ニュートン法と勾配法を用いた解算出方法の効率改善

高橋葵†　　三浦　孝夫†
† 法政大学理工学部創生科学科

1. 前書き

計算方法には、組み合わせることによってより効率よく計算を行うことができる可能性がある。本研究では、勾配法とニュートン法を用いてそれぞれを組み合わせた計算方法を提案し、従来の計算方法とどちらが効率がよいかを比較する。

2. 仮想ニュートン法と仮想勾配法

実勾配法は、f(x)の極値を見つける（f'(x)=0 となる x を求める）ための計算方法である。計算式は $x_{n+1}=x_n+\eta f'(x_n)$ となる。

実ニュートン法 f(x)=0 となる x を求める計算方法である。計算式は $x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ となる。

上記 2 つを組み合わせた提案したい新しい計算方法

仮想的勾配法は、勾配法における f'(x)=0 をニュートン法における f(x)=0 として計算する方法である。計算式は $x_{n+1}=x_n-\frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}$ となる。

仮想的ニュートン法は、ニュートン法における F(x)=∫f(x)を勾配法における f(x)として計算する方法である。計算式は $x_{n+1}=x_n+\eta F'(x_n)$ となる。

3. 実験

Java を用いて次の計算式を計算させ、100 万回実行するのに要する実行時間、解算出までの計算回数を比較する。

$$f(x)=e^x-4x$$
$$f(x)=2x^3-x$$
$$f(x)=0.5+\sin(x)$$

実行時間、計算回数はともに少ないほど効率が良い。

4.実験結果

4 つの計算方法と 4 つの計算方法の実行時間と計算回数の計測結果を示したものが表 1、表 2 である。

実行時間においては新しく提案したものが早いといえる。計算回数においては、ニュートン法のアルゴリズムを用いるものが早いといえる。従来のものに比べて効率が改善されるのは仮想的勾配法のみである。

勾配法のアルゴリズムを用いた計算方法は計算回数が多いのは学習率が関わっていると思われる。そこで、学習率を変えて計算する実験を行った。$f(x)=0.5+\sin(x)$ を用いて勾配法の計算方法を変えて、実行時間、計算回数を記録し比較した。

数列を用いた計算方法（Adagrad）と、勾配と勾配 2 乗の移動平均を利用した計算方法(Adam)で実験を行う。結果を表 3 に示す。学習率を変えることによって、実勾配法に比べてどちらの方法も時間も回数も減少することがわかる。

表 1. 実行時間の計測結果　(秒)

方法＼式	e^x-4x	$2x^3-x$	$0.5+\sin(x)$	平均
実勾配法	112	103	1382	532
仮想勾配法	100	158	309	189
実ニュートン法	130	189	569	296
仮想的ニュートン法	111	288	345	248

表 2. 計算回数の計測結果　(回)

方法＼式	e^x-4x	$2x^3-x$	$0.5+\sin(x)$	平均
実勾配法	514	397	1781	897.3
仮想的勾配法	7	4	3	4.7
実ニュートン法	4	5	6	5.0
仮想的ニュートン法	259	861	2205	1108.3

表 3. 学習率を変えた勾配法における実行時間と計算回数

	実勾配法	Adagrad	Adam
実行時間(秒)	1781	236	371
計算回数(回)	1382	190	575

5. 考察

実行時間はどちらも減少しているが、仮想的ニュートン法はかなり多く計算を行っているため、効率が良い計算方法とは言えない。実行時間も計算回数も少ない仮想的勾配法は効率の良い計算方法であるといえる。計算回数が多い 2 つの方法は勾配法のアルゴリズムを用いているので、計算回数が多くなってしまう原因は学習率と思われる。実験後半では、解にたどり着くまでの回数、時間ともに実勾配法に比べて減少したことから、学習率は勾配法の計算回数、実行時間に動的に対応させるのが良い。

6. 結論

計算方法を組み合わせることによって、時間が 40%ほど減少する効率のよい計算方法を提案することができた。勾配法のアルゴリズムにある学習率が回数が多い原因だと考え行った第 2 実験は、学習率を計算毎に変えるようにし、その結果、時間も回数も減少した。学習率は計算回数に関係がありそうなのでより適切な学習率を見つけるのが今後の課題である。

参考文献

[1]杉山将: 機械学習のための確率と統計, (機械学習プロフェッショナルシリーズ)　講談社, 2016
[2] 杉浦洋 :「数値計算の基礎と応用―数値解析学への入門」(新訂版)、サイエンス社(新情報教育ライブラリ M-11), 2009

Copyright © 2018 IEICE