数理計画法　第14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：ヘッセ行列とテイラー展開

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

$$f(x) = \underbrace{f(a) + \nabla f(a)^T (x-a) + \frac{1}{2}(x-a)^T \mathsf{H} f(a)(x-a)}_{\text{この部分が二次関数, f(x) を近似}} + \psi(x-a)$$

d = x - a とおくと（x の代わりに d が変数になる）

$$f(a+d) = f(a) + \nabla f(a)^T (d) + \frac{1}{2}(d)^T \mathsf{H} f(a)(d) + \psi(d)$$

復習:行列の正定値性、半正定値性

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

復習：極小解，極大解に関する性質

定理：
x^*: 制約なし問題の極小解　⇒　$Hf(x^*)$ 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）極小解

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

制約なし問題の解法2:ニュートン法 [p.105]

定義:2次関数 $f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T V \boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T \boldsymbol{x} + c_0$

は狭義2次凸関数 ⇔ V は正定値行列

ニュートン法のアイディア:

狭義2次凸関数の最適解は簡単に求められる！

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = V\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c} \qquad \mathrm{H}\, f(\boldsymbol{x}) = V$$

停留点は $x^* = -V^{-1}c$ のみ, ヘッセ行列は V (正定値)

⇒ 2次の十分条件より x^* は最適解

制約なし問題の解法2:ニュートン法 [p.105]

ニュートン法のアイディア:

狭義2次凸関数の最適解は簡単に求められる！

ただし，一般の関数 f は狭義2次凸とは限らない

⇒ f の代わりに，2次のテイラー近似 を使う

$$\boxed{f(x+d) \simeq f(x) + \nabla f(x)^T(d) + \frac{1}{2}(d)^T \mathrm{H} f(x)(d)}$$

ヘッセ行列 Hf(x) が正定値のとき

最適解は $d = -\mathrm{H}f(x)^{-1} \nabla f(x)$

ニュートン方向

⇒ x + d は f の最適解のより良い近似解と期待できる

ニュートン法のアルゴリズム [p.106]

現在の点 x を繰り返しニュートン方向へ移動、最適解に近づける

入力 : 関数 f とその勾配ベクトル ∇f, ヘッセ行列 Hf
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 : ニュートン方向 $-Hf(x^k)^{-1}\nabla f(x^k)$ を計算

ステップ3 : $x^{k+1}=x^k - Hf(x^k)^{-1}\nabla f(x^k)$ とおく

ステップ4 : $k=k+1$として、ステップ1に戻る

ニュートン法の例 [p.106]

