数理計画法　第9回

第3章　非線形計画

3.1　非線形計画法の基礎
3.2　制約なし最適化

担当：　塩浦昭義
(情報科学研究科　助教授)
shioura@dais.is.tohoku.ac.jp

復習：制約なし最適化問題，勾配ベクトル

入力：目的関数 f(x) のみ

最小化　f(x)　条件　なし　($x \in R^n$)

関数 f の**勾配ベクトル**

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

一変数関数の場合は

$$\nabla f(x) = f'(x)$$

復習：テイラー展開

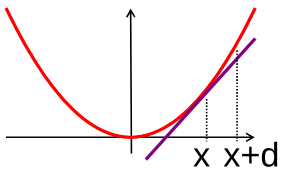
関数 f を点 x において**線形関数で近似**

(一次の) テイラー展開

$$f(\mathbf{x}+\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{d} + o(\|\mathbf{d}\|)$$

例：　$f_1(x) = x^2$　　$\nabla f_1(x) = 2x$

$$f_1(x+d) = (x+d)^2 = x^2 + (2x)d + d^2$$
$$= x^2 + (2x)d + o(|d|)$$



勾配ベクトルの性質 [p.89]

勾配ベクトルと逆の方向に進むと関数値が減る

性質：任意の x に対し、$\nabla f \neq 0$ ならば 十分小さい $\delta > 0$ に対して　$f(\mathbf{x} - \delta \nabla f(\mathbf{x})) < f(\mathbf{x})$

証明：$\delta = \varepsilon / \|\nabla f(\mathbf{x})\|, \mathbf{d} = -\delta \nabla f(\mathbf{x})$ とおく (ε：正の数)

テイラー展開より　$f(\mathbf{x}+\mathbf{d}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T \mathbf{d} + o(\|\mathbf{d}\|)$
$= f(\mathbf{x}) - \varepsilon \|\nabla f(\mathbf{x})\| + o(\varepsilon)$

正数 ε を十分小さくする ⇒ $\dfrac{o(\varepsilon)}{\varepsilon}$ は0に近い値

$$-\varepsilon \|\nabla f(\mathbf{x})\| + o(\varepsilon) = \varepsilon\left(-\|\nabla f(\mathbf{x})\| + \frac{o(\varepsilon)}{\varepsilon}\right) < 0$$

$$\therefore\ f(\mathbf{x}+\mathbf{d}) < f(\mathbf{x})$$

勾配ベクトルの性質 [p.89]

勾配ベクトルの方向に進むと関数値が増える

性質：任意の x に対し、∇f ≠ 0 ならば
十分小さい δ > 0に対して　$f(x+\delta\nabla f(x)) > f(x)$

証明は省略（直前の性質と同様に証明できる）

最適性条件 [p.97]

制約なし最適化問題：　最小化　f(x)

最適性条件：ベクトル x が非線形計画問題の最適解であるための**必要条件**

x は**停留点**　⇔　∇f(x) ＝0

定理（制約なし最適化問題の最適性条件）：
x^*: 制約なし問題の最適解　⇒　x^*は停留点

証明：　$\nabla f(x^*) \neq 0$ と仮定
勾配ベクトルの性質より、十分小さい δ > 0に対して

$$f(x^*-\delta\nabla f(x^*)) < f(x^*)$$

x^* が最適解であることに矛盾　∴ $\nabla f(x^*)=0$

最適性条件 [p.97]

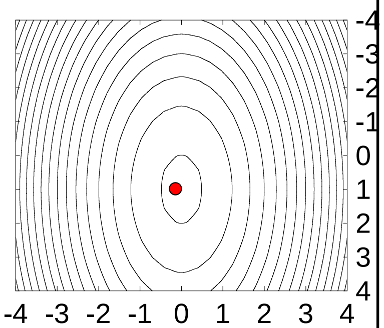
定理（制約なし最適化問題の最適性条件）：
x^*: 制約なし問題の最適解　⇒　$\nabla f(x^*) = 0$

例：
$$f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 - 2x_1 + 4x_2^2 = (x_1-1)^2 + 4x_2^2 - 1$$

