



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	平行超平面を用いたPowell法について
Author(s)	金光, 秀雄; 宮腰, 政明; 新保, 勝
Citation	北海道大學工學部研究報告, 107, 95-104
Issue Date	1982-01-30
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/41706
Type	departmental bulletin paper
File Information	107_95-104.pdf



平行超平面を用いた Powell 法について

金 光 秀 雄 宮 腰 政 明 新 保 勝

(昭和 56 年 9 月 30 日受理)

On Powell's Method by Means of Parallel Hyperplanes

Hideo KANEMITSU, Masaaki MIYAKOSHI and Masaru SHIMBO

(Received September 30, 1981)

Abstract

Among the methods for finding the unconstrained minimum of a function, derivative-free methods are very useful for complicated functions. The conjugate direction methods, e.g. Powell's method, Smith's method etc., are an example of such derivative-free methods.

In this paper, Powell's and Smith's methods are reformulated under the concept of "conjugate hyperplane", and a generalized procedure of Powell's method is proposed. It was shown that this procedure finds the minimum of a quadratic function in a finite number of steps. Two other methods are also proposed based on this generalized procedure. Finally, a numerical comparison among Powell's and the other two methods is made by using the modified quadratic extrapolation linear search.

1. は し が き

近年, コンピューターの発達に伴い, 数理計画法のさまざまな分野での応用が高まってきている。一般に数理計画法は次のように定式化できる。

$$\text{最小化: } f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n \quad (1)$$

$$\text{制約条件: } g_i(x) \geq 0, \quad i=1, 2, \dots, m \quad (2)$$

この中で, 特に(1)または(2)式が非線形なものが非線形計画法であり, さらに(2)式を除いたものが制約無し最小化と呼ばれる。現在, 制約無し最小化手法はいろいろ提案されているが, とりわけ関数の微分を用いない手法は, 最小化する関数が複雑な場合には有効である。

微分を用いない手法の中で効率の良いといわれている共役方向法については Smith 法¹⁾ Powell 法²⁾ などがある。本研究では「共役超平面」の概念を用いて, Powell 法, Smith 法のアルゴリズムを書き下し, Powell 法をより一般化したアルゴリズム: 平行超平面法を与え, この手法が 2 次関数を有限回のステップで最小化できることを証明する。さらに平行超平面法の立場から, Powell 法との対応を図ることにより, Powell 法の問題点を明らかにし, その解決法について述べる。次に, 平行超平面法から 2 つの手法を与え, これらの手法の比較を数値例によって行う。

2. 準備

2.1 共役性

共役方向法は、目的関数 f をある点 $x^{(k)}$ のまわりで局所的に 2 次関数で近似し

$$f(x) \simeq f(x^{(k)}) + (x - x^{(k)})^T \nabla f(x^{(k)}) + \frac{1}{2} (x - x^{(k)})^T \nabla^2 f(x^{(k)}) (x - x^{(k)}) \quad x, x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$$

として関数の最小点を 2 次関数に固有な性質「共役性」を用いて求め、これを次の点 $x^{(k+1)}$ とし、繰り返すという考えが基本となっている。但し、 $\nabla = (\partial/\partial x_i)$, T は転置である。

定義 1 : 最小化する 2 次関数 f_0 を

$$f_0 = \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x + c \quad x, b \in \mathbb{R}^n, c \in \mathbb{R}, Q \text{ は } n \times n \text{ 正定値行列}$$

とする。このとき、 Q に対して k 個のベクトル $d_1, d_2, \dots, d_k \in \mathbb{R}^n$ が

$$d_i^T Q d_j = 0 \quad (i \neq j)$$

を満足するならば、 $d_1, d_2, \dots, d_k$ は互に Q -共役であるという。

2.2 記法

以下、簡単のため 1 次独立なベクトル $d_1, d_2, \dots, d_k \in \mathbb{R}^n$ の集合を

$$D_k = \{d_1, d_2, \dots, d_k\}$$

とし、 $d_1, d_2, \dots, d_k$ の張る部分空間を $\text{span}[D_k]$ で表す。つまり

$$\text{span}[d_1, d_2, \dots, d_k] = \text{span}[D_k] = \left\{ \sum_{i=1}^k \alpha_i d_i \mid \alpha_i \in \mathbb{R} \ (i=1, \dots, k) \right\}$$

とする。また、 $\text{span}[D_k]$ を x_1 だけ平行移動して得られるアフィン集合を $\text{As}(x_1, D_k)$ と書く。したがって

$$\text{As}(x_1, D_k) = x_1 + \text{span}[D_k] = \{x_1 + d \mid d \in \text{span}[D_k]\}$$