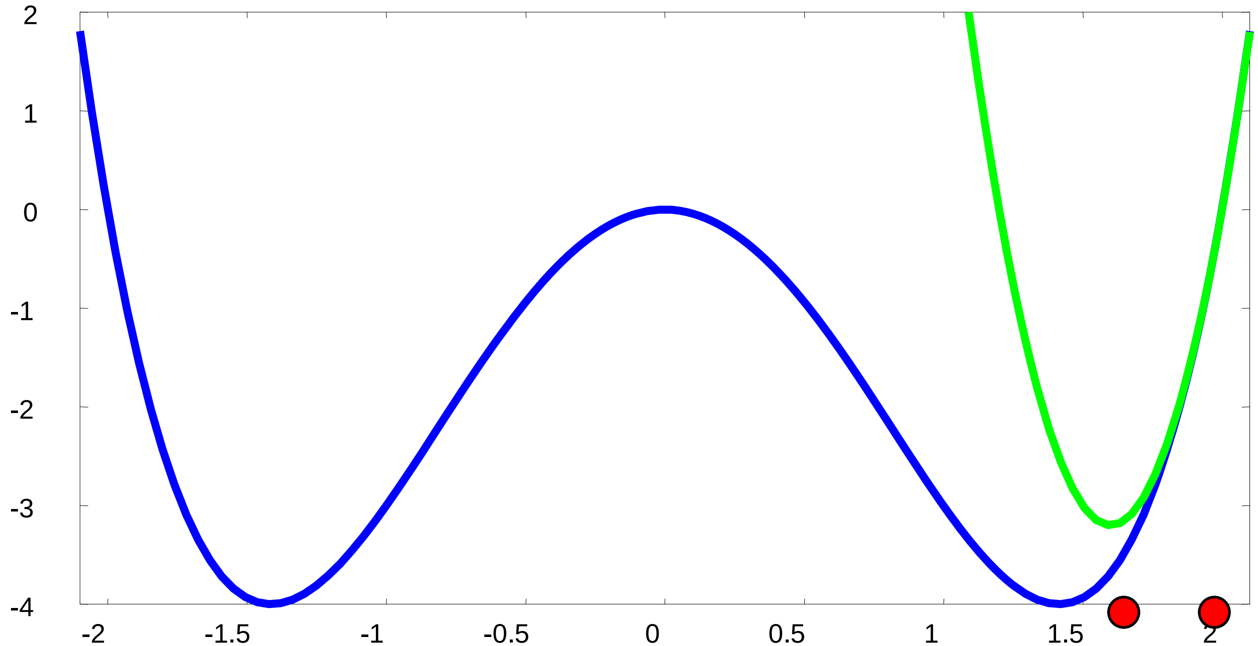
例1 : 一変数関数　$f(x) = x^4 - 4x^2$

初期点 $x = 2$ においてfのテイラー近似を求める

⇒　$f(2+d) \fallingdotseq 0 + 16d + (40/2)d^2$

$d = -2/5$ のとき最小

⇒ 次の点は $x = 2 - 2/5 = 8/5$



ニュートン法の例 [p.106]

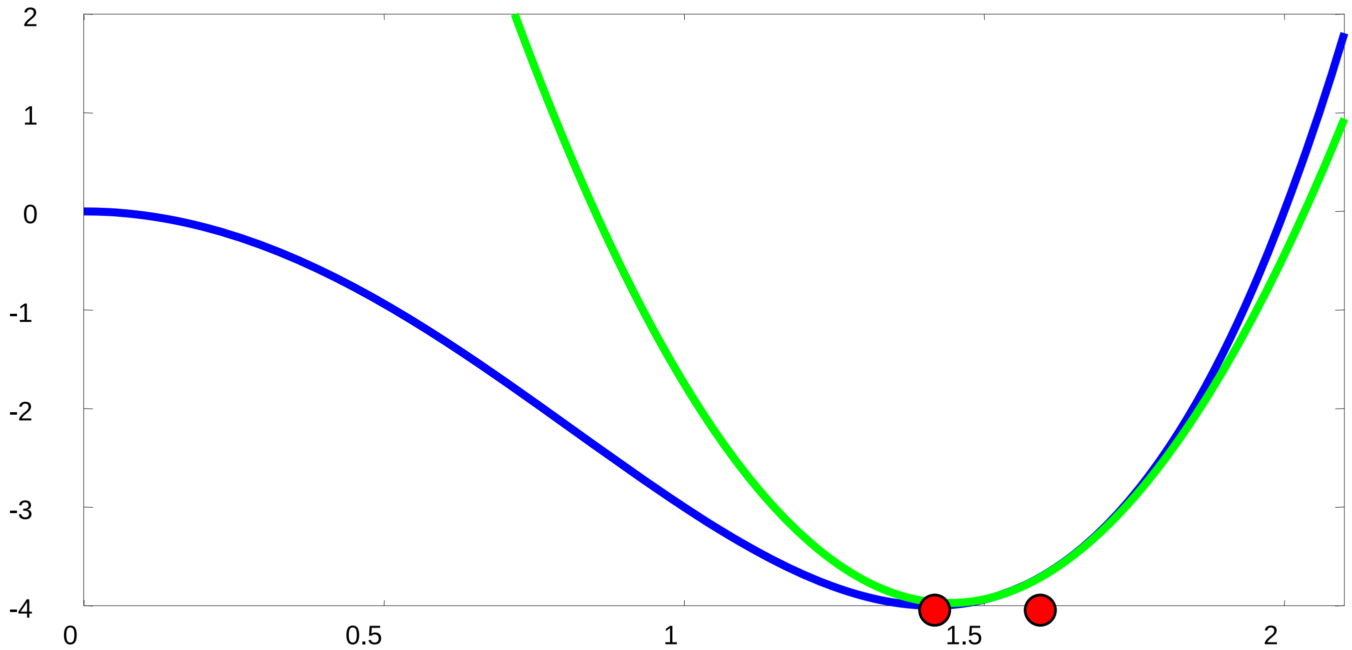
例1(続き) : 一変数関数 $f(x) = x^4 - 4x^2$

点 $x = 8/5$ においてfのテイラー近似を求める

⇒ $f(8/5+d) \fallingdotseq -3.69 + 3.58d + 11.36d^2$

$d = -0.11$ のとき最小

⇒ 次の点は $x = 1.6 – 0.11 = 1.49$



ニュートン法の特徴 [p.107]

長所:

- 最急降下法より反復回数が少ない
  - 狭義2次凸関数に対しては一反復で終了
- 直線探索が不要

短所:

- ヘッセ行列の逆行列の計算が必要
  - ヘッセ行列の計算ができないと破綻
  - ヘッセ行列が正則でないと破綻
- ヘッセ行列が正定値でない場合には

  目的関数値が増加する可能性あり

ニュートン法の問題点 [p.107]

