

■ 目 次

■ シリーズの刊行にあたって	iii
■ まえがき	iv
第 I 部 導入	1
Chapter 1 第 1 章 はじめに	2
1.1 機械学習における推論と計算	2
1.2 最適化問題の記述	3
1.2.1 さまざまな最適化問題	3
1.2.2 反復法と収束速度	9
Chapter 2 第 2 章 基礎事項	11
2.1 微積分・線形代数の基礎	11
2.1.1 テイラーの定理	11
2.1.2 陰関数定理	14
2.1.3 対称行列と固有値	16
2.1.4 部分空間への射影	18
2.1.5 行列の 1 ランク更新	20
2.1.6 さまざまなノルム	21
2.1.7 行列空間上の関数	22
2.2 凸解析の基礎	24
2.2.1 凸集合・凸関数	24
2.2.2 凸関数の最小化	29
2.2.3 凸関数の連続性	30
2.2.4 微分可能な凸関数	32
2.2.5 共役関数	36
2.2.6 劣勾配・劣微分	38
第 II 部 制約なし最適化	45
Chapter 3 第 3 章 最適性条件とアルゴリズムの停止条件	46
3.1 局所最適解と最適性条件	46
3.2 集合制約に対する最適性条件	50
3.3 最適化アルゴリズムの停止条件	52

Chapter 4	第 4 章 勾配法の基礎	55
	4.1 直線探索法	55
	4.2 直線探索を用いる反復法	59
	4.3 座標降下法	61
	4.4 最急降下法	64
	4.4.1 最適化アルゴリズム	64
	4.4.2 最急降下法の収束速度	65
	4.4.3 バックトラッキング法による最急降下法	68
	4.5 機械学習への応用	70
	4.5.1 座標降下法とブースティング	70
	4.5.2 誤差逆伝搬法	73
Chapter 5	第 5 章 ニュートン法	78
	5.1 ニュートン法の導出	78
	5.2 座標変換に対する共変性	81
	5.3 修正ニュートン法	83
	5.4 ガウス・ニュートン法と関連する話題	86
	5.4.1 ガウス・ニュートン法の導出	87
	5.4.2 レーベンバーグ・マーカート法	88
	5.5 自然勾配法	90
	5.5.1 フィッシャー情報行列から定まる降下方向	90
	5.5.2 オンライン学習における自然勾配法	94
Chapter 6	第 6 章 共役勾配法	96
	6.1 共役方向法	96
	6.2 共役勾配法	100
	6.3 非線形共役勾配法	103
Chapter 7	第 7 章 準ニュートン法	107
	7.1 可変計量を用いる最適化法とセカント条件	107
	7.2 正定値行列の近接的更新	111
	7.2.1 ダイバージェンス最小化による更新則の定式化	111
	7.2.2 ダイバージェンスの性質と更新則の関係	113
	7.2.3 距離最小化とダイバージェンス最小化	114
	7.2.4 更新則の導出	115
	7.3 準ニュートン法の収束性	117
	7.4 記憶制限付き準ニュートン法	118
	7.5 ヘッセ行列の疎性の利用	121
	7.5.1 関数のグラフ表現	122

	7.5.2 正定値行列補完	125
	7.5.3 疎クリーク分解による更新則	128
Chapter 8	第 8 章 信頼領域法	133
	8.1 アルゴリズムの構成	133
	8.2 部分問題の近似解法	136
	8.2.1 部分問題の最適性条件	136
	8.2.2 ドッグレッグ法	137
	8.3 収束性	141
	第 III 部 制約付き最適化	143
Chapter 9	第 9 章 等式制約付き最適化の最適性条件	144
	9.1 1 次最適性条件	144
	9.2 2 次最適性条件	149
	9.3 凸最適化問題の最適性条件と双対性	153
	9.4 感度解析	156
Chapter 10	第 10 章 不等式制約付き最適化の最適性条件	159
	10.1 1 次最適性条件	159
	10.2 2 次最適性条件	164
	10.3 凸最適化問題の最適性条件	168
	10.4 主問題と双対問題	169
Chapter 11	第 11 章 主問題に対する最適化法	172
	11.1 有効制約法	172
	11.1.1 探索方向の選択	173
	11.1.2 ラグランジュ乗数の符号	174
	11.1.3 有効制約式の更新と最適化アルゴリズム	175
	11.2 ペナルティ関数法	179
	11.2.1 ペナルティ関数を用いた定式化	179
	11.2.2 ペナルティ関数法における制約なし最適化問題の性質	183
	11.2.3 正確なペナルティ関数法	183
	11.3 バリア関数法	185
	11.3.1 バリア関数法を用いた定式化	185
	11.3.2 バリア関数法の性質	188

