

数理計画法 第13回

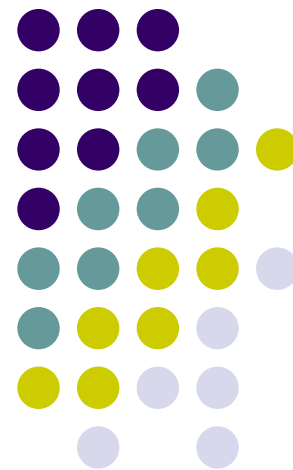
第3章 非線形計画

3.2 制約なし最適化

担当： 塩浦昭義

(情報科学研究科 准教授)

shioura@dais.is.tohoku.ac.jp



期末試験について



- 日時: 1月28日(木)午後1時より
- 受験資格者: 以下の条件を満たす学生
 - 中間試験に合格している
 - ネットワーク最適化と非線形計画に関するレポートを一回以上提出
- 教科書等の持込は不可
- 座席はこちらで指定
- 試験内容: ネットワーク最適化, 非線形計画の範囲
(次回の内容まで)
(詳しくはWeb上の過去問を参考にしてください)

復習：勾配ベクトルに関する性質



制約なし最適化問題： 最小化 $f(x)$

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

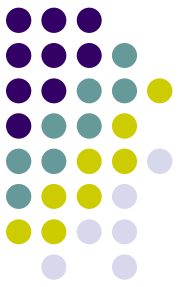
$\Rightarrow x^*$ は停留点 $\nabla f(x) = 0$

勾配ベクトルと逆の方向に進むと関数値が減る

性質：任意のベクトル $y \in \mathbf{R}^n$ に対し, $\nabla f(y) \neq 0$ ならば
十分小さい $\delta > 0$ に対して $f(y - \delta \nabla f(y)) < f(y)$

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

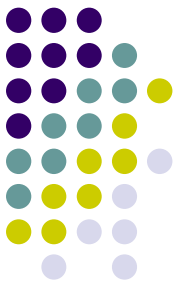
ステップサイズの選び方:

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

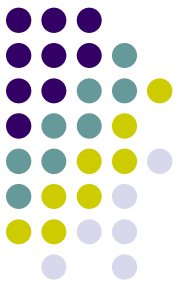
最小化 $f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))$ 条件 $\alpha > 0$

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

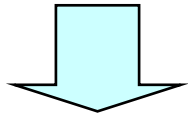
(方法2) 最適解の近くでは x^k があまり変化しない

→ $\|x^{k+1} - x^k\|$ 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]

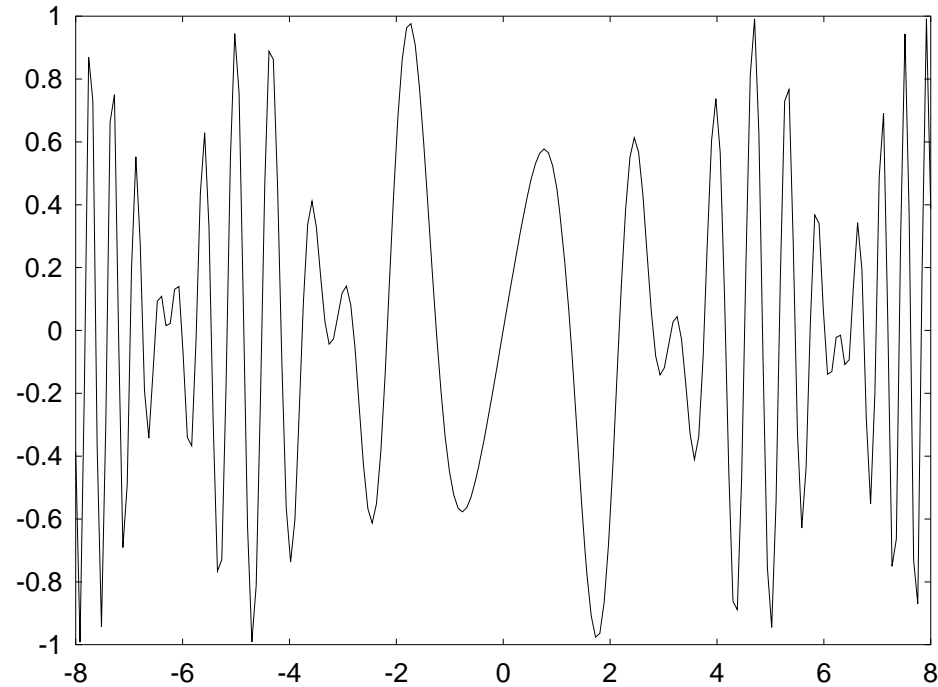


- 非線形計画問題では
近似最適解すら求めることが困難なことが多い



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 \Leftrightarrow 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

$$H f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}$$

一変数関数の場合は2階導関数に一致

$$H f(x) = f''(x)$$

ヘッセ行列(続き) [p.89]



