Ⅰ-415　射影行列の計算方法について

群馬高専　正員　平田恭久

１．まえがき

活性な制約式集合に基づく探索方法では、①活性な制約式g_mの選択，②探索に必要な目的関数のg_m上の勾配算出，が必要である。上記②に着目すると目的関数の勾配∇fをg_m上の勾配に変換する行列が必要になり、等式制約法ではこの変換行列に射影行列P_sを用いている。ここでは *Householder*行列に基づく変換行列Ｚの作成方法を取り上げ、変換行列Ｚと射影行列P_sとの関係を明らかにする。変換行列Ｚは１個の制約式につき１個の *Householder*行列を掛け合わせて得られる正規直交行列Ｑの一部を成している。

２．正規直交行列Ｑ

ｍ個の活性な制約式について *Householder*行列より作成される正規直交行列Ｑは式(1)になり、*Householder*行列H_iは式(2)で表される。式(2)についてH_iH_iを求めると式(3)に示すように単位行列Ｉ（ｎ変数ならｎ×ｎ行列）になるが、ＱについてＱ^{T}ＱまたはＱＱ^{T}を導くと式(4)，式(5)のようにＩになる。H_iは活性な制約式の勾配∇g_m（ｍ個の制約式）から作成されるが、ｍ＝１の場合の *Householder*ベクトルw_1は式(6)で定義される。式(6)で∇g_{11}は勾配∇g_1の第１要素である。

ｎ個の変数をｍ個の従属変数とｓ個の独立変数としたとき、ｎ×ｎ行列Ｑの内容は式(7)のようになっていると仮定する。式(7)でY_mはｍ×ｍ行列，Z_sはｓ×ｓ行列である。式(7)についてY_s，Z_mは式(8)の形で表すことができるので、Ｑは式(9)になる。式(7)を用いてＱ^{T}Ｑを求めると式(4)よりＩになるので、式(10)の関係が得られる。式(10)第３行に式(9)を適用すると式(11)になり、これよりE_y，E_zは式(12)で表される。これを用いて式(10)第１行より式(13)が、式(10)第４行より、式(14)が得られる。

式(13)を満足するY_mは式(15)に、式(14)を満足するZ_sは式(16)になるので、これよりY_mを式(17)，Z_sを式(18)のように定義する。次にＱＱ^{T}を求めると式(19)になり、ＹＹ^T，ＺＺ^{T}の内容は式(20)，(21)になるが、これと式(19)より式(22)の関係が導かれる。以上の式の誘導は式(4)，(5)のＱの性質と式(7)，(8)のＱの内容の仮定から導かれたものであるが、Ｅの内容がまだ明らかにされていない。

$$Q = H_1 \cdots H_i \cdots H_n \quad \cdots(1) \qquad H_iH_i = I \quad \cdots(3)$$

$$\left.\begin{aligned} H_i &= I - w_i w_i^T / \beta_i \\ \beta_i &= w_i^T w_i / 2 \end{aligned}\right\}(2) \qquad Q^TQ = I \quad \cdots(4) \qquad QQ^T = I \quad \cdots(5)$$

$$\left.\begin{aligned} w_1 &= [\nabla g_{11} - r_{11}, \nabla g_{12}, \cdots, \nabla g_{1n}]^T \\ |r_{11}| &= |\nabla g_1| \end{aligned}\right\}(6)$$

$$Q = [Y \ \ Z] = \begin{bmatrix} Y_m & Z_m \\ Y_s & Z_s \end{bmatrix} (7) \qquad \left.\begin{aligned} Y_s &= E_y Y_m \\ Z_m &= E_z^T Z_s \end{aligned}\right\}\cdots(8)$$

$$Q = \begin{bmatrix} Y_m & E_z^T Z_s \\ E_y Y_m & Z_s \end{bmatrix} \cdots(9) \qquad \left.\begin{aligned} Y^TY &= I_m \\ Y^TZ &= 0 \\ Z^TY &= 0 \\ Z^TZ &= I_s \end{aligned}\right\}(10)$$