Chapter 12	第 12 章 ラグランジュ関数を用いる最適化法	189
	12.1 双対上昇法	189
	12.1.1 ラグランジュ関数の導入と双対問題の導出	190
	12.1.2 双対問題の勾配法による最適化	190
	12.1.3 双対分解	192
	12.1.4 不等式制約に対する双対上昇法	194
	12.1.5 双対上昇法の収束	194
	12.1.6 非線形制約の双対上昇法	196
	12.2 拡張ラグランジュ関数法	198
	12.2.1 拡張ラグランジュ関数	198
	12.2.2 拡張ラグランジュ関数法	199
	12.2.3 双対上昇法としての拡張ラグランジュ関数法	202
	12.2.4 不等式制約の扱い	203
	12.2.5 拡張ラグランジュ関数法の収束理論	205
	12.2.6 凸目的関数における収束レートの理論	207
	12.2.7 近接点アルゴリズムとの関係	209
	12.3 交互方向乗数法	214
	12.3.1 交互方向乗数法のアルゴリズム	214
	12.3.2 交互方向乗数法による並列計算	217
	第 IV 部 学習アルゴリズムとしての最適化	219
Chapter 13	第 13 章 上界最小化アルゴリズム	220
	13.1 上界最小化アルゴリズム	220
	13.2 代理関数の例	224
	13.3 EM アルゴリズム	225
	13.4 2 つの凸関数の差の最適化	227
	13.5 近接点アルゴリズム	229
Chapter 14	第 14 章 サポートベクトルマシンと最適化	230
	14.1 SVM の定式化と最適化問題	230
	14.1.1 SVM の主問題	232
	14.1.2 SVM の双対問題	235
	14.1.3 SVM の最適性条件	236
	14.1.4 カーネル関数を用いた非線形モデリング	239
	14.2 SVM 学習のための最適化アルゴリズム	240
	14.2.1 カーネル SVM の双対問題の解法：SMO アルゴリズム	241
	14.2.2 線形 SVM の双対問題の解法：DCDM アルゴリズム	244
	14.2.3 学習アルゴリズムの比較	247
	14.3 正則化パス追跡	252

	14.3.1 最適解のパラメータ表現 (ステップ 1)	254
	14.3.2 イベント検出 (ステップ 2)	255
	14.4 最適保証スクリーニング	256
Chapter 15	第 15 章 スパース学習	264
	15.1 スパースモデリング	264
	15.2 L_1 正則化と種々のスパース正則化	266
	15.2.1 L_1 正則化	266
	15.2.2 その他のスパース正則化	267
	15.2.3 L_1 正則化の数値的評価	269
	15.3 近接勾配法による解法	272
	15.3.1 近接勾配法のアルゴリズム	272
	15.3.2 近接勾配法の収束理論	275
	15.3.3 近接勾配法の収束レートの証明	279
	15.3.4 近接勾配法の数値実験	282
	15.4 座標降下法による解法	285
	15.5 交互方向乗数法による解法	290
	15.5.1 交互方向乗数法と構造的正則化	290
15.5.2 画像復元の数値実験	294	
15.6 近接点アルゴリズムによる方法	297	
15.6.1 スパース学習における近接点アルゴリズムとその双対問題	297	
15.6.2 双対問題における交互方向乗数法	304	
Chapter 16	第 16 章 行列空間上の最適化	307
	16.1 シュティーフェル多様体とグラスマン多様体	307
	16.2 機械学習における行列最適化	308
	16.2.1 独立成分分析	308
	16.2.2 次元削減付き密度比推定	310
	16.3 多様体の諸概念	312
	16.4 多様体上の最適化	316
	16.4.1 最急降下法	316
	16.4.2 共役勾配法	317
	16.5 レトラクションとベクトル輸送	319
	16.6 行列多様体上の最適化	324
16.6.1 シュティーフェル多様体の性質	324	
16.6.2 レトラクションの構成	326	
16.6.3 射影によるベクトル輸送	327	
16.6.4 数値例	328	
■ 参考文献	332	
■ 索引	338	