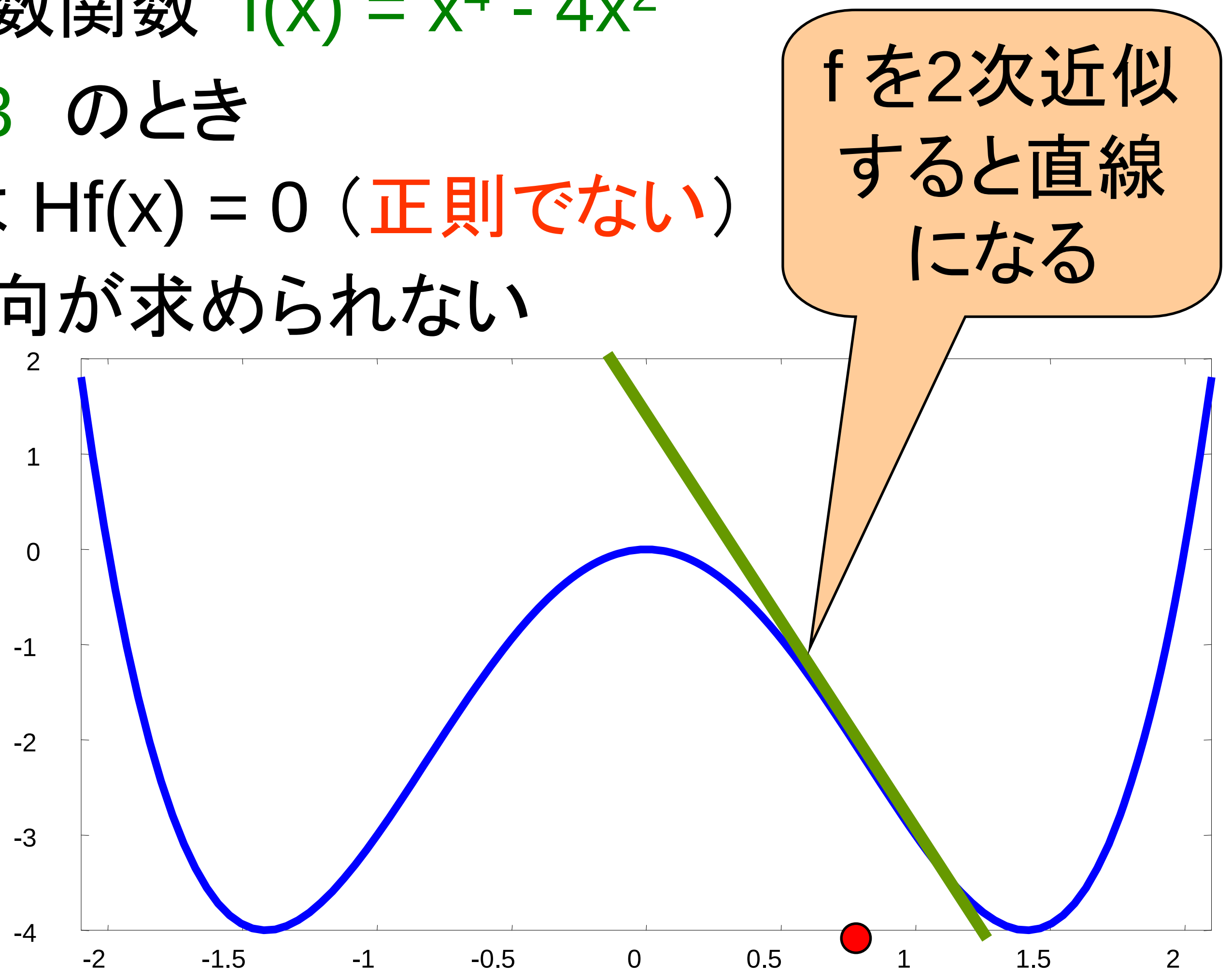
■ ヘッセ行列が正則でないと破綻

例1（続き）: 一変数関数　$f(x) = x^4 - 4x^2$

初期点 $x = \sqrt{2/3}$　のとき

⇒　ヘッセ行列は $Hf(x) = 0$（正則でない）

⇒　ニュートン方向が求められない



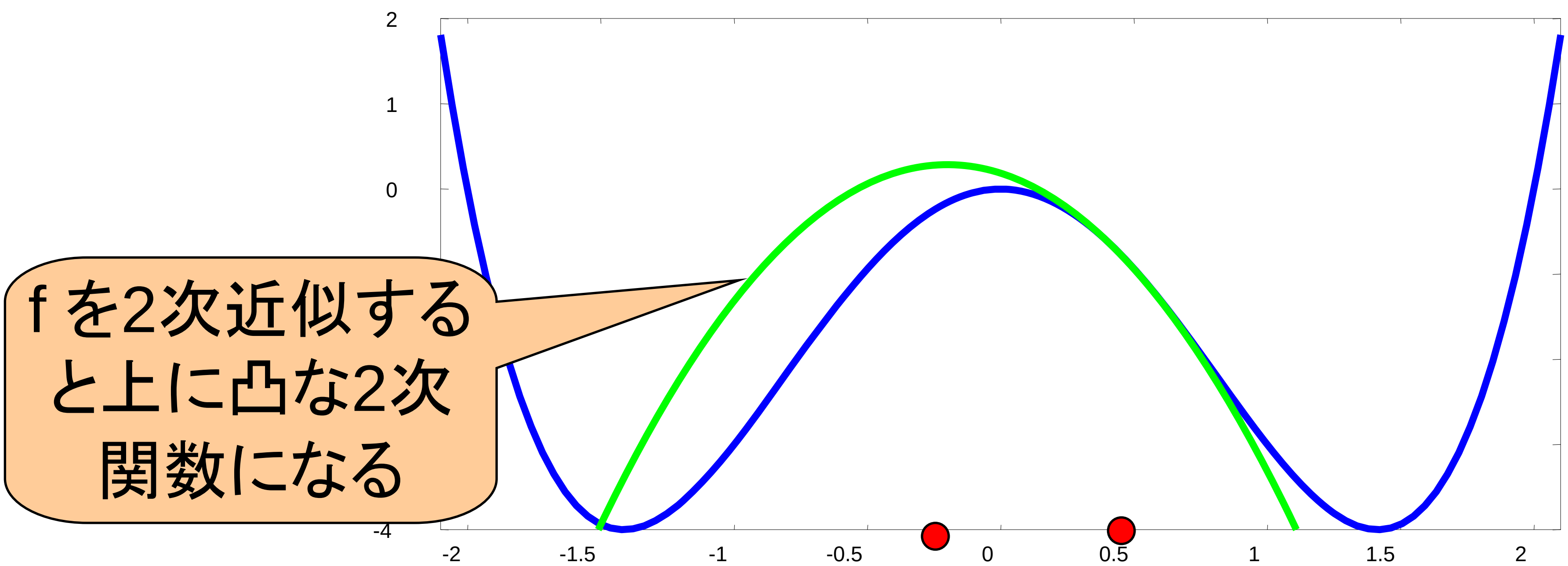
ニュートン法の問題点 [p.107]

