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：2月3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，一次のテイラー展開

関数 f の勾配ベクトル(gradient vector)

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

関数 f(x) の x=a における
一次のテイラー展開(Taylor expansion)

$$f(x) = f(a) + \nabla f(a)^T (x-a) + \varphi(x-a)$$

関数 $\varphi(x-a) = \varphi(x_1 - a_1, x_2 - a_2, \ldots, x_n - a_n)$ は
$x_1 - a_1, x_2 - a_2, \ldots, x_n - a_n$ に関する
2次以上の項からなる n 変数多項式関数
(定数項，一次の項は全く含まれない)

復習：勾配ベクトルに関する性質

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

f が一変数関数の場合，次のように書き換えられる

性質：任意の実数 $y \in \mathbf{R}$ に対し，$f'(y) \neq 0$ ならば
十分小さい $\delta > 0$ に対して $f(y - \delta f'(y)) < f(y)$

復習:最適性条件

制約なし最適化問題:　最小化　$f(x)$

- 最適性条件(optimality condition):

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(stationary point) ⇔ $\nabla f(x) = 0$

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

復習：最急降下法

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－ α ∇f(x) により更新

⇒ 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

復習：最急降下法のアルゴリズム

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

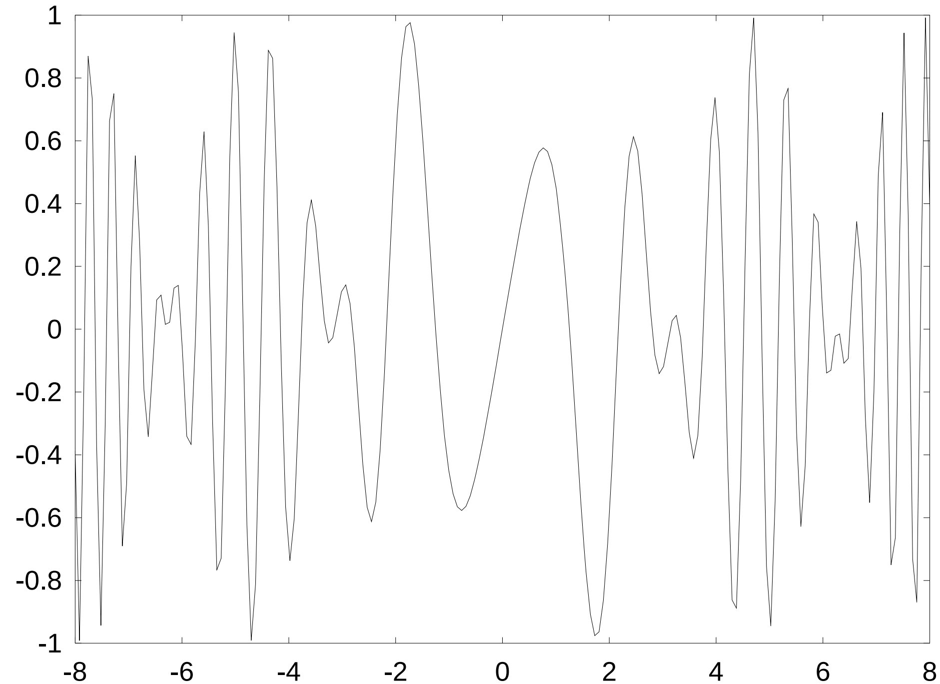
（方法2）最適解の近くでは x^k があまり変化しない
⇒ $\|x^{k+1} - x^k\|$ の値が十分小さくなったら終了

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：

$$f_1(x) = x^2 \qquad \nabla f_1(x) = f_1'(x) = 2x,\ \mathsf{H} f_1(x) = f_1''(x) = 2$$

