

勾配法

はじめに

筆者がしばしば利用する勾配法は下記である。

- * 最急降下法
- * 共役勾配法, 双共役勾配法

これらは大規模問題に適する手法である。内積の計算が主たるもので、大量のメモリを必要としない特徴がある。専門書で解説される勾配法は概要程度のもが多くみられる。本稿はプログラミングレベルの手順について述べる。

勾配法とは?

本稿で述べる勾配法とは連立方程式の求解である。具体的には(1)の X を求める問題である。

$$AX = B \quad (1)$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

手順を述べる前に表記に関して、下記に定義する。

\therefore : 内積

$k = 0, 1, 2, \dots$: 反復法の反復回数(右下表記)

*: 随伴行列(右肩表記)

随伴行列とは行列の要素の複素共役をとり、転置したものである。実数行列では単純に転置行列となる。

最急降下法

最急降下法は勾配を最急方向に向かっていく手法である(図1).

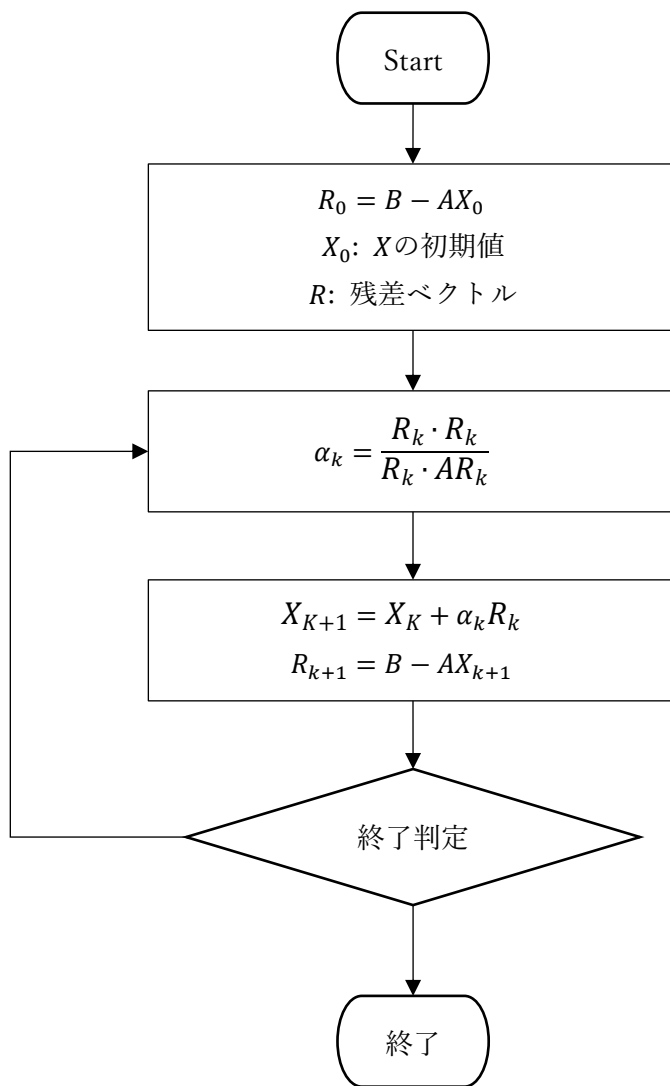


図1 最急降下法

この手順から解るように, 残差をもとに解に近づこうとする単純な手法である.

共役勾配法

共役勾配法は勾配を共役方向に向かっていく手法である(図2).

