} f(x) \notin M$

end while

return x

Retraction

リーマン多様体 M に対して, 接束を $TM = \bigcup_{x \in M} T_x M$ と表す.

Definition (Retraction)

M をリーマン多様体, $R : TM \to M$ を C^∞ 写像とする. 任意の $x \in M$ に対して, R の $T_x M$ への制限 $R_x : T_x M \to M$ が以下の 2 つの条件を満たすとき, R を M 上のレトラクション (Retraction) と呼ぶ.

1. $R_x(0_x) = x$
2. $DR_x(0_x) = id_{T_x M}$

Riemannian Gradient Decent

M をリーマン多様体, $R : TM \to M$ をレトラクションとする.
リーマン多様体上の勾配降下法 (RGD) を以下のように設計する.

Algorithm 3 Riemannian Gradient Decent(RGD)

Require: f: differentiable function on M
Require: $0 < t < 1$:
$x \leftarrow x_0 \in M$
while x not converged **do**
  $x \leftarrow R_x(-t\,\mathrm{grad} f(x))$
end while
return x

Contents

二次形式の最小化

二次形式の最小化問題

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を対称行列とする.

$$
\left|\begin{array}{ll} \text{minimize} & q_A(x) = x^\top A x \\ \text{subject to} & \qquad x \in S^{n-1} \end{array}\right.
$$

なお, $\min_{x \in S^{n-1}} q_A(x)$ は A の最小固有値, $\arg\min_{x \in S^{n-1}} q_A(x)$ は最小固有値に対する固有ベクトルとなる.

Result

レトラクション R 以下で定義する.

$$R_x(\xi) = \frac{x+\xi}{\|x+\xi\|}$$

Figure: n = 100

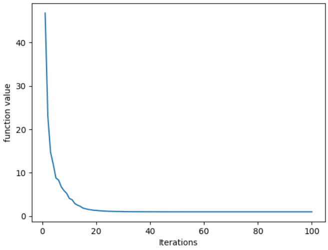
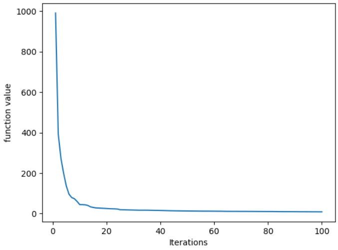


Figure: n = 2000



References

[1] P.-A. ABSIL, R. MAHONY, AND R. SEPULCHRE, Optimization Algorithms on Matrix Manifolds, Princeton University Press, Princeton, NJ, 2008.