$(x_1, x_2) = (1,0)$ が最適解

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2 \\ 8x_2 \end{pmatrix}$$

$$\nabla f(1,0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$



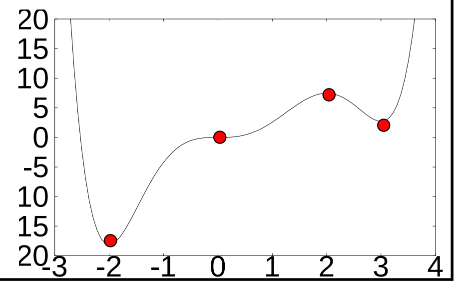
最適性条件 [p.97]

※「x^*は停留点 ⇒ x^*は最適解」は必ずしも成り立たない

例：
$$f(x) = \frac{1}{6}x^6 - \frac{3}{5}x^5 - x^4 + 4x^3$$

$$\nabla f(x) = (x+2)x^2(x-2)(x-3)$$

停留点はx = -2, 0, 2, 3
最適解はx = -2 **のみ**



極小解、極大解、鞍点 [p.99]

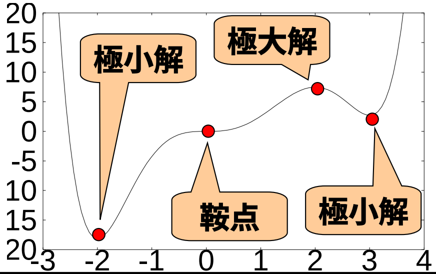
停留点 x^* の分類

極小解: x^* の付近だけに注目したとき、x^* は最小

> ある $\delta > 0$ が存在して、$\|x - x^*\| \leqq \delta$ を満たす
> すべての x に対して $f(x) \geqq f(x^*)$

極大解: x^* の付近だけに注目したとき、x^* は最大

鞍点: 極小点でも
極大点でもない停留点



制約なし問題の解法1:最急降下法 [p.102]

> **最急降下法のアイディア:**
> 勾配ベクトルと逆の方向に進むと関数値が減る

現在の点 x を $x - \alpha \nabla f(x)$ により更新

$\Rightarrow$ 関数値 $f(x)$ を減らしていく

ステップサイズ

ステップサイズの選び方:

次の一変数最適化問題を (近似的に) 解く

最小化　$f(x - \alpha \nabla f(x))$　条件　$\alpha > 0$

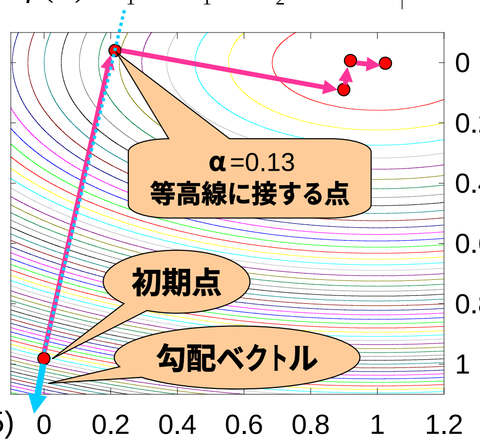
直線探索と呼ばれる

最急降下法の実行例 [p.103]

教科書の例3.2,3.8:　$f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 - 2x_1 + 4x_2^2$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2 \\ 8x_2 \end{pmatrix}$$

- $(x_1, x_2) = (0,1)$ からスタート
- $\nabla f(0,1) = (-2,8)$
- $f(0 + 2\alpha, 1 - 8\alpha)$ を最小にするのは $\alpha = 0.13$
- 次の点は $(x_1, x_2) = (0.26, -0.05)$



最急降下法のアルゴリズム [p.102]

入力: 関数 f とその勾配ベクトル ∇f
初期点 x^0

ステップ0: $k = 0$ とする

ステップ1: x^k が最適解に十分近ければ終了

ステップ2: 最急降下方向 $-\nabla f(x^k)$ を計算

ステップ3: 直線探索問題

最小化　$f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))$　条件　$\alpha > 0$

を解き、解を α^k とする

ステップ4: $x^{k+1} = x^k - \alpha^k \nabla f(x^k)$ とおく

ステップ5: $k = k+1$ として、ステップ1に戻る

最適解の判定 [p.104,105]