で表される。特に、 $d_1, d_2, \dots, d_k$ が互に Q -共役であるとき、 D_k を C_k で表す。

2.3 共役方向の性質

まず、共役方向に関する定理の基本となるアルゴリズムを記しておこう。

アルゴリズム : $x_{k+1} \in \text{Md}(x_1, D_k)$; $\text{As}(x_1, D_k)$ 上の方向最小化。

ステップ 1 1 次独立なベクトルの集合 $D_k = \{d_1, d_2, \dots, d_k\}$ と $x_1 \in \mathbb{R}^n$ を定める。

ステップ 2 $i=1, 2, \dots, k$ まで

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i d_i \in L(x_i, d_i), \quad d_i \in D_k$$

$$\text{但し, } L : x_i + \alpha_i d_i \in \{x_i + \alpha d_i \mid f(x_i + \alpha d_i) = \min_{\beta \in \mathbb{R}} f(x_i + \beta d_i)\}$$

以上のアルゴリズム $\text{Md}(x_1, D_k)$ において

$$d_i^T \nabla f(x_{i+1}) = 0, \quad i=1, 2, \dots, k$$

が成立する。

次の定理は、アルゴリズム Md の方向として共役方向を用いたときの、2 次関数の最小化に関する定理であるが、ここでは証明を省略する（文献 2, 3 を参照）。

定理 1 : $d_1, d_2, \dots, d_k$ が互に Q -共役ならばアルゴリズム Md によって得られた点 $x_{k+1} \in \text{Md}(x_1, C_k)$ はアフィン集合 $\text{As}(x_1, C_k)$ 上における 2 次関数の最小点となる。

この定理は共役方向が 2 次関数を最小化するのに有効であることを示しており、結局、互に Q -共役な n 個のベクトルを用いて方向最小化を行えば、2 次関数を最小化できる。

定理 2 : $d_1, d_2, \dots, d_k$ が互に Q -共役で、 x_1 とアフィン集合 $\text{As}(x_1, C_k)$ に含まれない点 y_1 が与えられたとき、アルゴリズム Md によって得られた 2 点をそれぞれ $x_{k+1} \in \text{Md}(x_1,$

C_k), $y_{k+1} \in \text{Md}(y_1, C_k)$ とするとき, $y_{k+1} - x_{k+1}$ は, $\text{span}[C_k]$ の任意のベクトルと互に Q -共役である。

証明：定理 1 より, x_{k+1}, y_{k+1} はそれぞれアフィン集合 $\text{As}(x_1, C_k)$, $\text{As}(y_1, C_k)$ 上の 2 次関数 f_Q の最小点である。よって, 任意の $d \in \text{span}[C_k]$ に対して

$$0 = d^T \nabla f_Q(x_{k+1}) = d^T (Qx_{k+1} + b)$$

$$0 = d^T \nabla f_Q(y_{k+1}) = d^T (Qy_{k+1} + b)$$

辺々を引くことにより

$$d^T Q(y_{k+1} - x_{k+1}) = 0$$

よって共役性の定義より d と $y_{k+1} - x_{k+1}$ は互に Q -共役である。 Q.E.D.

定義 2：定理 2 において, $x_{k+1} - y_{k+1} = d_{k+1}$ としたとき, アフィン集合の組 $\text{As}(x_1, C_k)$, $\text{As}(y_1, C_k)$ を $\text{span}[C_{k+1}]$ 上の共役超平面といい, $C_h(x_1, y_1, C_k)$ で表す (図 1)。

定理 2 は, 新たな共役方向の生成を示すもので, 共役方向はすべて定理 2 に基づいて構成されている。

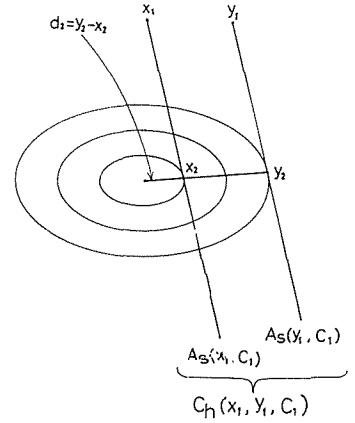


図 1 2 次元における共役超平面 $C_h(x_1, y_1, C_1)$

3. 共役方向法

3.1 共役超平面法

定理 2 から, 次のような共役方向を生成するアルゴリズムが構成できる。

アルゴリズム： $(y_{k+1}, C_{k+1}) \in \text{Mc}(x_1, C_k, e_k, \beta_k)$ ；共役方向の生成。

ステップ 1 互に Q -共役な方向の集合 $C_k = \{d_1, d_2, \dots, d_k\}$, $x_1 \in \mathbb{R}^n$, $\text{span}[C_k]$ と独立な方向 $e_k \in \mathbb{R}^n$, $\beta_k \in \mathbb{R}$ を定める。

