

最適化とは、そして勾配法について

株式会社タイコ
牛山善太

光学設計における最適化とは、所謂、自動設計を指すことが多いが、前回触れさせて戴いた画像復元においても最適化の理論が適用される。今回は、現代的な光学設計において、様々な場面で、非常に重要な役割を果たす最適化について考えさせていただきたい。

1. 最適化とは

光学設計にかぎらず数学的にも用いられる最適化という言葉であるが、その意味は光学設計においてのみならず、数学的には、

“ 与えられた制約条件のもとに、ある関数の最大値、あるいは最小値を齎す、変数の値を求めること ”

を言う。従って、光学設計において収差の表す総合関数の最小値を求めようとすることはこの意味でも正しく最適化である。

また、前回触れさせて戴いた画像処理の場合にも

$$\varphi = \|\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 + \alpha\|\mathbf{f}\|^2 \quad (50 - 12)$$

という、画像の辻褄と、解の突飛さのバランスをとる関数の最小値を求めようという事になったので、これも最適化である。

2. 勾配法

ここでは最も簡単な最適化法、勾配法を、もっとも簡単な状態、1変数の場合において考えよう。

関数 $f(x)$ の最大値を、例えば求めようとするならば解析的にはその微分値が 0 になる x を求める必要がある。しかし、関数が複雑であったりすれば、あるいは関数で表しにくければ、それは難しい。しかし、当たり前の話ではあるが、

“対象としている x の領域において $f(x)$ が、 $f'(x)=0$ となる変曲点 x を一つしか持たない。”

とすることがはっきりしていれば、以下の様にして極値は計算できる(図 1)。

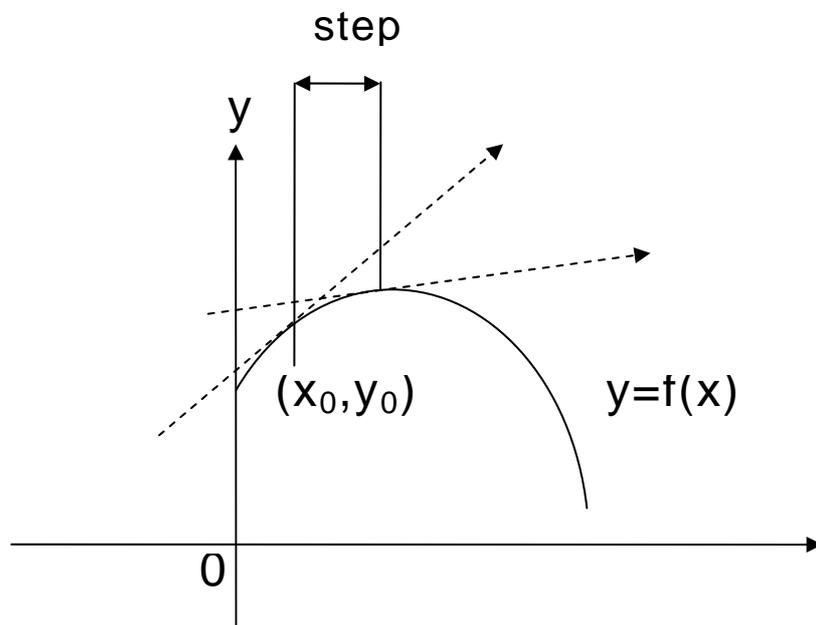


図1 1次元の勾配法

$f(x)$ という関数は分かっているとして、この領域内のどこかに x_0 の初期値をとる。この時に $f'(x_0)=0$ であればそこが極値であるが、この値が正であれば、関数はさらに右肩上がりになっていることになり、すこし x 軸上の正の方向に増加した値 x_1 をとり同様の計算を行う。この作業を繰り返す、微係数が 0 になるか、或いはその符号が逆転するところを探査する訳である。どのように step をとるか、あるいは符号が反転するとどの様な処置をとるかなどは、技術的な話になるが、本質は非常にシンプルである。

2変数の場合には初期値が (x_0, y_0) となる。関数 $f(x, y)$ が最も大きく増大する方向はベクトル、

$$\nabla f = \text{grad } f = \frac{\partial f}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{j} \quad (1)$$

で表される。 x, y が変化すると f も変化するが、 ∇f が一定であれば $f(x, y)$ は曲線を

表す。その曲線上の (x_0, y_0) における接線に対する法線を ∇f は表している。図 2 をご覧いただくと、それぞれの曲線は高さ f を表す、等高線の様なものであり、その様に表示してある。