•非線形計画問題では
最適解を正確に求めることは困難

⇒ 最適解に十分近い解 (近似最適解) を求める

例: $f(x) = x^4 - 4x^2$
この関数を最小にする x は 0, $\pm\sqrt{2}$
無理数をコンピュータで表現することは不可能

•最適解に十分近いことをどうやって判定する？

(方法1) 最適解 x^* に対し $\|\nabla f(x)\| = 0$ が成り立つ
⇒ $\|\nabla f(x)\|$ の値が十分小さくなったら終了

(方法2) 最適解の近くでは x^k があまり変化しない
⇒ $\|x^{k+1} - x^k\|$ の値が十分小さくなったら終了

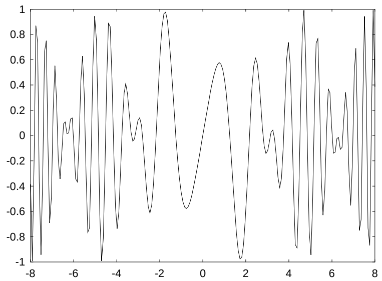
最適解の判定（つづき）[p.104,105]

•非線形計画問題では
近似最適解すら求めることが困難なことが多い

⇓

極小解または停留点を
求めることで我慢する

•極小解は良い解であること
が多い
•ある種の非線形関数では
極小解⇔最小解



定理: ある仮定の下では、
最急降下法の求める点列は停留点に収束する

ヘッセ行列 [p.90]

関数 f のヘッセ行列

$$
\mathrm{H}\, f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix}
\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\
\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n}
\end{pmatrix}
$$

一変数関数の場合は2階導関数に一致

$$\mathrm{H}\, f(x) = f''(x)$$

ヘッセ行列（続き）[p.89]

例:

$f_1(x) = x^2$ ⇒ $\nabla f_1(x) = 2x$ ⇒ $\mathrm{H}\, f_1(x) = 2$

$f_2(x_1, x_2) = \sin x_1 + \cos x_2$ ⇒ $\nabla f_2(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \cos x_1 \\ -\sin x_2 \end{pmatrix}$

⇒ $\mathrm{H}\, f_2(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} -\sin x_1 & 0 \\ 0 & -\cos x_2 \end{pmatrix}$

$f_3(x_1, x_2) = x_1 x_2 + \log x_1$

⇒ $\nabla f_3(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} x_2 + 1/x_1 \\ x_1 \end{pmatrix}$ ⇒ $\mathrm{H}\, f_3(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} -1/x_1^2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

ヘッセ行列とテイラー展開[p.90]

関数 f は**勾配ベクトル**と**ヘッセ行列**により表現される
2次関数により近似できる

$$f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}) + \nabla f(\boldsymbol{x})^T \boldsymbol{d} + \frac{1}{2}\boldsymbol{d}^T \mathrm{H} f(\boldsymbol{x})\boldsymbol{d} + o(\|\boldsymbol{d}\|^2)$$

関数 f の (x における) 2次のテイラー展開

$$\|\boldsymbol{d}\| = \sqrt{d_1^2 + d_2^2 + \cdots + d_n^2}$$

関数 f を多項式で表現したときの
2次項までの情報を取り出した式

ヘッセ行列とテイラー展開 (続き) [p.90]

$$f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}) + \nabla f(\boldsymbol{x})^T \boldsymbol{d} + \frac{1}{2}\boldsymbol{d}^T \mathrm{H} f(\boldsymbol{x})\boldsymbol{d} + o(\|\boldsymbol{d}\|^2)$$

例1： $f_1(x) = x^2$ $\quad \nabla f_1(x) = 2x$ $\quad \mathrm{H} f_1(x) = 2$

左辺 $= f_1(x+d) = (x+d)^2$

右辺 $= x^2 + (2x)d + d^2 = (x+d)^2$

∴2次関数 f_1 の2次のテイラー展開は f_1 に等しい

※一般に、2次関数 $f(x) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T V \boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T \boldsymbol{x} + c_0$

のテイラー展開は f に等しい

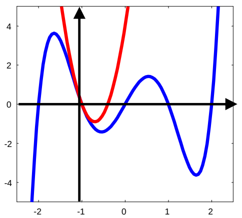
V: n×n行列
c: n 次元ベクトル
c_0: 定数

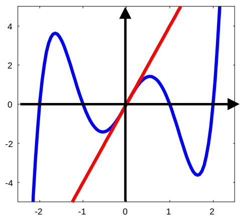
ヘッセ行列とテイラー展開 (続き) [p.90]