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

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

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

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

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

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）

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

この部分が二次関数, f(x) を近似

関数 $\psi(x-a) = \varphi(x_1 - a_1, x_2 - a_2, \ldots, x_n - a_n)$ は
$x_1 - a_1, x_2 - a_2, \ldots, x_n - a_n$ 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： $f_1(x) = x^2$ $\nabla f_1(x) = 2x$ $\mathrm{H}\, f_1(x) = 2$

$$f(x) = a^2 + (2a)(x-a) + \frac{1}{2}\cdot 2(x-a)^2 + \psi(x-a)$$
$$= x^2 + \psi(x-a)$$
$$\therefore\ \psi(x-a) = 0$$

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

の2次のテイラー展開において，
ψ(x-a) = 0

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

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

$\mathrm{H}\, f(x) = 20x^3 - 30x$

a = -1 のとき

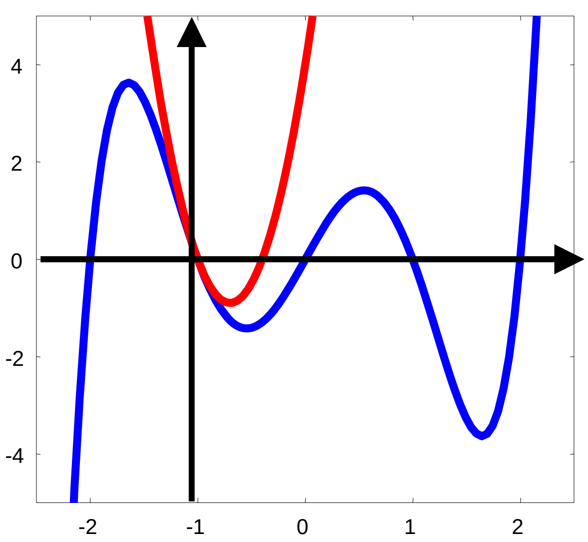
$0 - 6(x+1) + 5(x+1)^2$

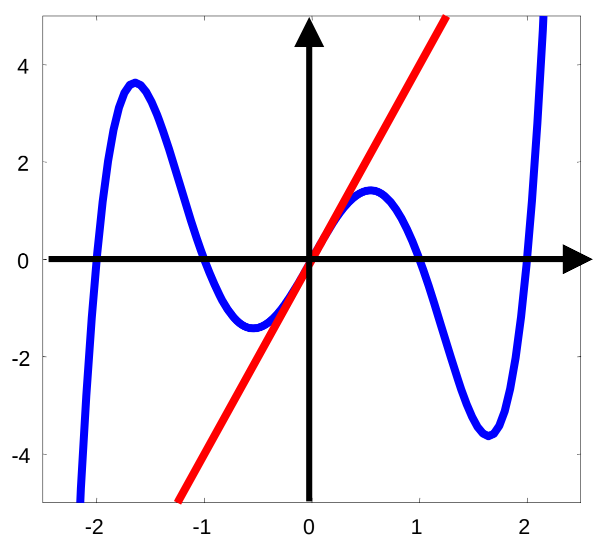
a = 0 のとき

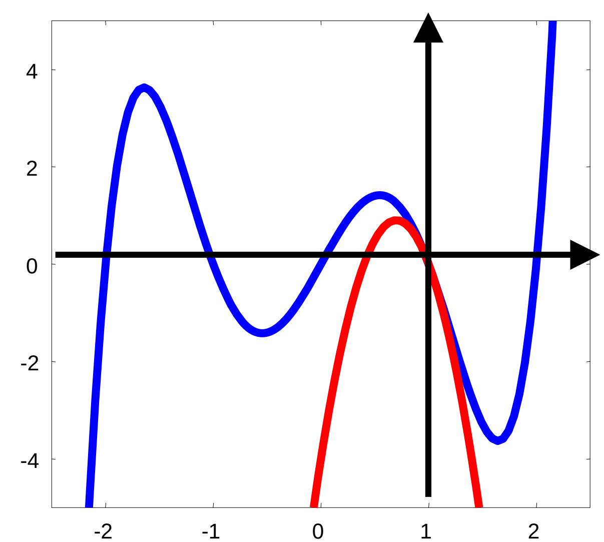
$0 + 4x + 0x^2$

a = 1 のとき

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







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．

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

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) [取り消し]

(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．．