例:

$$f_1(x) = x^2 \quad \nabla f_1(x) = f_1'(x) = 2x, \quad \mathbf{H}f_1(x) = f_1''(x) = 2$$

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

$$\longrightarrow \quad \mathbf{H}f_2(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -\sin x_1 & 0 \\ 0 & -\cos x_2 \end{pmatrix}$$

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

$$\longrightarrow \quad \nabla f_3(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} x_2 + 1/x_1 \\ x_1 \end{pmatrix} \longrightarrow \quad \mathbf{H}f_3(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -1/x_1^2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

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

関数 $f(x)$ の $x=a$ における二次のテイラー展開
(a は定数ベクトル)

$$f(x) = f(a) + \nabla f(a)^T (x-a) + \frac{1}{2}(x-a)^T Hf(a)(x-a) + \psi(x-a)$$

この部分が二次関数, $f(x)$ を近似

関数 $\psi(x-a) = \varphi(x_1 - a_1, x_2 - a_2, \dots, x_n - a_n)$ は

$x_1 - a_1, x_2 - a_2, \dots, x_n - a_n$ に関する

3次以上の項からなる n 変数多項式関数

(定数項, 一次, 二次の項は全く含まれない)

ヘッセ行列とテイラー展開(続き) [p.90]



例1: $f_1(x) = x^2$ $\nabla f_1(x) = 2x$ $H f_1(x) = 2$

$$\begin{aligned} f(x) &= a^2 + (2a)(x-a) + \frac{1}{2} \cdot 2(x-a)^2 + \psi(x-a) \\ &= x^2 + \psi(x-a) \end{aligned}$$

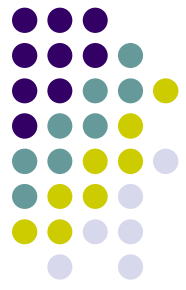
$$\therefore \psi(x-a) = 0$$

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

の2次のテイラー展開において、
 $\psi(\mathbf{x}-\mathbf{a}) = 0$

V: $n \times n$ 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: $f(x) = (x-2)(x-1)x(x+1)(x+2) = x^5 - 5x^3 + 4x$

$$\nabla f(x) = 5x^4 - 15x^2 + 4$$

$$H f(x) = 20x^3 - 30x$$

$a = -1$ のとき

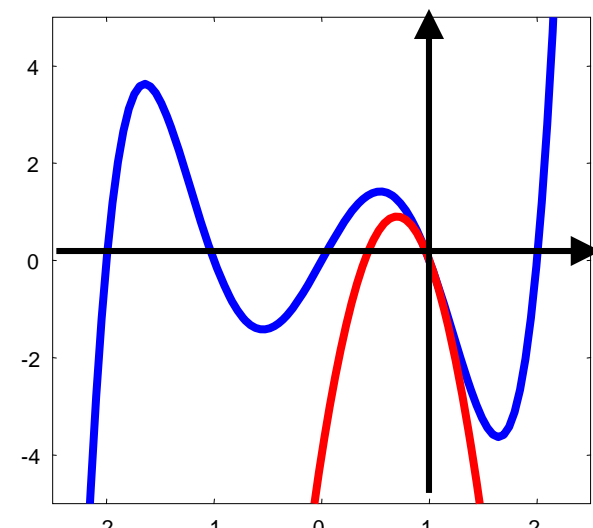
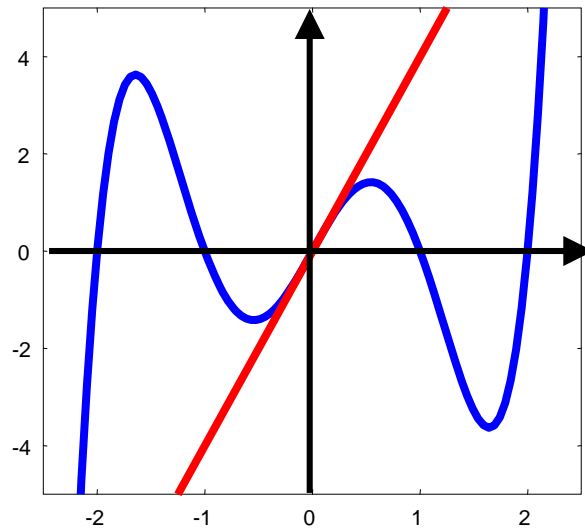
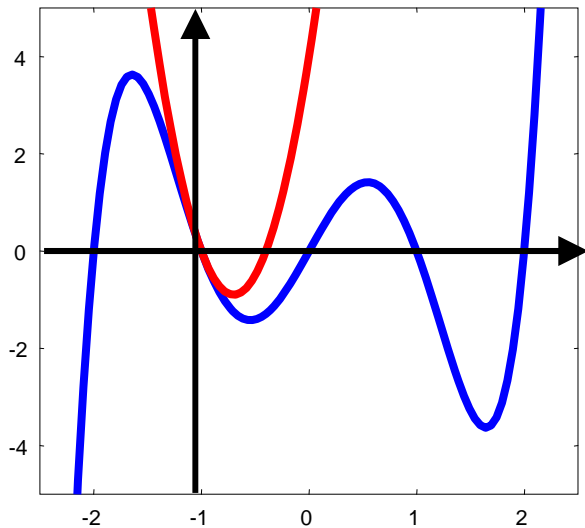
$$0 - 6(x+1) + 5(x+1)^2$$

