

最適化問題に対する多元グリッドサーチ法の実装

Implementation of Multi-dimensional Grid Search for Optimization

January 2003

Yosuke Amijima

このホワイトペーパーは、ソフトウェア GAUSS における多元グリッドサーチ法の完全導入を目指して書かれた提案の書である。先行研究もあり著作権は完全放棄するものである。ただし、その GAUSS への実装については私自らが行ないたい。

近年 GMM 推定法や非線形モデルの展開などにより、複雑な表面の最小化や最大化の推定が求められている。しかしながら、推定のアルゴリズムや許容桁数の違いなどにより、そのパラメータ推定結果の少なからぬ違いに我々はしばしば直面する。

本稿の目的は、昔から言われては立ち消えになっている微分を全く用いないグリッドサーチ法の Criterion 関数の最小化や Likelihood 関数最大化に対する実装方法を提案するものである。グリッドサーチのそもそもの趣旨に反しないように、極力簡素で原始的な方法をとろうとするものである。

計算機の RAM メモリの記憶容量と使用するソフトウェアの実行ディメンションの限界が無限に近いならば、多元グリッドサーチは次のようにして極めて簡単に行なわれる。すなわち、そのソフトウェアに多元の変数の展開ができて、その最小最大が評価できるものとすれば、それぞれの変数に対して動きうる下限と上限を設定して、それを許容桁数まで、小数点の区切りと一致するように注意して細分する。例えば、0 と 1 の間を 0.01 まで探すとすれば、それぞれの変数の中に 0 から 0.01 刻みで 101 個分、つまり 1 まで細分化してその数列を入れる。それを他の変数にも行なって、以下のような超平面関数 f について

$$\min f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \quad \text{または} \quad \max f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$$

の評価を行なうことによって、関数 f の最適化を行なうわけである。そのソフトウェアに数列を入れれば自動的にその格子超平面が作成されるようになっていれば、このことは理論的には非常に簡単明瞭な方法である。

実際には、変数の個数が増えるにしたがって指数的にディメンションは大きく格子の数は増すので現在の計算機の状況とソフトウェアの作業領域の問題から言うと、上のアイディアは現実的とは言えない。しかしながら、グリッドサーチのそもそもの考え方の格子線を引いてその格子点の高さを評価するという考え方を大事にして、計算機的能力とソフトウェアの作業領域を考慮に入れたものにするには、以下のようにすればこれまた簡単明瞭であろう。

例えば、簡単化のため 3 変数の場合を考えよう。上と同じく 0 と 1 の間を 0.01 まで細分化してその格子点の高さを評価してやる。その際、桁数の区切りと全く同じ点にしたがって、例えば、それぞれの変数をあらかじめ 0 から 0.1、0.1 から 0.2、... 0.9 から 1 というふうに区切ってやって、 $10 \times 10 \times 10 = 1000$ 個に分割したものを、それぞれ許容桁数まで細分化してグリッドしてやる。それを RAM メモリが許せばそこに、そうでなければ外部記憶装置にそれぞれの分割した中の最小点（または最大点）を記録していく。最後に、それらの最小点（または最大点）の中の最小点（または最大点）を評価するものである。同様に 4 変数以上の場合も、例えばそれぞれの変数をあらかじめ k 個に分割するならば、

$$k \times k \times k \times \dots \times k = k^n$$

に全体の超平面を分割しておいて、その組み合わせにしたがって、それぞれの分割したグループ内の最小点（または最大点）を記録しておき、最後にそれらの中の最小点（または最大点）を評価する。この方法は、計算時間は非常にかかるが、そのソフトウェアに多元の個数の変数を関数にできる機能が備わっていて、かつ、その関数に数列を入れれば自動的に超平面の格子点を生成するようになっていれば、どのような作業領域の制限があろうと多元グリッドサーチを実装できる方法である。

上記の方法がソフトウェアに完全に実装された場合、多変数の複雑な表面を対象とする最適化に対して格段の精度が保証されるものである。また、そうではない場合にも、他の最適化方法で計算されたパラメータ値の周辺を検索することによって、その最適パラメータの有効性をローカルに確かめることができる。そればかりか、通常最適化アルゴリズムに組み合わせることによって、より精度の高い計算ができるものである。通常最適化アルゴリズムとの組み合わせはすでに考案されており、一部ソフトウェアに実装されているが、それはあくまでも補助的な手段にすぎない。少なくとも、ユーザーレベルでは、求めた最適パラメータが妥当なものか確かめる方法として、そして開発者レベルでは、分割多元グリッドサーチの単独での方法として、早期の実現が待たれるところである。