ステップ 2 $x_{k+1} \in \text{Md}(x_1, C_k)$ とする。

ステップ 3 $y_1 = x_{k+1} + \beta_k e_k$, ($\beta_k \neq 0$) とする。

ステップ 4 $y_{k+1} \in \text{Md}(y_1, C_k)$ とする。

ステップ 5 $d_{k+1} = y_{k+1} - x_{k+1}$, $C_{k+1} = \{d_1, d_2, \dots, d_{k+1}\}$ とする。

このアルゴリズムは定理 2 をそのままアルゴリズム化したもので, 互に Q -共役な方向は k 個から $k+1$ 個にふえる。

3.2 Smith 法¹⁾

ここでは共役超平面法 $\text{Mc}(x_1, C_k, e_k, \beta_k)$ を用いて Smith 法を記述する。

アルゴリズム： $y_{n+1}^{(n)} \in \text{Ms}(x_1^{(1)}, C_1^{(1)})$ ；Smith 法による関数最小化。

ステップ 1 $x_1^{(1)} \in \mathbb{R}^n$ を定め, $C_1^{(1)} = \{d_1^{(1)}\}$, $k=1$ とする。

ステップ 2 $x_2^{(1)} = x_1^{(1)} + \alpha_1^{(1)} d_1^{(1)} \in L(x_1^{(1)}, d_1^{(1)})$ とする。

ステップ 3 $\text{span}[C_1^{(k)}]$ と独立な方向 $e_1^{(k)}$ を定める。

$$y_1^{(k)} = x_2^{(k)} + \beta_1^{(k)} e_1^{(k)}, (\beta_1^{(k)} \neq 0) \text{ とする。}$$

ステップ 4 $y_2^{(k)} = y_1^{(k)} + \alpha_1^{(k)} d_1^{(k)} \in L(y_1^{(k)}, d_1^{(k)})$ とする。

ステップ 5 $n=2$ ならばステップ 7 へ。

ステップ 6 $j=2, 3, \dots, n-1$ まで

$$x_1^{(k)} = y_j^{(k)} \text{ とし}$$

$\text{span} [C_j^{(k)}]$ と独立な方向 $e_j^{(k)}$ と $\beta_j^{(k)} \neq 0$ を定め

$(y_{j+1}^{(k)}, C_{j+1}^{(k)}) = \text{Mc} (x_1^{(k)}, C_j^{(k)}, e_j^{(k)}, \beta_j^{(k)})$ とする。

ステップ 7 $y_{n+1}^{(k)} = y_n^{(k)} + \alpha_n^{(k)} d_n^{(k)} \in L(y_n^{(k)}, d_n^{(k)})$ とし

$\|y_{n+1}^{(k)} - x_1^{(k)}\| = 0$ ならば終了する。

ステップ 8 $d_1^{(k+1)} = d_n^{(k)}, C_1^{(k+1)} = \{d_1^{(k+1)}\}, x_2^{(k+1)} = y_{n+1}^{(k)}, k = k+1$ としてステップ 3 へ戻る。

Smith 法は定理 2 を最も素直に反映したアルゴリズムであるといえる。この方法を 2 次関数に適用した場合、 $n(n+1)/2$ 回の線形探索 $L(x, d)$ で最小点が求まり、最も効率が良い。しかしながら一般の関数に対しては、同じ方向の線形探索の繰り返しが多すぎる。全体の方向情報をもった方向 d_n が探索されるまでには $n(n-1)/2$ 回の線形探索が必要である。また次の繰り返しではこれまで得られた方向 $d_1, d_2, \dots, d_{n-1}$ を捨ててしまうため、かえって効率の悪い手法となってしまう。以上の理由により、Smith 法についてはこれ以上の議論をしないことにする。

3. 3 Powell 法²⁾

前節で述べた Smith 法の欠点を克服し、かつ 2 次関数の最小化を有限回で達成できる手法が Powell 法である。

アルゴリズム : $x_{n+1}^{(k)} \in \text{Mp} (x_1^{(1)}, D_n^{(1)})$; Powell 法による関数最小化。

ステップ 1 1 次独立なベクトルの集合 $D_n^{(1)} = \{d_1^{(1)}, d_2^{(1)}, \dots, d_n^{(1)}\}$, 出発点 $x_1^{(1)} \in \mathbb{R}^n$ を定め、 $k=1$ とする。