- ヘッセ行列が正定値でない場合には
  目的関数値が増加する可能性あり

初期点 x = 1/2　のとき

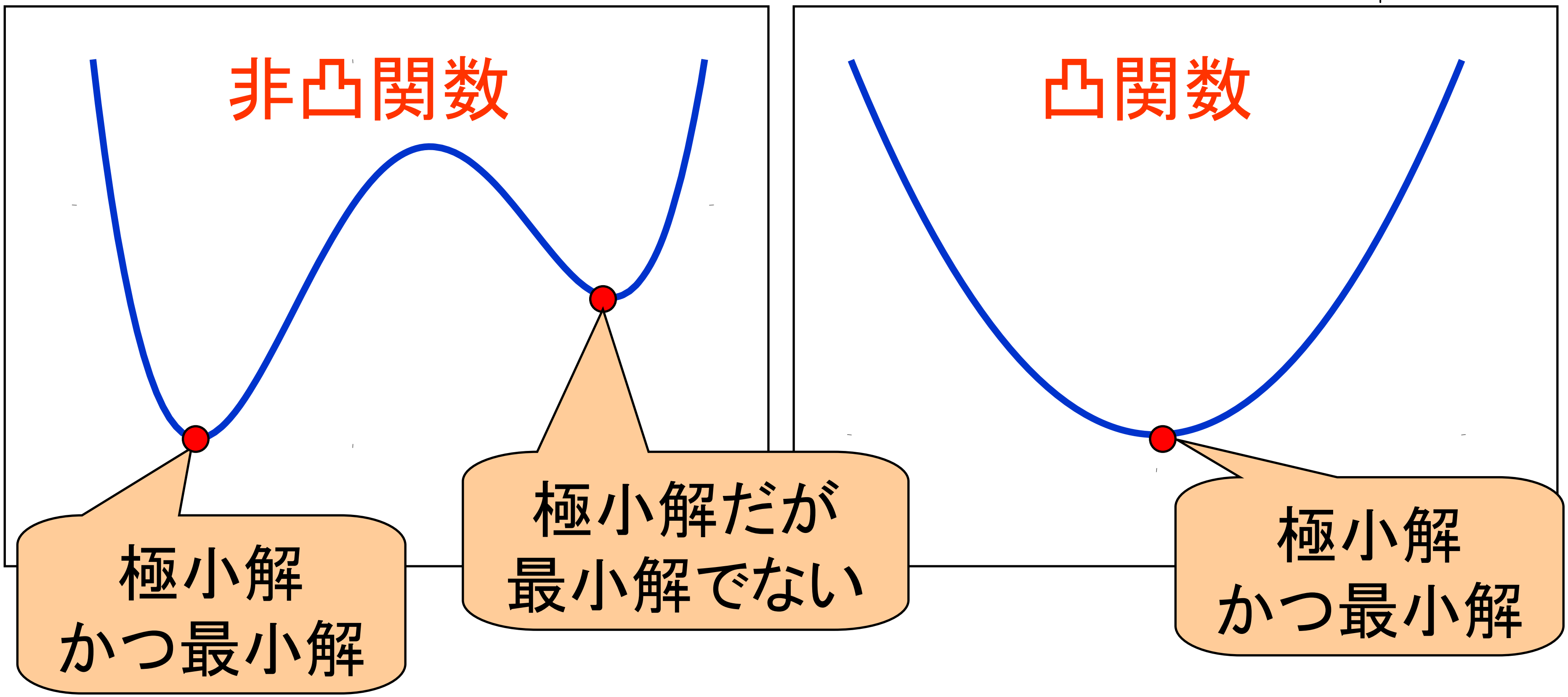
⇒　ヘッセ行列は Hf(x) = -5（正定値でない）

⇒　ニュートン方向に進むと関数値が増加する



凸関数 [p.93]

最小化しやすい関数の形は？



最小解でない極小解がある
➔最小化が難しい

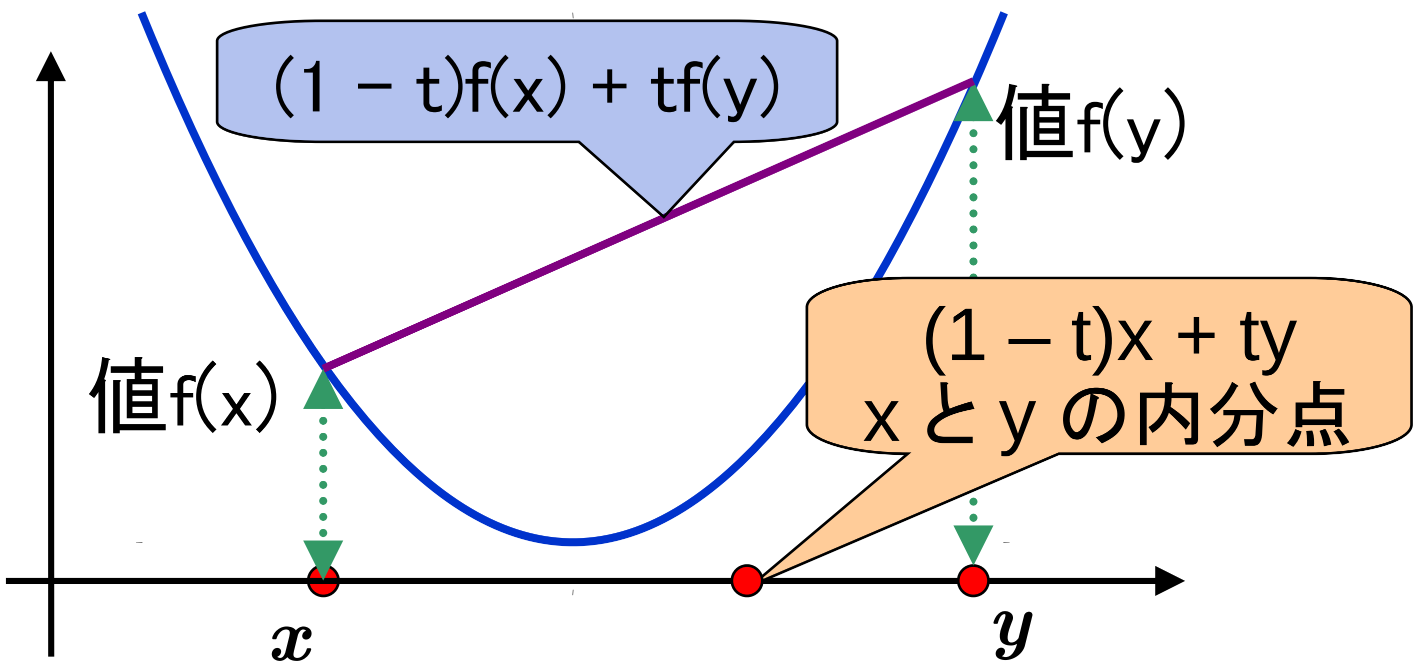
極小解が一つ
➔最小化しやすい

凸関数の定義 [p.94]

定義：関数 f は凸関数
⇔　任意のベクトル x, y
および任意の $0 \leqq t \leqq 1$ に対して

$$(1 - t) f(x) + t f(y) \geqq f((1 - t) x + t y)$$

注：教科書の定義と異なります



凸関数の定義(続き) [p.94]

凸関数 ⇔ (1 − t) f(x) + t f(y) ≧ f((1 − t) x + t y)

凸関数の例

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

(V: n ×n 行列, c: n次元ベクトル, c_0: 定数)

V :半正定値行列 ⇒ 凸関数

例えば

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

凸関数の定義（続き） [p.94]