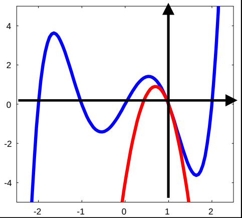
例2： $f(x) = (x-2)(x-1)x(x+1)(x+2) = x^5 - 5x^3 + 4x$

$\nabla f(x) = 5x^4 - 15x^2 + 4$ $\qquad \mathrm{H} f(x) = 20x^3 - 30x$

x = -1 のとき	x = 0 のとき	x = 1 のとき
テイラー展開 $0 - 6d + 5d^2$	$0 + 4d + 0d^2$	$0 - 6d - 5d^2$







行列の正定値性、半正定値性[p.99]

正定値 (半正定値) ････行列が「正 (非負)」

定義：正方行列 A は**半正定値**
⇔ 任意のベクトル y に対して $y^T A y \geqq 0$

定義：正方行列 A は**正定値**
⇔ 任意の非零ベクトル y に対して $y^T A y > 0$

※ A が1×1行列のとき、
A は半正定値 ⇔ $a_{11} \geqq 0$, A は正定値 ⇔ $a_{11} > 0$

行列の正定値性、半正定値性[p.99]

定義：正方行列 A は**半正定値**
　⇔　任意のベクトル y に対して $y^T A y \geqq 0$

定義：正方行列 A は**正定値**
　⇔　任意の非零ベクトル y に対して $y^T A y > 0$

※ A が2×2行列のとき、
　Aは正定値 ⇔ $a_{11} > 0,\ a_{22} > 0,\ a_{11}a_{22} - a_{12}^2 > 0$
　Aは半正定値 ⇔ $a_{11} \geqq 0,\ a_{22} \geqq 0,\ a_{11}a_{22} - a_{12}^2 \geqq 0$

$\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{pmatrix}$ 正定値　$\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}$ 半正定値　$\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 0 \end{pmatrix}$ 半正定値ではない

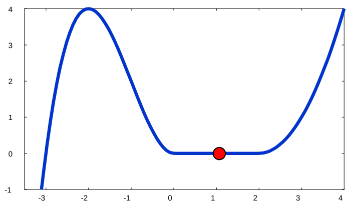
2次の最適性条件 (必要条件) [p.99]

ヘッセ行列を用いた最適性条件

定理 (2次の必要条件)：
x*: 制約なし問題の**極小解**
　　　⇒ Hf(x*) は**半正定値**

例：
x* = 1 は極小解
0≦x≦2 の範囲で f(x) = 0

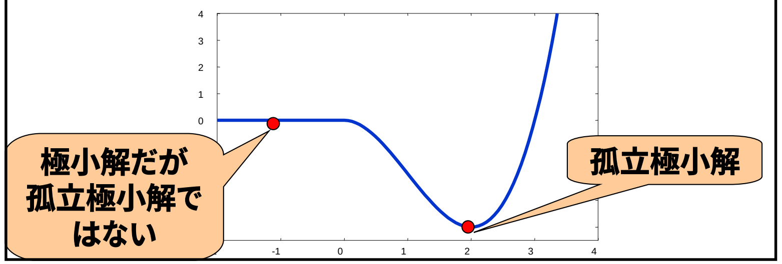
⇒ ∇f(x*) = f '(x*) = 0
　Hf(x*) = f ''(x*) = 0
　　　半正定値



2次の最適性条件 (十分条件) [p.100]

定理 (2次の十分条件)：
x* は**停留点**，Hf(x*) は**正定値**
　⇒　x*: 制約なし問題の (孤立) 極小解

定義：x* は**孤立極小解**
⇔　x* は極小、近傍内に同じ関数値をもつ点が存在しない



2次の最適性条件 (十分条件) [p.100]

定理：Hf(x*) は正定値　⇒　(孤立) 極小解

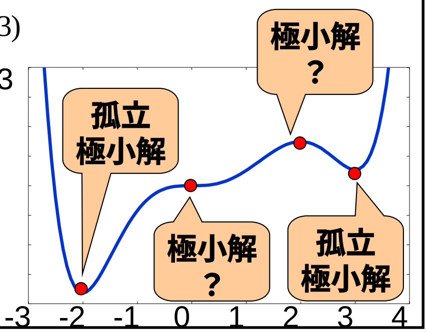
例1：$f(x) = \frac{1}{6}x^6 - \frac{3}{5}x^5 - x^4 + 4x^3$