ステップ 2 $x_{n+1}^{(1)} \in \text{Md} (x_1^{(k)}, D_n^{(k)})$ とする。

ステップ 3 $d_{n+1}^{(k)} = x_{n+1}^{(k)} - x_1^{(k)}$ とおいて
 $x_{n+1}^{(k)} = x_{n+1}^{(k)} + \alpha_n^{(k)} d_{n+1}^{(k)} \in L(x_{n+1}^{(k)}, d_{n+1}^{(k)})$ とする。

ステップ 4 $\|x_{n+2}^{(k)} - x_1^{(k)}\| = 0$ ならば終了する。

ステップ 5 $d_i^{(k+1)} = d_{i+1}^{(k)}, i=1, 2, \dots, n$
 $D_n^{(k+1)} = \{d_1^{(k+1)}, d_2^{(k+1)}, \dots, d_n^{(k+1)}\}, x_1^{(k+1)} = x_{n+2}^{(k)}, k = k+1$ としてステップ 2 に戻る。

このアルゴリズムは非常に単純で、 $n(n+1)$ 回の線形探索で 2 次関数の最小化が達成される。次に、このアルゴリズムを共役な方向群 C_l と共役でない方向群 D_{n-l} に分解して記述すると次のようになる。

アルゴリズム : $x_{n+1}^{(k)} \in \text{Mpc}(x_1^{(1)}, D_n^{(1)})$; Powell 法の 2 つの方向群 C_l, D_{n-l} を用いた記述。

ステップ 1 1 次独立なベクトルの集合 $D_n^{(1)} = \{d_1^{(1)}, d_2^{(1)}, \dots, d_n^{(1)}\}$, 出発点 $x_1^{(1)} \in \mathbb{R}^n$ を定め、 $k=l=1$ とする。

ステップ 2 $x_{n+1}^{(1)} \in \text{Md} (x_1^{(1)}, D_n^{(1)})$ とする。

ステップ 3 $d_{n+1}^{(k)} = x_{n+1}^{(k)} - x_1^{(k)}, C_l^{(1)} = \{d_{n+1}^{(1)}\}, x_1^{(1)} = x_{n+1}^{(1)}$ とする。

ステップ 4 $x_{l+1}^{(k)} \in \text{Md}(x_1^{(k)}, C_l^{(k)}), k = k+1$ とする。

ステップ 5 $D_{n-l}^{(k)} = \{d_1^{(k)}, d_2^{(k)}, \dots, d_{n-l}^{(k)}\}$ として
 $x_{n+1}^{(k)} \in \text{Md} (x_{l+1}^{(k)}, D_{n-l}^{(k)})$ とする。

ステップ 6 $y_1^{(k)} = x_{n+1}^{(k)}$ として
 $y_{l+1}^{(k)} \in \text{Md} (y_1^{(k)}, C_l^{(k)})$ とする。

ステップ 7 $\|y_{l+1}^{(k)} - x_{l+1}^{(k)}\| = 0$ ならば終了する。

ステップ 8 $d_{n+1}^{(k)} = y_{l+1}^{(k)} - x_{l+1}^{(k)}$ とする。

ステップ 9 $d_i^{(k+1)} = d_{i+1}^{(k)}$, $i=1, 2, \dots, n$

$$C_l^{(k+1)} = \{d_n^{(k+1)}, d_{n-1}^{(k+1)}, \dots, d_{n-l+1}^{(k+1)}\}, D_{n-l}^{(k+1)} = \{d_1^{(k+1)}, d_2^{(k+1)}, \dots, d_{n-l}^{(k+1)}\}$$

$$x_1^{(k+1)} = y_{l+1}^{(k)}, l = \min \{n-1, l+1\} \text{ としてステップ 4 に戻る。}$$

このアルゴリズムで $e_l^{(k)} = x_{n+1}^{(k)} - x_{l+1}^{(k)}$, $C_{l+1}^{(k)} = \{d_{n+1}^{(k)}, d_n^{(k)}, \dots, d_{n-l+1}^{(k)}\}$ とすると, ステップ 4~8 が共役超平面法 $(y_{l+1}^{(k)}, C_{l+1}^{(k)}) \in \text{Mc}(x_1^{(k)}, C_l^{(k)}, e_l^{(k)}, 1)$ になっていることがわかる。また, l と k の値を比べると $k \geq n-1$ のときは $l = n-1$ となり, このときステップ 4~6 は n 次元空間の平行な超平面上の最小化を行っていることがわかる。以上のことから, 次に述べるようなアルゴリズムを構成できる。