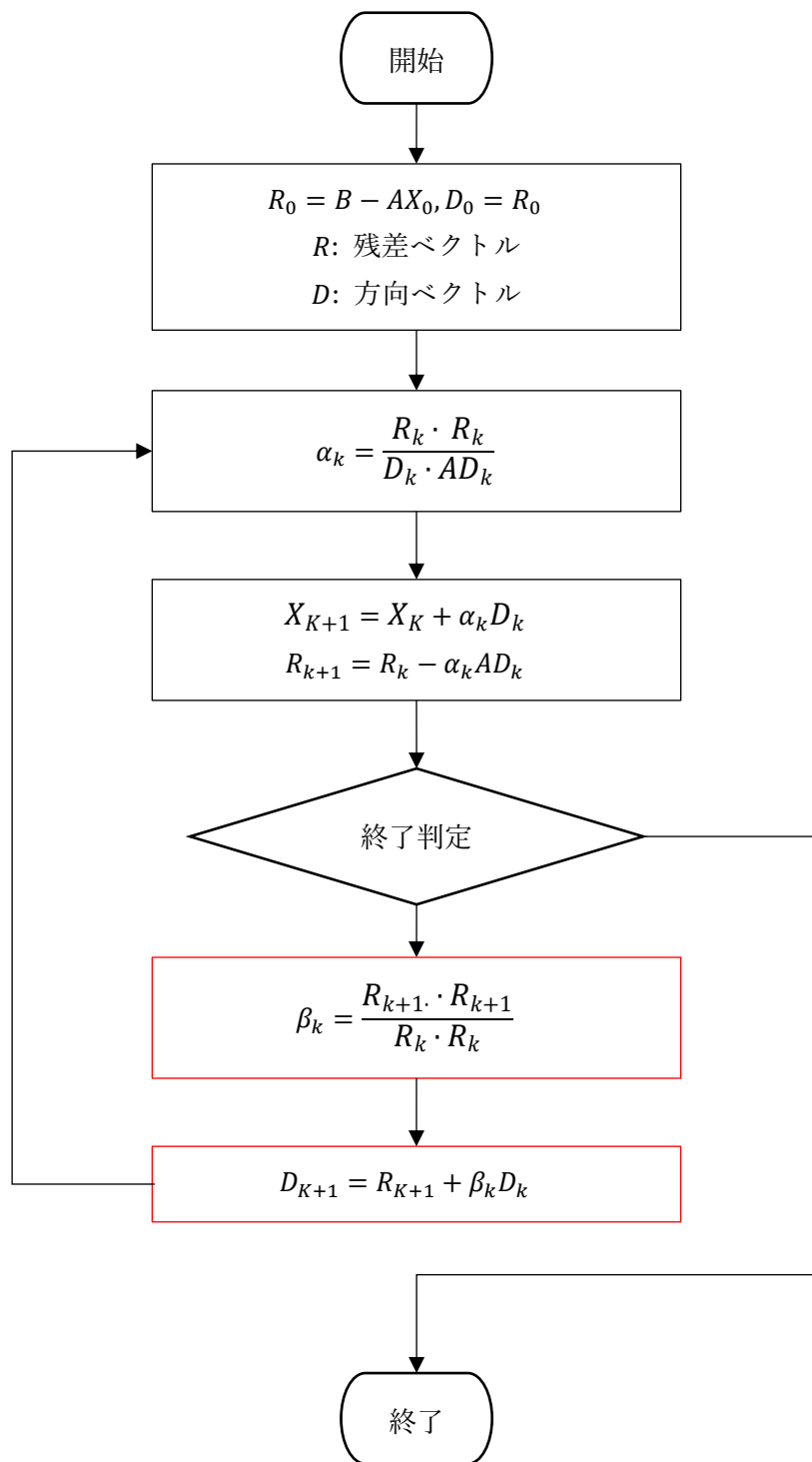


図2 共役勾配法

共役勾配法は最急降下法に方向ベクトルを加えて拡張したものである。共役方向の算出は赤線の部分(図 2)である。解 X の更新は方向ベクトルによってなされるが、形式は最急降下法と同様である(図 1 参照)。

共役勾配法の拡張で Fletcher-Reeves の手法がある。これは β_k を(1)で置き換えることで、非線形な性質にある程度対応できる手法である。

$$\beta_k = \frac{(R_{k+1}, R_{k+1} - R_k)}{(R_k, R_k)} \quad (1)$$

他に、共役勾配法の収束性を向上させるには最小二乗法を適用するとよい(2)。

$$A^T A X = A^T B \quad (2)$$

行列 $A^T A$ は対称行列となるのが肝である。さらに数学上、正定値という条件があれば反復法は収束することが保証される。正定値とは任意の X に対して(3)となる性質である。

$$X^T A X > 0 \quad (3)$$

双共役勾配法

双共役勾配法は行列 A が正定値対称行列でなくとも、それとほぼ等価と言われる手法である(図 3)。つまり, (2), (3)を満たす手法とみなすことができる。筆者にとり, 最も頼りとする勾配法である。