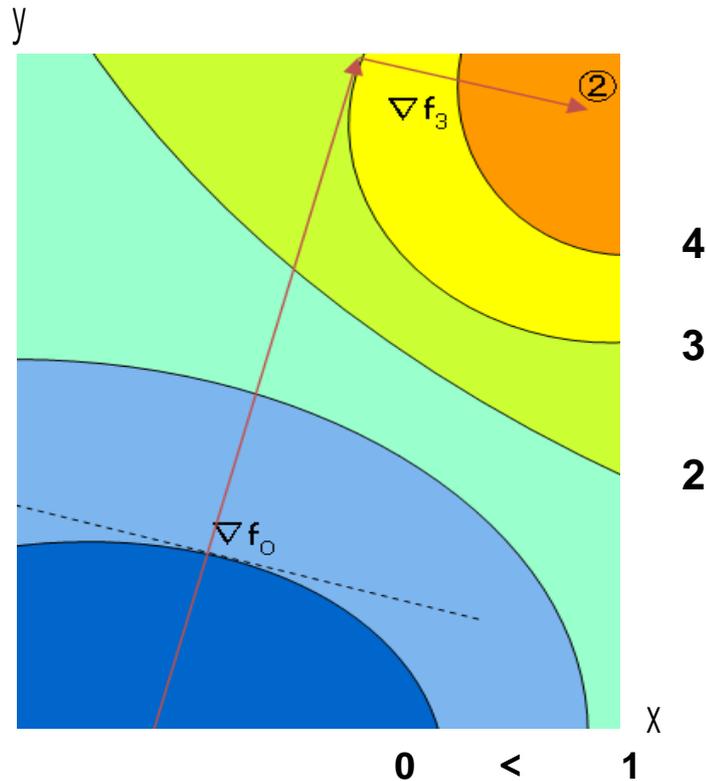


図2 勾配法、2次元の場合

濃い青色から明るい色になり、赤みがさすほど地図のように標高が高い場所を表しているとお考え戴きたい。関数は連続的に変化するとすれば、 ∇f 、つまり ∇f の方向に進めば、標高の高いところに次々に到達していくことになる。しかし地形の按配で 4 の等高線の横をすり抜けてしまう。つまり ∇f が増大しなくなる。 ∇f の方向には最大値は無いのである。そこで、3 の上、 (x_3, y_3) における ∇f_3 を計算すれば、この地点でも関数は連続的に変化しているので（と考えれば）、 ∇f_3 の方向に標高は高くなる。

つまり、 ∇f で方向を定め、その方向に 1 次元の勾配法を適用、極地に達したらまた、その地点での ∇f を計算し方向を修正し、1 次元の勾配法で進む、ということの繰り返しを行うことが 2 次元の場合の勾配法の実践手法となる。多次元の場合も、(1) 式を多次元に拡張すればまったく同様に考えられる。

ここで、多次元探索区域内における 1 次元の勾配法、つまり直線探索について少し詳しく考えてみよう。 ∇f の方向に step を刻んで進んで行くわけであるから、この次元に進んでいく関数を新たに

$$F(t) = f(x(t))$$

と考えると、

$$F(t) = f(x + t\nabla f(x)) \quad (2)$$

と置こう。ここでの x は

$$x = (x_1 \cdots x_n)$$

なる、 n 次元の座標を表すとして、さらに x_0 を初期座標とすれば、

$$x(t) = x_0 + t\nabla f_0 \quad (3)$$

と考えられて、 $F(t)$ 、つまり $f(x(t))$ を t で微分すると

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} \quad (4)$$

f_0 の成分は

$$\frac{\partial f_0}{\partial x_i}$$

であるので、

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f_0}{\partial x_i} \\ &= \nabla f \cdot \nabla f_0 \end{aligned} \quad (5)$$

となる。もしこの地点で極値をとれば(5)式は0になるはずである。その場合は x_0 における探査方向と、 x における新たな探査方向を表すベクトルが互いに直交していることになる。つまり、初回の探査で極値が見つかったなら、その地点から、それまでの探査方向と直交する方向に次の歩を進めれば良いことになる。図2においても、その様な状況が表わされている。

3. gradにより表現される面法線ベクトルについて

ここで、前項で f は曲線の法線を表す、としたことの説明を、多次元の場合に拡張して、ここに行わせていただきたい。

さて、 ∇ 、もしくは grad と表されるベクトル演算子は様々なエンジニアリング分野においても非常に重要な役割を果たす。任意の曲面を

$$\psi(x, y, z) = \text{const.} \quad (6)$$

とおこう。すると、成分それぞれの曲面上の微小変化 (dx, dy, dz) に対する ψ の変化を考えると、各成分それぞれに対する変化の ψ の感度は

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial z}$$

なので、変化量は

$$d\psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{\partial \psi}{\partial y} dy + \frac{\partial \psi}{\partial z} dz \quad (7)$$

ここで、この微小変化量を成分とするベクトル

$$d\vec{P} = (dx\vec{i}, dy\vec{j}, dz\vec{k})$$

を考えれば、これは明らかに接線ベクトルであり、任意の $d\vec{P}$ の集合は曲面 ψ 上の点 $P(x, y, z)$ における接線群を表わす。また、(6)式から $d\psi=0$ になるので(7)式は内積の性質から

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \vec{k} \right) \cdot (dx\vec{i} + dy\vec{j} + dz\vec{k}) = 0 \quad (8)$$

したがって、

$$\text{grad } \psi(x, y, z) \cdot d\vec{P} = 0 \quad (9)$$

よって、 $\text{grad } \psi$ は P における任意のいかなる接線ベクトル $d\vec{P}$ にも直交することになり曲面 ψ の法線ベクトルとなることが理解できる。

参考文献

- 1) 金谷健一:これなら分かる最適化数学(共立出版、東京、2008)
- 2) 今野浩、山下浩:非線形計画法(日科技連、東京、1978)
- 3) 高橋友刀:レンズ設計(東海大学出版会、東京、1994)
- 4) 牛山善太、草川徹:シミュレーション光学(東海大学出版会、東京、2003)