4. 平行超平面法

4. 1 平行超平面法

アルゴリズム: $y_{n+1}^{(k)} \in \text{Mh}(x_1^{(1)}, D_{n-1}^{(1)})$; 平行超平面法による関数最小化。

ステップ 1 1 次独立なベクトルの集合 $D_{n-1}^{(1)} = \{d_1^{(1)}, d_2^{(1)}, \dots, d_{n-1}^{(1)}\}$, 出発点 $x_1^{(1)} \in \mathbb{R}^n$ を定め, $k=1$ とする。

ステップ 2 $x_n^{(1)} = \text{Md}(x_1^{(1)}, D_{n-1}^{(1)})$ とする。

ステップ 3 $\text{span}[D_{n-1}^{(k)}]$ と独立な方向 $e^{(k)}$ を定め,
 $y_1^{(k)} = x_n^{(k)} + \delta^{(k)} e^{(k)}$ ($\delta^{(k)} \neq 0$) とする

ステップ 4 $y_n^{(k)} \in \text{Md}(y_1^{(k)}, D_{n-1}^{(k)})$ とする。

ステップ 5 $d_n^{(k)} = y_n^{(k)} - x_n^{(k)}$ において
 $y_{n+1}^{(k)} = y_n^{(k)} + \alpha_n^{(k)} d_n^{(k)} \in L(y_n^{(k)}, d_n^{(k)})$ とする。

ステップ 6 $\|y_{n+1}^{(k)} - x_n^{(k)}\| = 0$ ならば終了する。

ステップ 7 $d_i^{(k+1)} = d_{i+1}^{(k)}$, $i=1, 2, \dots, n-1$
 $D_{n-1}^{(k+1)} = \{d_1^{(k+1)}, d_2^{(k+1)}, \dots, d_{n-1}^{(k+1)}\}$, $x_n^{(k+1)} = y_{n+1}^{(k)}$, $k=k+1$ としてステップ 3 に戻る。

定理 3: 平行超平面法において, $k=n-1$ のとき, $d_1^{(n-1)}, d_2^{(n-1)}, \dots, d_{n-1}^{(n-1)}$ がすべて互に Q-共役な方向となり, 2 次関数の最小点が求まる。

証明: $k=1$ のとき, ステップ 1~5 により, $d_n^{(1)}$ と $d_{n-1}^{(1)}$ は互に Q-共役となる。そこで $d_n^{(k)}$ と $d_{n-j}^{(k)}$ ($j=1, 2, \dots, k$) が互に Q-共役であることを導く。

ステップ 7 と帰納法の仮定より, $d_{n-1}^{(k+1)}, d_{n-2}^{(k+1)}, \dots, d_{n-k+1}^{(k+1)}$ が互に Q-共役であるから, $x_n^{(k+1)}$ はアフィン集合 $\text{As}(x_n^{(k+1)}, C_{k+1})$ 上の最小点となる。また, ステップ 3 により, アフィン集合 $\text{As}(x_n^{(k+1)}, C_{k+1})$ に含まれない点 $y_1^{(k)}$ を取ると, ステップ 4 から $y_1^{(k)}$ はアフィン集合 $\text{As}(y_1^{(k+1)}, C_{k+1})$ 上の最小点となる。よって定理 2 より, $d_n^{(k+1)} = x_n^{(k+1)} - y_{n+1}^{(k+1)}$ は, $d_{n-j}^{(k+1)}$ ($j=1, 2, \dots, k+1$) と互に Q-共役となる。

したがって, $k=n-1$ で $d_1^{(n-1)}, d_2^{(n-1)}, \dots, d_{n-1}^{(n-1)}$ はすべて互に Q-共役となり, 定理 1 より, 2 次関数の最小点が求まる。 Q.E.D.

4. 2 平行超平面法の幾何学的な意味と Powell 法との比較

このアルゴリズムはステップ 7 で $d_i^{(k)}$ が捨てられ, 新たな超平面 $\text{As}(x_n^{(k+1)}, D_{n-1}^{(k+1)})$ を定め, その超平面上の方向最小化点が $x_n^{(k+1)}$ となる。次にステップ 3 の手続きを経て, ステップ 4 では $\text{As}(x_n^{(k+1)}, D_{n-1}^{(k+1)})$ と平行な超平面 $\text{As}(y_1^{(k+1)}, D_{n-1}^{(k+1)})$ 上の方向最小化を行い, 両超平面の方向最小化点を通る方向を新たな方向 $d_n^{(k+1)}$ としている (図 2)。