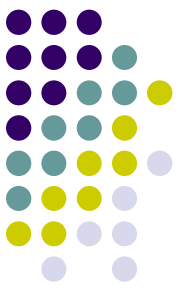
$a = 0$ のとき

$$0 + 4x + 0x^2$$

$a = 1$ のとき

$$0 - 6(x-1) - 5(x-1)^2$$





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

$$\Leftrightarrow \text{任意のベクトル } y \text{ に対して } y^T A y \geq 0$$

定義: 正方行列 A は正定値

$$\Leftrightarrow \text{任意の非零ベクトル } y \text{ に対して } y^T A y > 0$$

※ A が 1×1 行列のとき、

$$A \text{ は半正定値} \Leftrightarrow a_{11} \geq 0, \quad A \text{ は正定値} \Leftrightarrow a_{11} > 0$$



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

$$\Leftrightarrow \text{任意のベクトル } y \text{ に対して } y^T A y \geq 0$$

定義: 正方行列 A は正定値

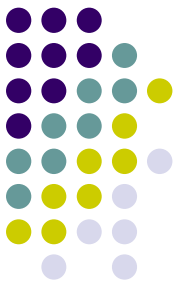
$$\Leftrightarrow \text{任意の非零ベクトル } y \text{ に対して } y^T A y > 0$$

※ A が 2×2 行列のとき、

$$A \text{ は正定値} \Leftrightarrow a_{11} > 0, a_{22} > 0, a_{11}a_{22} - a_{12}^2 > 0$$

$$A \text{ は半正定値} \Leftrightarrow a_{11} \geq 0, a_{22} \geq 0, a_{11}a_{22} - a_{12}^2 \geq 0$$

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



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

$\Rightarrow Hf(x^*)$ は半正定値

例:

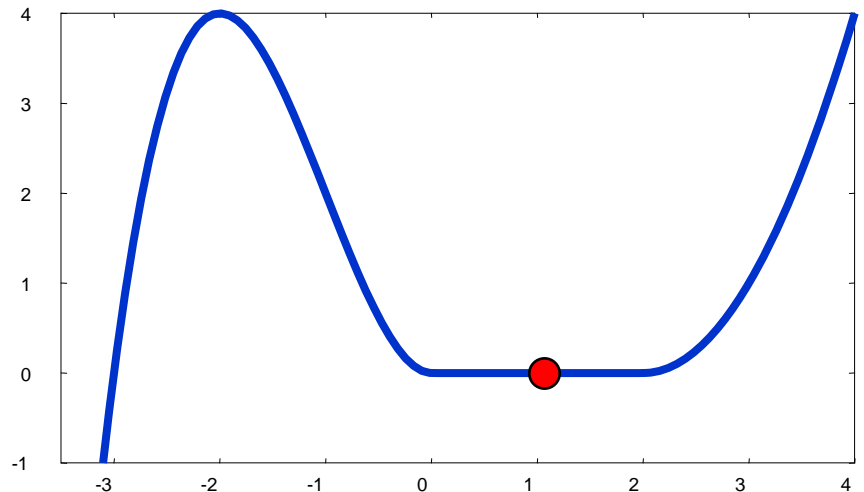
$x^* = 1$ は極小解

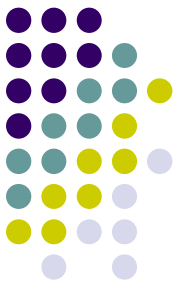
$0 \leq x \leq 2$ の範囲で $f(x) = 0$

$\Rightarrow \nabla f(x^*) = f'(x^*) = 0$

$Hf(x^*) = f''(x^*) = 0$

半正定値





2次の最適性条件(十分条件) [p.100]