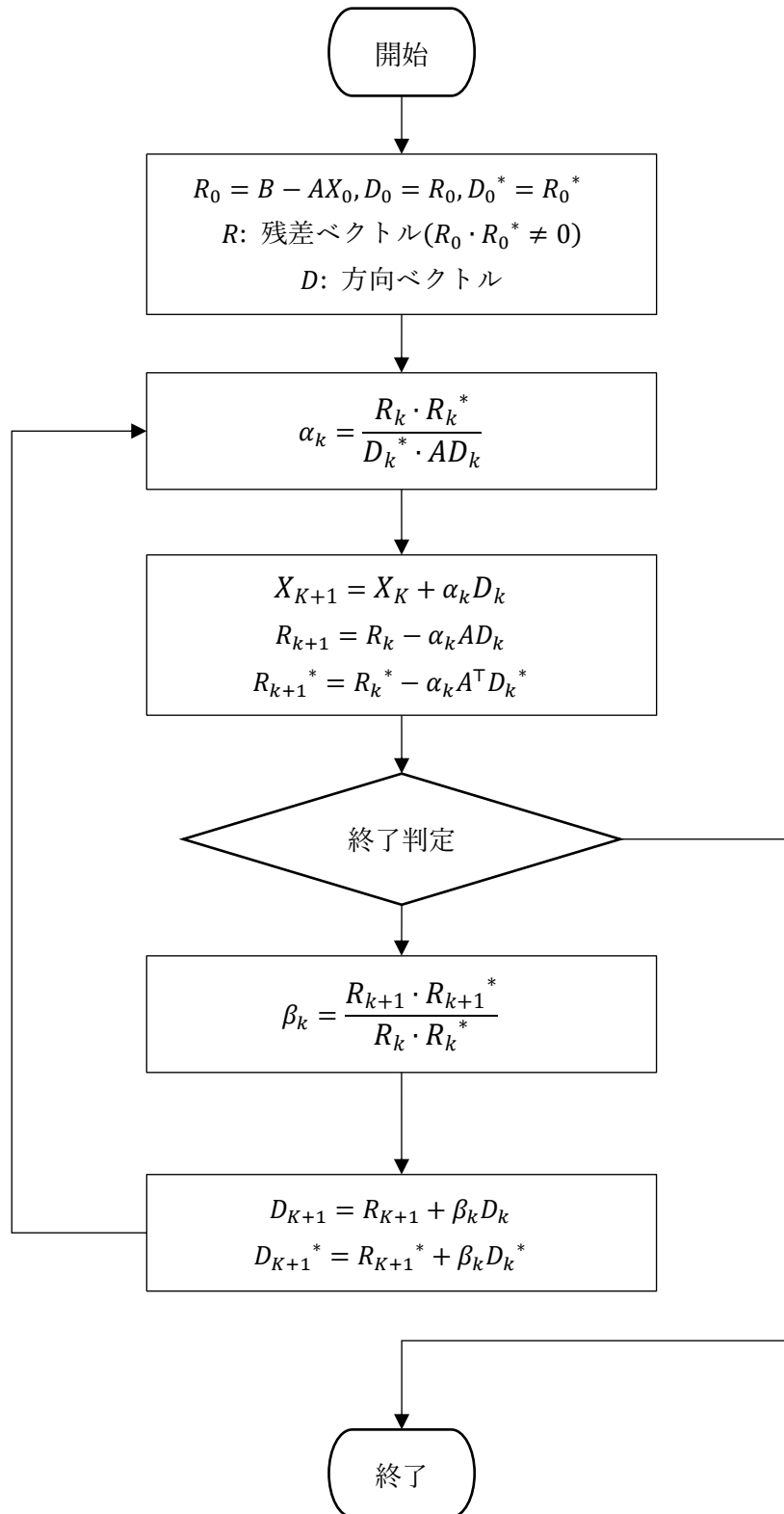


図3 双共役勾配法

終了判定

終了判定についてだが、一般には残差のノルムが一定以下になったとき終了とする(4).

$$\|R_k\|_n < \delta \quad (4)$$

収束の評価には残差の2次ノルム($n=2$)が多く用いられるが、1次ノルムで事足りることもある。他に、数回の反復で確実に所望の精度が得られるということであれば反復回数の評価だけで打ち切るということでもよい。様々な評価方法があり、こうしなければならないというルールがあるわけではない。

非線形問題の勾配法

本稿では線形代数での勾配法の利用について述べた。筆者は、線形問題の利用経験しかなく(主に画像処理)、非線形問題に詳しくない。だが勾配法は基本的には残差を扱う手法である。もし、非線形問題を扱うのであれば、行列 A を非線形関数 F に置き換えれば(5)、既述の手順(双共役勾配法を除く)と同様に実行可能と思う。

$$AX \rightarrow F(X) \quad (5)$$

F : 非線形関数

非線形であろうと、勾配が2次以下で近似できる曲面であれば勾配法は機能するはずである。工学ではより局所的、狭い範囲で見ればおよそ2次で近似できるもの、という感覚である。特に共役勾配法は2次収束するため収束が早く有効である。基本的にはモデル化の時点でこのような曲面であるかどうかにかかっている。