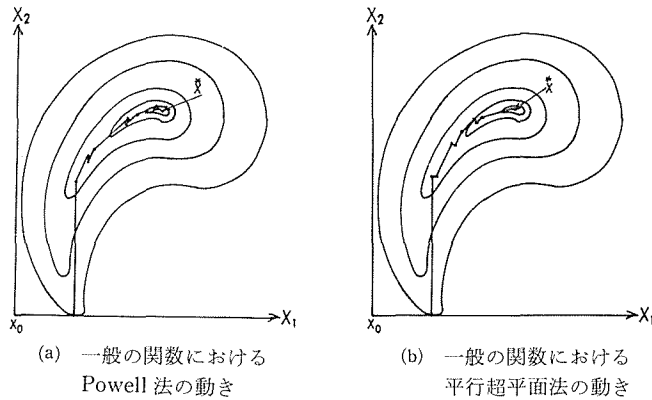


図 4

(1) $e^{(k)} = d_1^{(k)}$: (Powell 法)

(2) $e^{(k)} \perp \text{span} [D_{n-1}^{(k)}]$

(3) $e^{(k)} = y_{n+1}^{(k)} - y_1^{(k)}$

(3)の場合は、 $d_1^{(k-1)}$ 方向の移動がなされなかったとき、 $e^{(k)}$ の方向独立性が失われる可能性がある。Powell 法と(2)のアルゴリズムを2次関数と一般の関数に適用した場合を図3, 図4に示す。

5. 数 値 例

5. 1 線形探索法

共役方向法は、 d 方向のステップ移動幅を線形探索により定めている。ここでは2次の外挿法を用いた線形探索を与える。

アルゴリズム： $x_0 + \alpha d \in L(x_0, d)$; 方向 d 上の最小化

ステップ1 ステップ h , 拡大係数 γ , 要求精度 ϵ を定め、 $\alpha_L = -\infty$, $\alpha_U = +\infty$, $\alpha_1 = 0$, $f_1 = f(x_0)$ とする。

ステップ2 $\alpha_2 = h$, $f_2 = f(x_0 + \alpha_2 d)$ とし、 α_3 を

$$\begin{cases} \alpha_3 = 2h; f_2 \leq f_1 \\ \alpha_3 = -h; f_2 > f_1 \end{cases}$$

として、 $f_3 = f(x_0 + \alpha_3 d)$ とする。

ステップ3 $\alpha_i, f_i, i=1, 2, 3$ を $\alpha_1 < \alpha_2 < \alpha_3$ となるように並び換え、 $m = \{i | \min_i f_i, i=1, 2, 3\}$ とし、次のようにして α_L, α_U を更新する。

$$\begin{cases} \alpha_U = \alpha_2 & ; m=1 \\ \alpha_L = \alpha_1, \alpha_U = \alpha_3 & ; m=2 \\ \alpha_L = \alpha_2 & ; m=3 \end{cases}$$

ステップ4 f の2回微分係数 A を次式

$$A = \frac{-2 \{ (\alpha_2 - \alpha_3)f_1 + (\alpha_3 - \alpha_1)f_2 + (\alpha_1 - \alpha_2)f_3 \}}{(\alpha_1 - \alpha_2)(\alpha_2 - \alpha_3)(\alpha_3 - \alpha_1)}$$

より求め、 $A \leq 0$ ならばステップ6へ進む。

ステップ5 3点 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ での2次近似により、最小点の予測値 α^*

$$\alpha^* = \frac{1}{2} \cdot \frac{\{(\alpha_2)^2 - (\alpha_3)^2\}f_1 + \{(\alpha_3)^2 - (\alpha_1)^2\}f_2 + \{(\alpha_1)^2 - (\alpha_2)^2\}f_3}{(\alpha_2 - \alpha_3)f_1 + (\alpha_3 - \alpha_1)f_2 + (\alpha_2 - \alpha_1)f_3}$$

とし、ステップ 7 へ進む。

ステップ 6 $\alpha^* = \alpha_m + \gamma(\alpha_m - \alpha_2)$, $\gamma > 1$ とする。

ステップ 7 更に、 α^* を次のように更新する。

$$\begin{cases} \alpha^* = \max \{ \alpha^*, 0.5(\alpha_m + \alpha_L) \} & ; m=1 \\ \alpha^* = \min \{ \alpha^*, 0.5(\alpha_m + \alpha_U) \} & ; m=3 \end{cases}$$