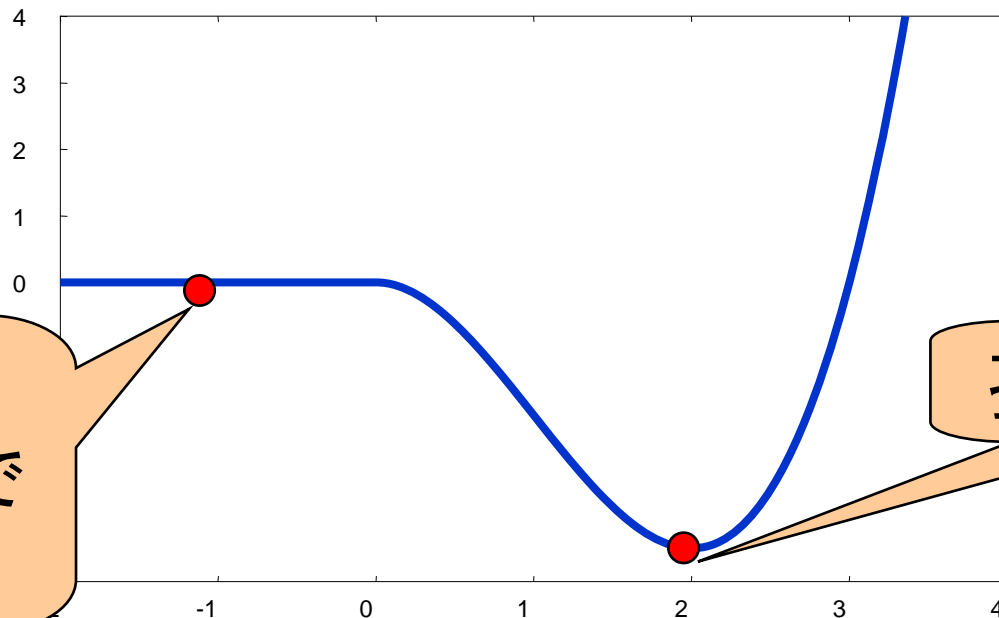
定理(2次の十分条件):

x^* は停留点, $Hf(x^*)$ は正定値

$\Rightarrow x^*$: 制約なし問題の(孤立)極小解

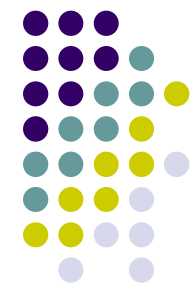
定義: x^* は孤立極小解

$\Leftrightarrow x^*$ は極小、近傍内に同じ関数値をもつ点が存在しない



極小解だが
孤立極小解で
はない

孤立極小解



2次的最適性条件(十分条件) [p.100]

定理: $Hf(x^*)$ は正定値 \Rightarrow (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 $x = -2, 0, 2, 3$