$$Z^TY = Z_s^T E_z Y_m + Z_s^T E_y Y_m = 0 \quad \cdots(11)$$

$$E_z = -E_y = E \quad \cdots(12)$$

$$Y^TY = Y_m^T (I_m + E^TE) Y_m = Y_m^T w_m Y_m = I_m \quad \cdots(13)$$

$$Z^TZ = Z_s^T (I_s + EE^T) Z_s = Z_s^T w_s Z_s = I_s \quad \cdots(14)$$

$$Y_m Y_m^T = w_m^{-1} \quad \cdots(15) \qquad Z_s Z_s^T = w_s^{-1} \quad \cdots(16)$$

$$Y_m = w_m^{-1/2} \quad \cdots(17) \qquad Z_s = w_s^{-1/2} \quad \cdots(18)$$

$$QQ^T = YY^T + ZZ^T = I \quad \cdots(19)$$

$$YY^T = \begin{bmatrix} w_m^{-1} & -w_m^{-1}E^T \\ -Ew_m^{-1} & Ew_m^{-1}E^T \end{bmatrix} \cdots\cdots(20)$$

$$\left.\begin{aligned} w_m^{-1} + E^T w_s^{-1} E &= I_m \\ -w_m^{-1}E^T + E^T w_s^{-1} &= 0 \\ -Ew_m^{-1} + w_s^{-1}E &= 0 \\ Ew_m^{-1}E^T + w_s^{-1} &= I_s \end{aligned}\right\}(22)$$

$$ZZ^T = \begin{bmatrix} E^T w_s^{-1} E & E^T w_s^{-1} \\ w_s^{-1} E & w_s^{-1} \end{bmatrix} \cdots(21)$$

３．Ｅの内容と射影行列P_s

式(12)のＥは式(8)で定義しているので、これより式(23)でＥが定まる筈である。ｍ＝１の場合の *Householder*行列Ｑ＝H_1についてＹを導くと式(24)になるが、式(24)で∇g_1の第１要素を$\nabla_m g_m$，第２要素以降を$\nabla_s g_m$と

すると式(25)が得られる。式(23)第１行と式(24)と式(25)を対応させることにより式(26)を導くことができる。Z_m，Z_sについても式(23)第２行の成立を確かめることができる。ここではm＝１を例にしたが、式の形からm≧２に拡張することが可能であり、Ｅの内容を定めることができた。

Ｅが式(26)で定まることは *Householder*ベクトルw_iが式(26)を満足するように定義されていることを意味しているが、式(26)は等式制約法で用いるＥと同じである。このＥよりw_mの逆行列式(28)が得られ、式(28)を満足するY_mは式(29)になる。Y_mをＹに拡張すると式(30)になり、活性な制約面の勾配∇g_mを正規化して転置したものがＹになっている。w_m^{-1}を式(22)第４行に適用すると式(31)のw_s^{-1}が得られ、式(19)QQ^Tの内容がすべて明らかになった。式(20)に式(28)w_m^{-1}を代入するとYY^Tが得られ、これより式(32)ZZ^Tは射影行列P_sに一致する。

４．等式制約法との関連

式(21)$ZZ^T=P_s$は等式制約法で用いている変数区分したときの射影行列である。これに目的関数の勾配∇fを掛けることにより、式(33)の活性な制約式g_m上に射影した勾配∇Fが得られるが、式(33)の∇_{sL}は縮小勾配である。上述のように*Householder*行列から作成される正規直交行列Ｑを用いて、等式制約法の射影行列P_sを得ることができる。等式制約法では式(34)からw_s^{-1}を求めており、逆行列の計算が必要であるが、ＱではＱの作成過程にこの計算が含まれている。Ｑの基になっているのは式(6)で示すように∇g_mなので、ＱからP_sを求める場合は活性な制約式∇g_mを選択しておく必要がある。等式制約法ではＥはシンプレックス・タブローの掃き出し計算より得ている。

$$\left.\begin{aligned} Y_s Y_m^{-1} &= -E \\ Z_m Z_s^{-1} &= E^T \end{aligned}\right\} \cdots\cdots\cdots\cdots(23)$$