ステップ 8 $f^* = f(x_0 + \alpha^* d)$ とし

s を $s = \min \{ |\alpha^* - \alpha_i| \mid i=1, 2, 3 \}$ とする。このとき

$s < \epsilon \mid \alpha^*$ ならば $\alpha = [\alpha_m \text{ または } \alpha^* \mid \min \{ f(x_0 + \alpha_m d), f_0(x_0 + \alpha^* d) \}]$ とし
て終了する。

ステップ 9 $k = \{ i \mid \max f_i, i=1, 2, 3 \}$ とし、 $\alpha_k = \alpha^*$ としてステップ 2 に戻る。

5. 2 数値例による各手法の比較

4. 2 節で $e^{(k)}$ を (2), (3) のように定めることにより 2 つの手法が定まるが、この 2 つの手法を次のように呼ぶことにする。

(1) アルゴリズム : Pho ; $e^{(k)}$ を $e^{(k)} \perp \text{span} [D_k]$ とする。

(2) アルゴリズム : Phc ; $e^{(k)} = y_{n+1}^{(k)} - y_1^{(k)}$ とする。

Powell 法, Phc 法ともに探索方向の 1 次独立性が失われる恐れがある。そこで次のような修正を試みる。

(1) Powell 法 ; $d_1^{(k)}$ の方向への移動がない場合は $d_1^{(k)}$ の方向へ強制移動を行う。

(2) Phc 法 ; $d_1^{(k-1)}$ の方向への移動がない場合は $e^{(k)} = d_1^{(k-1)}$ とする。

また平行超平面法のステップ 3 で $x_n^{(k)}$ から $e^{(k)}$ の方向へ $\delta^{(k)}$ だけ移動させているが、一般の関数に対しては、 $\delta^{(k)}$ の値によってその収束性が大きく左右されるため Pho 法, Phc 法ともに $\delta^{(k)}$ を線形探索によって定める。

次のような 5 個のテスト関数を用い、各手法の比較を行った。

x_0 : 初期点, $f_0 = f(x_0)$, x^* : 最適点

(a) Parabolic Valley Function

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

$$x_0 = (-1.2, 1.0) \quad f_0 = 24.2$$

$$x^* = (1, 1) \quad \min f = 0$$

(b) Cubic Valley Function

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^3)^2 + (1 - x_1)^2$$

$$x_0 = (-1.2, 1.0) \quad f_0 = 749.38$$

$$x^* = (1, 1) \quad \min f = 0$$

(c) Schmidt and Vettters Function

$$f(x) = - \left[\frac{1}{1 + (x_1 - x_2)^2} + \sin \left(\frac{1}{2} \pi x_2 x_3 \right) + \exp \left\{ - \left(\frac{x_1 + x_3}{x_2} - 2 \right)^2 \right\} \right]$$