$Hf(x) = 5x^4 - 12x^3$

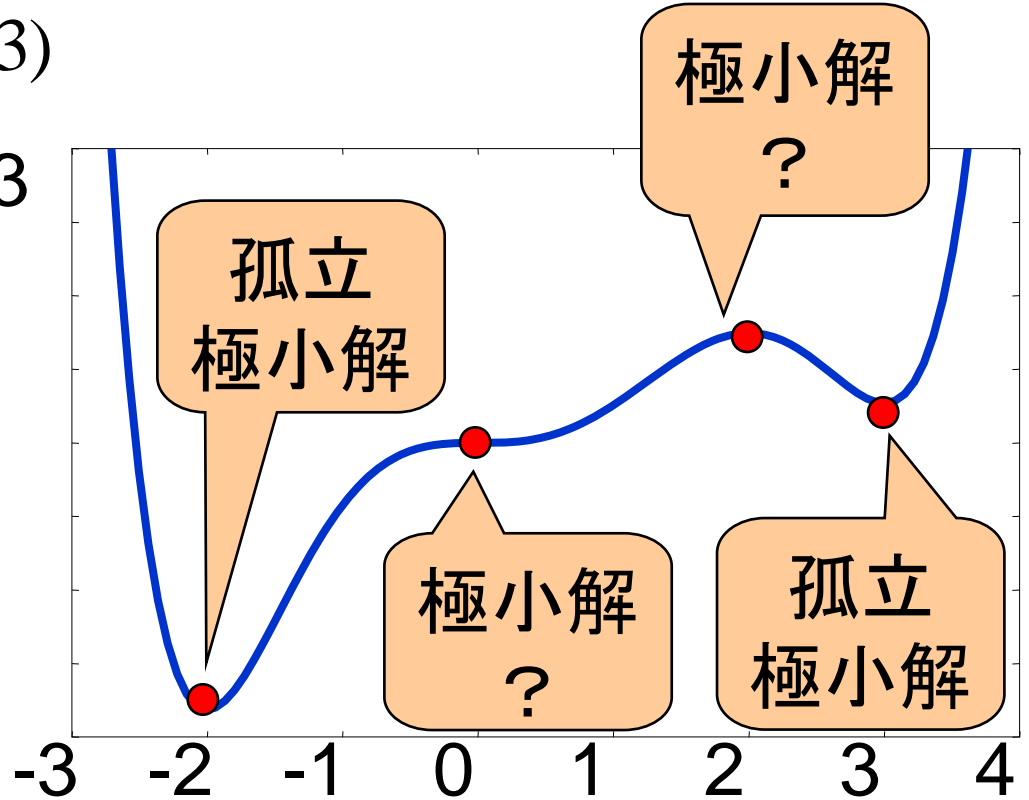
$-12x^2 + 24x$

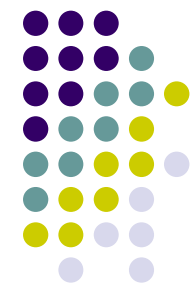
$Hf(-2) = 80 > 0$

$Hf(0) = 0$

$Hf(2) = -16 < 0$

$Hf(3) = 45 > 0$





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
 $\Rightarrow x^*$: (孤立)極小解

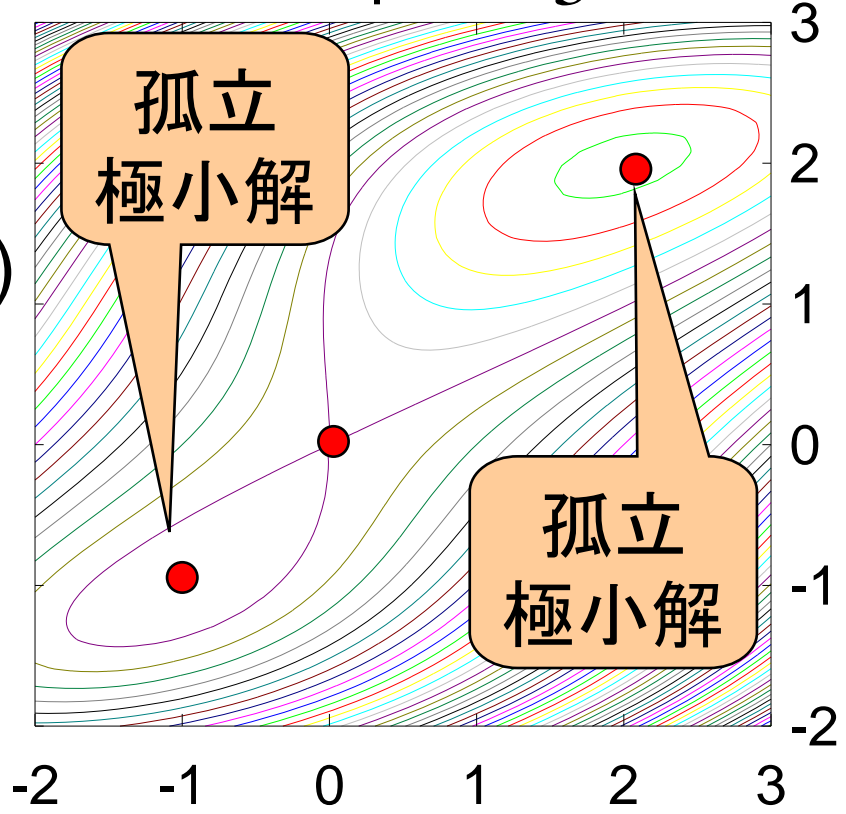
例2(教科書の例3.4): $f(x) = x_1^2 - 2x_1x_2 + \frac{1}{4}x_2^4 - \frac{1}{3}x_2^3$