$\nabla f(x) = (x+2)x^2(x-2)(x-3)$

⇒ 停留点はx = -2, 0, 2, 3

$\mathrm{H}\, f(x) = 5x^4 - 12x^3 - 12x^2 + 24x$

⇒ Hf(-2) = 80 > 0
　Hf(0) = 0
　Hf(2) = -16 < 0
　Hf(3) = 45 > 0



2次の最適性条件（十分条件） [p.100]

定理： x* は停留点，Hf(x*) は正定値
⇒ x*: (孤立) 極小解

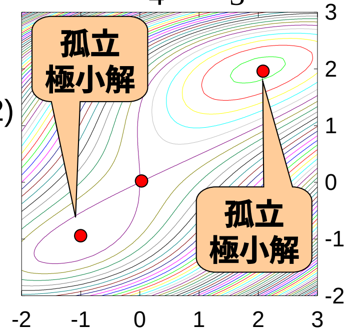
例2 (教科書の例3．4)： $f(\boldsymbol{x})=x_1^2-2x_1x_2+\frac{1}{4}x_2^4-\frac{1}{3}x_2^3$

$$\nabla f(\boldsymbol{x})=\begin{pmatrix}2x_1-2x_2\\ x_2^3-x_2^2-2x_1\end{pmatrix}$$

停留点は(0,0), (-1, -1), (2, 2)

$$\mathrm{H}f(\boldsymbol{x})=\begin{pmatrix}2 & -2\\ -2 & 3x_2^2-2_2\end{pmatrix}$$

(-1, -1), (2, 2) **は 孤立極小解**



極大解に関する性質

- x* は関数 f の (孤立) 極大解
  ⇔ x* は関数 – f の (孤立) 極小解
- x* における関数 – f のヘッセ行列は – Hf(x)

極大解であるための条件

定理：
x*: 制約なし問題の**極大解** ⇒ – Hf(x*) は**半正定値**

定理：
x* は**停留点**， – Hf(x*) は**正定値**
⇒ x*: 制約なし問題の **(孤立) 極大解**

レポート問題

(1) 教科書p.162，問題3.1の関数のヘッセ行列を計算せよ

(2) 関数 $f(x,y) = (x-2)^4 + (x-2y)^2$ に対して、初期点を (0, 3) として最急降下法を適用せよ。
資料に添付してある等高線の図を使って
実行すればよい．
(数値を具体的に計算するのは一回目の反復だけでよい)
ポイント：点の動きを表す折れ線の角度は必ず90度

演習問題の答え

問題１：下記の４つの関数の勾配ベクトルを計算しなさい

$f_1(x_1, x_2) = x_1 + 2x_2$ $\qquad f_2(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 1$

教科書の練習問題3．1の答えを参照

問題２：関数 f_1, f_2 に対し，x＝ (1，1) におけるテイラー展開を求めなさい．また，テイラー展開と元の関数の間の誤差が0．1以下となるxの範囲を (大雑把で良いので) 計算しなさい．

f_1の場合：テイラー展開と完全に一致， f_2の場合：$(x_1-1)^2+(x_2-1)^2 \leqq 0.1$

問題３：次の２つの非線形計画問題
「最大化 $f_1(x_1, x_2)$ 条件 $f_2(x_1, x_2) \leqq 5$」 $\quad \left(\sqrt{\frac{6}{5}}, 2\sqrt{\frac{6}{5}}\right)$
「最小化 $f_2(x_1, x_2)$ 条件 $f_1(x_1, x_2)=3$」 $\quad \left(\frac{3}{5}, \frac{6}{5}\right)$
を (手計算で) 解きなさい．
また，問題および最適解を図で表しなさい．

演習問題4の答え

下記の問題例に対し，説明したアルゴリズムを使って安定な割当を求めなさい．

A-4, B-3, C-2, D-1

また，男女の立場を入れ替えてアルゴリズムを適用し，安定な割当を求めなさい．

A-4, B-1, C-2, D-3

男A：2 4 1 3	女1：BADC
男B：3 1 4 2	女2：DCAB
男C：2 3 1 4	女3：ADCB
男D：4 1 3 2	女4：BADC

演習問題5の答え（ブルージェイズの優勝可能性：○）