$$x_0 = (0, 1, 2) \quad f_0 = -1.5$$

$$x^* = (1, 1, 1) \quad \min f = 0$$

(d) Powell Function

$$f(x) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$$

$$x_0 = (3, -1, 0, 1), \quad f_0 = 215$$

$$x^* = (0, 0, 0, 0), \quad \min f = 0$$

(e) Wood Function

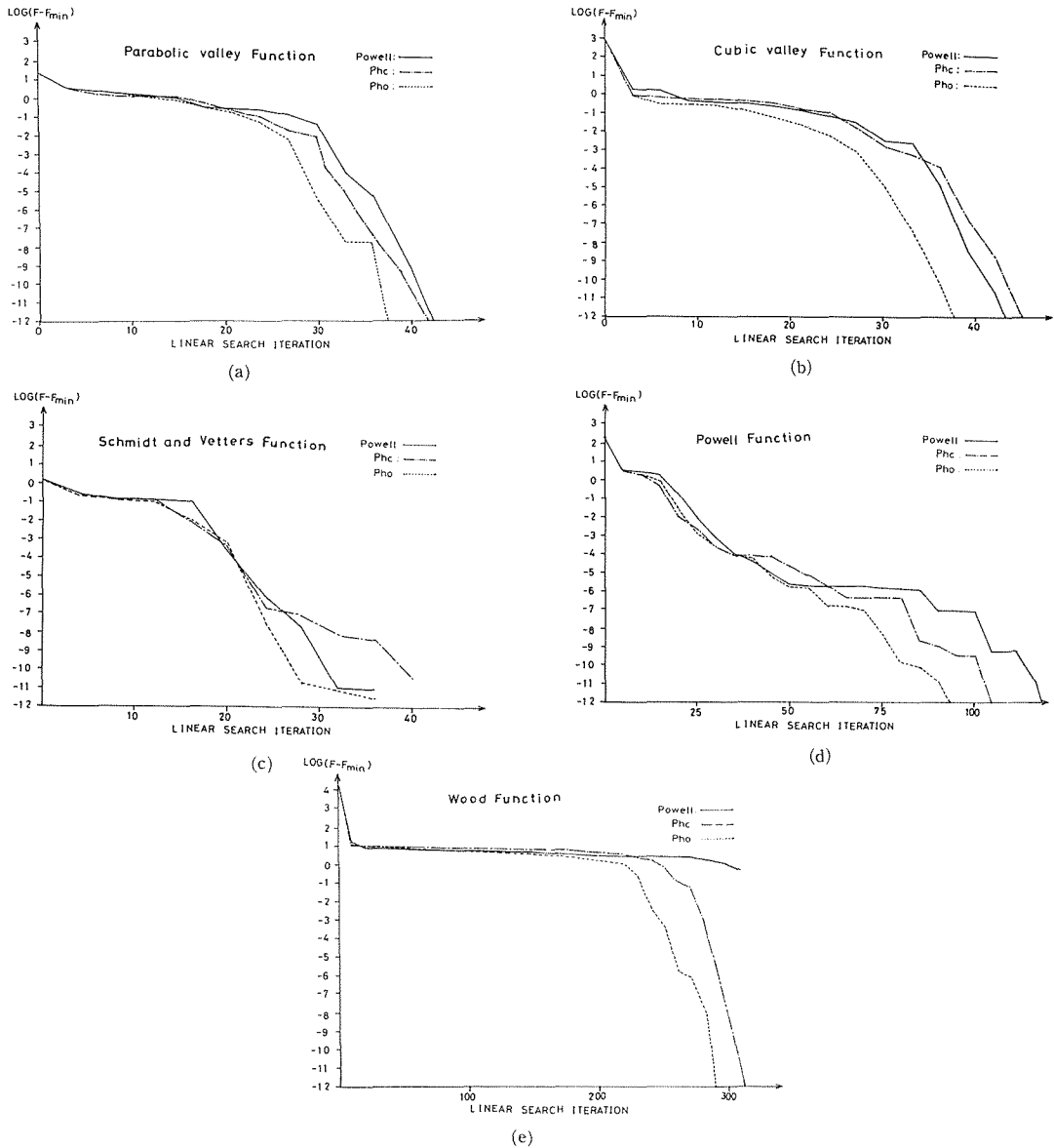


図 5 関数最小化曲線

$$\begin{aligned}
 f(x) &= 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 + 90(x_4 - x_3^2)^2 + (1 - x_3)^2 + 10.1 \{ (x_2 - 1)^2 + (x_4 - 1)^2 \} \\
 &\quad + 19.8(x_2 - 1)(x_4 - 1) \\
 x_0 &= (-3, -1, -3, -1), \quad f_0 = 1035.9 \\
 x^* &= (1, 1, 1, 1), \quad \min f = 0
 \end{aligned}$$

以上のテスト関数に各手法を適用した結果を示す (図 5)。

どの手法も、共役方向法の性質が生かされ、最小点の近傍での収束が速い。全般的に Pho 法が非常に優れている。このことから、複雑な関数の最小化を行う場合は、方向の共役性より方向の一次独立性の方が重要であると考えられる。Wood 関数に Powell 法を適用した場合の収束が極め

て遅いのも方向の独立性に起因するものである。

6. 結 び

本研究で得られた結果を要約する。

(1) 共役超平面法により, Smith 法, Powell 法を記述し, これらのアルゴリズムの構造を明らかにした。

(2) Powell 法の考察から, その一般化アルゴリズム平行超平面法を提案し, 2 次関数に対して有限回で, その最小点が求まることを証明した。

(3) 平行超平面法の立場から Powell 法を考えて行くことにより, Powell 法の抱える問題点を明らかにし, その対策を示した。

(4) 平行超平面法から 2 つの手法を導き, 数値例により各手法の比較を行い, その有効性を示した。

今後の課題として,

(1) 方向の共役性, 独立性の尺度を平行超平面法に採り入れる。

(2) 3 つの手法をハイブリッドに用いて収束の加速を図る。

が考えられる。

尚, この計算は, 北大大型計算機センターの M-200 H によった。

また, この研究にあたって多くの有益な御助言を頂いた本学伊達惇助教授に深く感謝致します。

文 献

- 1) Smith, C. S.: "The automatic computation of maximum likelihood estimates", N. C. B. Scientific Dept., Report No. S. C. 846/MR/40 (1962).
- 2) Powell, M. J. D.: "An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives", The Computer Journal, 7 (1964), p. 155.
- 3) 今野浩, 山下浩: "非線形計画法", 日科技連 (1978).