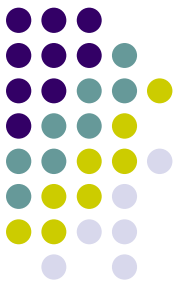
$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2x_2 \\ x_2^3 - x_2^2 - 2x_1 \end{pmatrix}$$

➡ 停留点は $(0,0)$, $(-1, -1)$, $(2, 2)$

$$Hf(x) = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 3x_2^2 - 2x_2 \end{pmatrix}$$

➡ $(-1, -1)$, $(2, 2)$ 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:

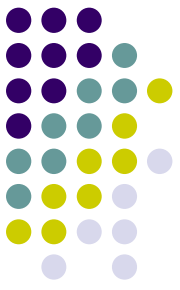
x^* : 制約なし問題の極大解 $\Rightarrow -Hf(x^*)$ は半正定値

定理:

x^* は停留点, $-Hf(x^*)$ は正定値

$\Rightarrow x^*$: 制約なし問題の (孤立) 極大解

レポート問題



問題1: 関数 f_1, f_2 に対し, $x=(1, 2)$ における2次のテイラー展開を求めなさい.

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

問題2: 関数 $f(x, y) = x^2 - xy + 2y^2 - 2x + e^{x+y}$ について次の問題を解きなさい.

- (a) 勾配ベクトルとヘッセ行列を計算せよ.
- (b) 原点(0,0)が極小解か否か, 最適性条件を用いて判定せよ.
- (c) 関数 f から最後の項 e^{x+y} を削除したときの f に対し, すべての停留点を求めよ. さらに, 極小点, 極大点, 鞍点のいずれであるか, 2次の最適性条件を用いて判定せよ.

問題3: 対称な 2×2 行列 A に対し, 次の関係を証明せよ.

$$A \text{ は半正定値} \Leftrightarrow a_{11} \geq 0, a_{22} \geq 0, a_{11}a_{22} - a_{12}^2 \geq 0$$

(ヒント: 教科書の問題3.7の答えを参考にせよ)

勾配ベクトルの性質



勾配ベクトルと逆の方向に進むと関数値が減る

性質: 任意のベクトル $y \in \mathbf{R}^n$ に対し, $\nabla f(y) \neq 0$ ならば
十分小さい $\delta > 0$ に対して $f(y - \delta \nabla f(y)) < f(y)$

証明: $d = -\delta \nabla f(y)$ とおく (δ : 正の実数)

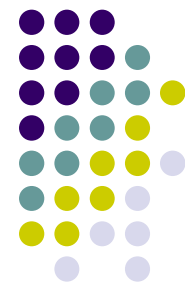
一次のテイラー展開において $x = y + d$, $a = y$ とおくと,

$$\begin{aligned} f(y + d) &= f(y) + \nabla f(y)^T d + \varphi(d) \\ &= f(y) - \delta \|\nabla f(y)\|^2 + \varphi(-\delta \nabla f(y)) \end{aligned}$$

φ は 2 次以上の項からなる多項式関数

$\Rightarrow \varphi(-\delta \nabla f(y))$ は δ に関する 2 次以上の項からなる
一変数関数

勾配ベクトルの性質



勾配ベクトルと逆の方向に進むと関数値が減る

性質: 任意のベクトル $y \in \mathbf{R}^n$ に対し, $\nabla f(y) \neq 0$ ならば
十分小さい $\delta > 0$ に対して $f(y - \delta \nabla f(y)) < f(y)$

証明の続き:

$\varphi(-\delta \nabla f(y))$ は δ に関する2次以上の項からなる一変数関数

$\Rightarrow \varphi(-\delta \nabla f(y))/\delta$ は δ に関する1次以上の項からなる

$\therefore \delta$ を十分小さくすると, $\varphi(-\delta \nabla f(y))/\delta$ は0に近づく

$$\therefore -\delta \|\nabla f(y)\|^2 + \varphi(-\delta \nabla f(y))$$

$$= -\delta \{ \|\nabla f(y)\|^2 - \varphi(-\delta \nabla f(y))/\delta \} < 0$$

$$\therefore f(y - \delta \nabla f(y)) < f(y)$$