$$\left.\begin{aligned} Y_m &= [\nabla g_{11}]^T/(\nabla g_1^T \nabla g_1)^{1/2} \\ Y_s &= [\nabla g_{12}, \nabla g_{13}, \cdots, \\ &\quad \nabla g_{1n}]^T/(\nabla g_1^T \nabla g_1)^{1/2} \end{aligned}\right\} \cdots(24)$$

$$\left.\begin{aligned} [\nabla g_{11}]^T &= \nabla_m g_m^T \\ [\nabla g_{12}, \nabla g_{13}, \cdots, \nabla g_{1n}]^T &= \nabla_s g_m^T \end{aligned}\right\} (25)$$

$$\left.\begin{aligned} E &= -\nabla_s g_m^T (\nabla_m g_m^T)^{-1} \\ E^T &= \nabla_m g_m^{-1} \nabla_s g_m \end{aligned}\right\} \cdots\cdots\cdots\cdots(26)$$

$$\left.\begin{aligned} w_m &= I_m + E^T E = \\ &\nabla_m g_m^{-1}(\nabla g_m \nabla g_m^T)(\nabla_m g_m^T)^{-1} \end{aligned}\right\} \cdots(27)$$

$$\begin{aligned} w_m^{-1} &= \nabla_m g_m^T (\nabla g_m \nabla g_m^T)^{-1} \nabla_m g_m \\ &= Y_m Y_m^T \end{aligned} \quad \cdots(28)$$

$$Y_m = w_m^{-1/2} = \nabla_m g_m^T (\nabla g_m \nabla g_m^T)^{-1/2} \quad (29)$$

$$Y = \nabla g_m^T (\nabla g_m \nabla g_m^T)^{-1/2} \quad \cdots\cdots(30)$$

$$\begin{aligned} w_s^{-1} &= I_s - \nabla_s g_m^T (\nabla g_m \nabla g_m^T)^{-1} \nabla_s g_m \\ &= Z_s Z_s^T \end{aligned} \quad \cdots(31)$$

$$\begin{aligned} ZZ^T &= I - YY^T = I - \\ &\nabla g_m^T (\nabla g_m \nabla g_m^T)^{-1} \nabla g_m = P_s \end{aligned} \quad (32)$$

$$P_s \nabla f = \begin{bmatrix} E^T w_s^{-1} \nabla_{sL} \\ w_s^{-1} \nabla_{sL} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E^T \nabla_s F \\ \nabla_s F \end{bmatrix} = \nabla F$$

$$w_s^{-1} = (I_s + EE^T)^{-1} \quad (34) \qquad \cdots(33)$$

$$\nabla g_{m-1} Q_{m-1} = [L \quad 0] \quad (35)$$

$$\nabla g_{m-1} Q_m = [M \quad 0] \quad (36) \qquad Q_{m-1} = Q_m K \quad (37)$$

Ｑを用いることの利点としては制約式の追加または削除に伴う修正が比較的簡単なことである。追加の場合は式(1)Q_mにH_{m+1}を右から掛けることにより、制約式を１個追加したQ_{m+1}が得られる。削除の場合は次の処理を行う。m－１個の制約式に対するQ_{m-1}では式(35)が成立しており、Ｌは下方三角行列である。元のQ_mに対し、∇g_{m-1}を左から掛けると式(36)でＭは下方三角行列にならない。ＭをＬに修正するための行列Ｋを右からQ_mに掛けることにより、制約式が１個削除されたQ_{m-1}が式(37)で得られる。∇g_mに対するQ_mは唯一ではなく作成方法により異なってくるが、式(20)YY^T，式(21)ZZ^Tは∇g_mに対し一つのみが定まる。

５．まとめ

目的関数の勾配を活性な制約式g_m上の勾配へ変換する行列について、*Householder*行列から作成される正規直交行列Ｑと等式制約法で用いられる射影行列P_sとの関係を明らかにすることができた。Ｑの一番の利点は制約式の追加または削除に伴う修正が比較的簡単にできることである。この点を追求することにより等式制約法で射影行列P_sの修正方法を改良できるのではないかと考えられる。

参考文献：Gill,P.E.,Murray,W.and Wright,M.H.:Practical Optimization,Academic Press,pp.32～pp.43