凸関数 ⇔ $(1-t)\, f(x) + t\, f(y) \geqq f((1-t)\, x + t\, y)$

2次関数 $f(x) = a\, x^2\ (a > 0)$ は凸関数

（証明）任意の異なる x, y と $0 < t < 1$ に対して、

$$(1-t)\, ax^2 + t\, a\, y^2 - a\,[(1-t)\, x + t\, y]^2$$

$$= (1-t)\, ax^2 + t\, a\, y^2 - a\,(1-t)^2\, x^2 - a\, t^2\, y^2 - 2a\,(1-t)\, t\, x\, y$$

$$= (t-t^2)\, ax^2 + (t-t^2)\, a\, y^2 - 2a\,(t-t^2)\, x\, y$$

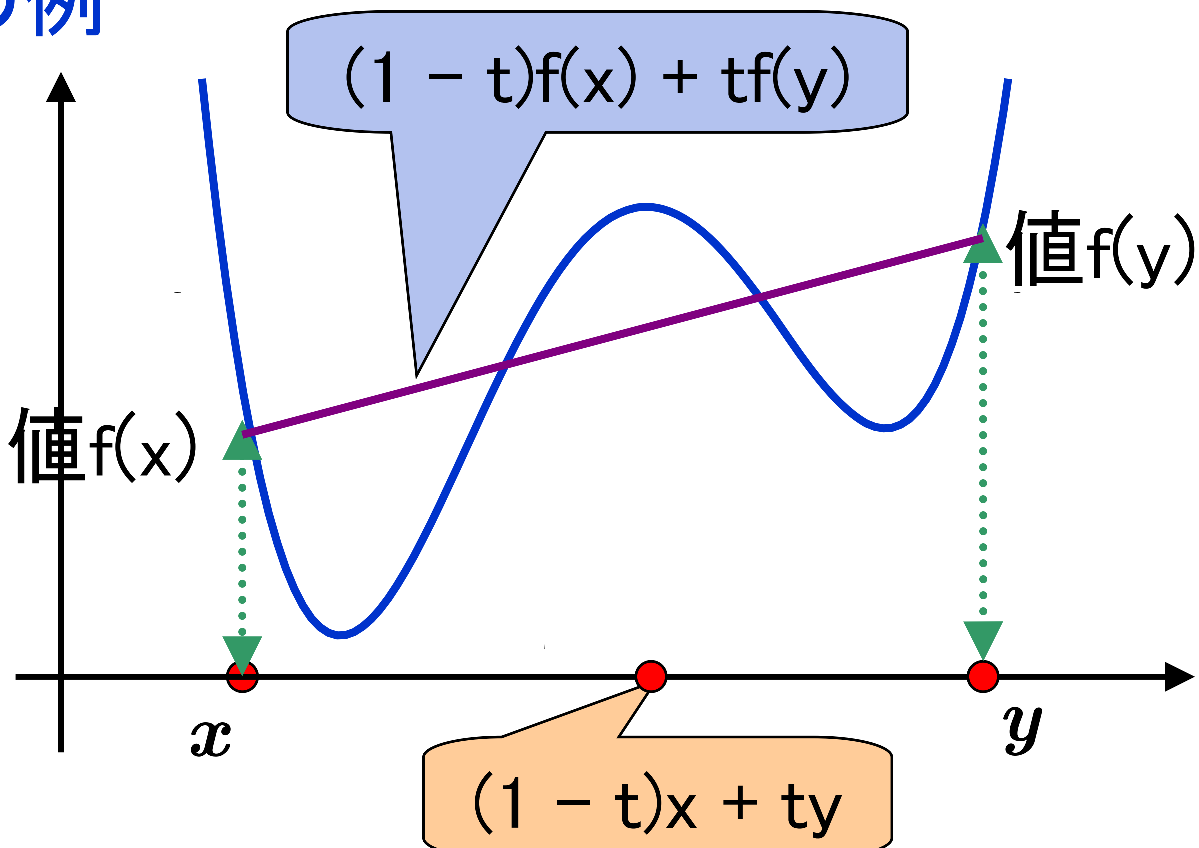
$$= (t-t^2)\, a\,(x - y)^2$$

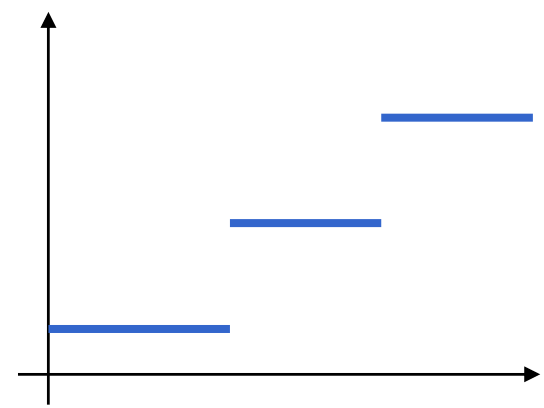
> 0 （$0 < t < 1,\ x \neq y$ より）

凸関数の定義（続き）[p.94]

凸関数 ⇔ $(1-t)\,f(x) + t\,f(y) \geqq f((1-t)\,x + t\,y)$

非凸関数の例

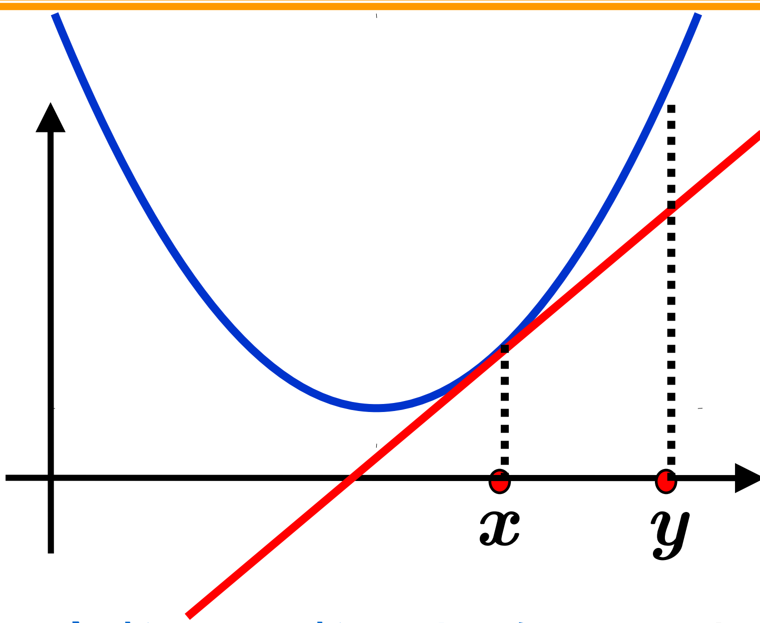




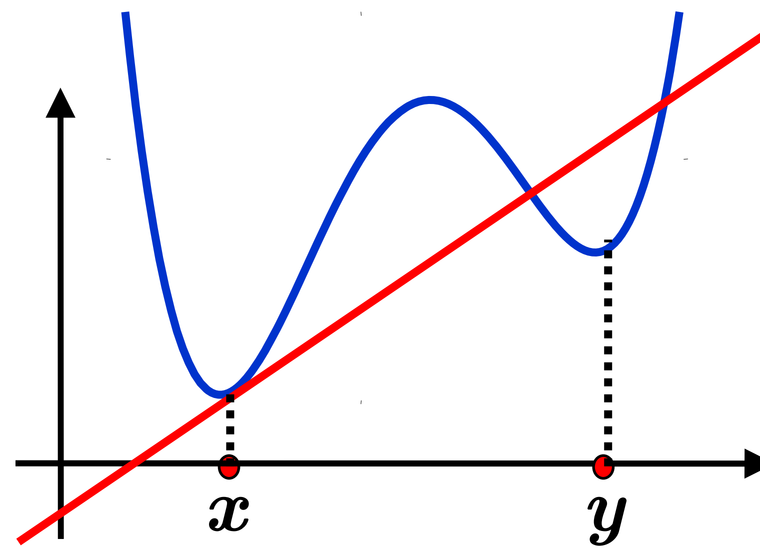
凸関数の性質 [p.95]

定理: f: 凸関数, 微分可能（勾配ベクトルが定義可能）
⇒　任意のベクトル x, y に対して次の不等式が成立

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)(y - x)$$



一変数凸関数の場合: x における
接線 $y = f(x) + \nabla f(x)(y - x)$
より f(y) は上にある



一変数非凸関数の場合は
成り立たない

凸関数の最適解の必要条件 [p.101]

定理： f: 凸関数, 微分可能（勾配ベクトルが定義可能）
x*: f の停留点（∇f(x*)=0）
⇒ x*は制約なし問題の最適解

証明：f は凸関数なので，任意のx, y に対して次が成り立つ

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)(y - x)$$

x = x* を代入すると， ∇f(x*)=0なので

$$f(y) \geq f(x^*) + \nabla f(x^*)(y - x^*) = f(x^*)$$

すなわち，任意のベクトル y の関数値より， x* の関数値は少ない（または等しい）

∴ x*は最適解

凸関数の最適解の必要条件 [p.101]

定理: f: 凸関数, x^*: f の極小解
　　⇒ x^*は制約なし問題の最適解

証明: x^* は極小解
　⇒ ある $\varepsilon > 0$が存在して、
　任意の x に対し $\|x - x^*\| < \varepsilon$ ならば $f(x) \geqq f(x^*)$

$f(y) < f(x^*)$ なる y が存在すると仮定
　　f は凸関数
⇒ $0 < t < 1$ なる任意の t に対して
$f((1-t)\,y + t\,x^*) \leqq (1-t)\,f(y) + t\,f(x^*) < f(x^*)$
t を1に近づけると
　$(1-t)\,y + t\,x^*$ と x^* の距離 $< \varepsilon$（矛盾）

レポート問題
（提出は任意，締切1月28日）

問題1：関数 $f(x) = x^3 + 6x^2$ に対して

（a）初期点を $x = 2$ としてニュートン法を適用せよ。

（b）初期点を $x = 1$ としてニュートン法を適用せよ。

それぞれ、反復は2回行うこと。

問題2：関数 $f(x) = |x|$ は凸関数である．これを証明せよ．

前々回の演習問題の答え

問題3： 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ること.（数値はおおまかに計算すればよい）

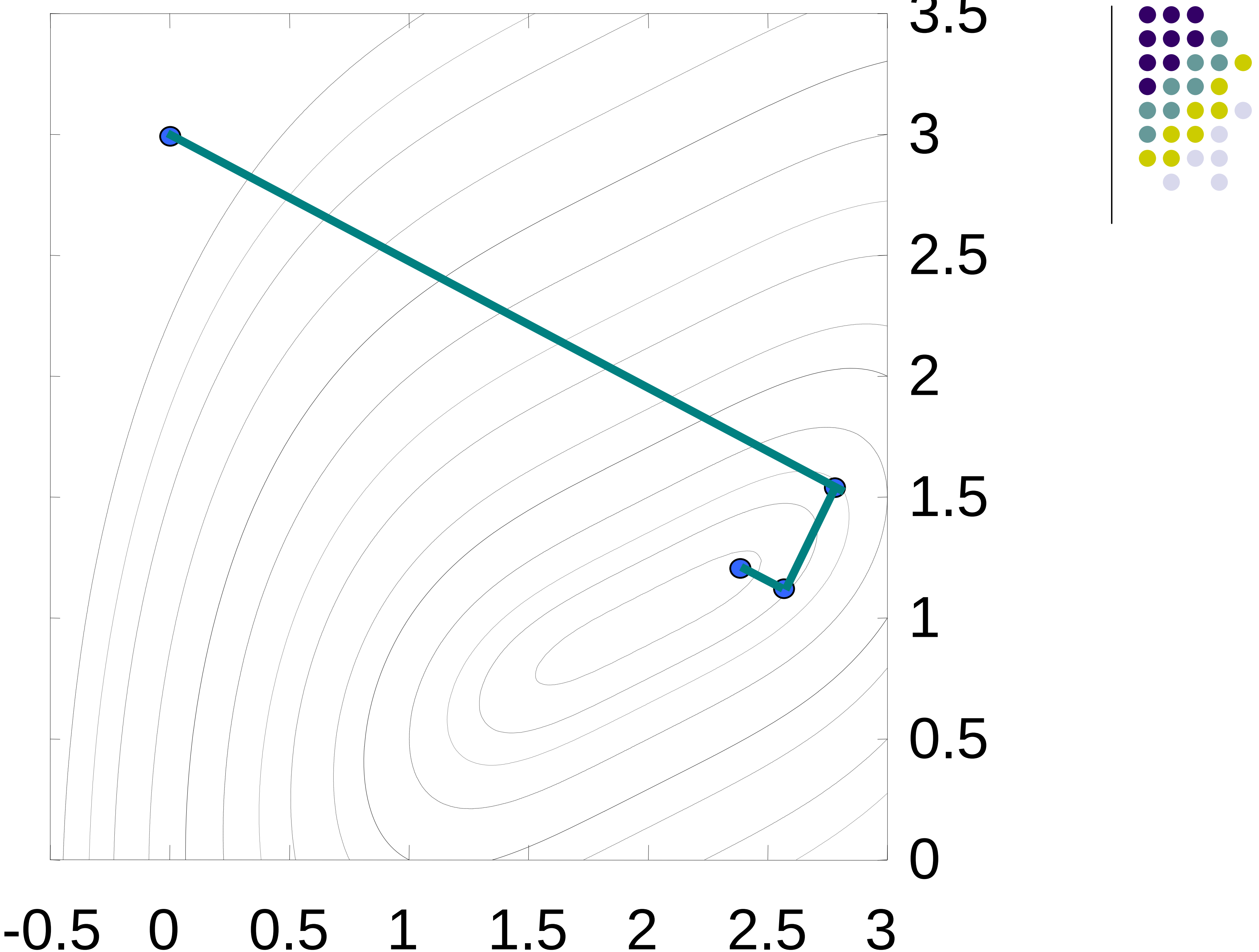
ポイント: 点の動きを表す折れ線の角度は必ず90度

点の動きは次の通り

(0.00, 3.00)➔(2.70, 1.51)

➔(2.52, 1.20)➔(2.43, 1.25)

➔…


3.5
3
2.5
2
1.5
1
0.5
0
-0.5
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3