# 数理計画法　第11回

## 非線形最適化その1

### 一次の最適性条件と最急降下法

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

# 非線形計画問題とは？

目的関数や制約式が**必ずしも線形でない**数理計画問題

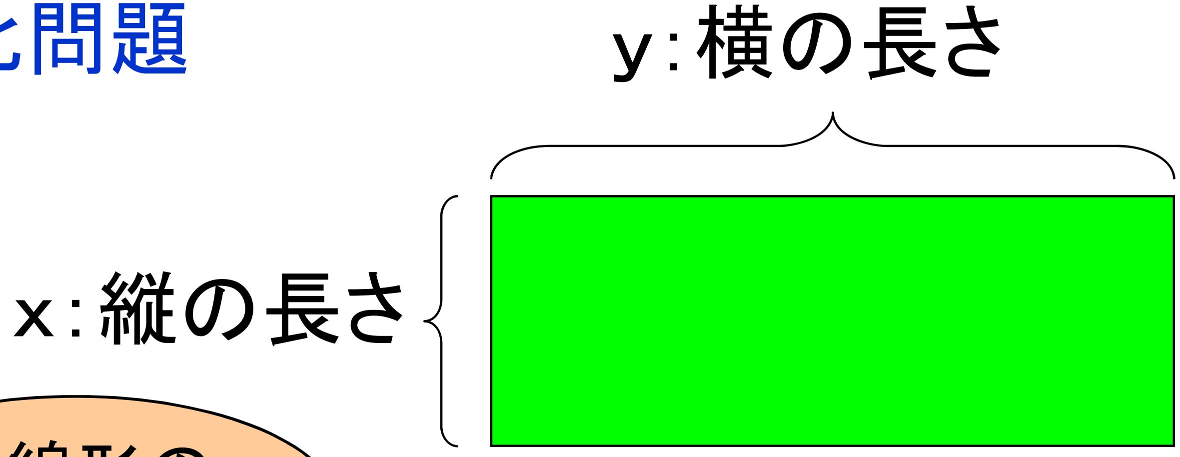
**例：長方形の外周最小化問題**

最小化　$2x + 2y$

条件　$x\,y \geqq 1$

$x, y \geqq 0$

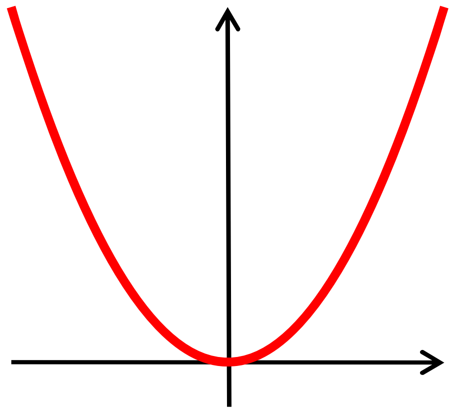
非線形の不等式




**注意:**線形計画問題は非線形計画問題の特殊ケース

# 非線形関数の例(その1)

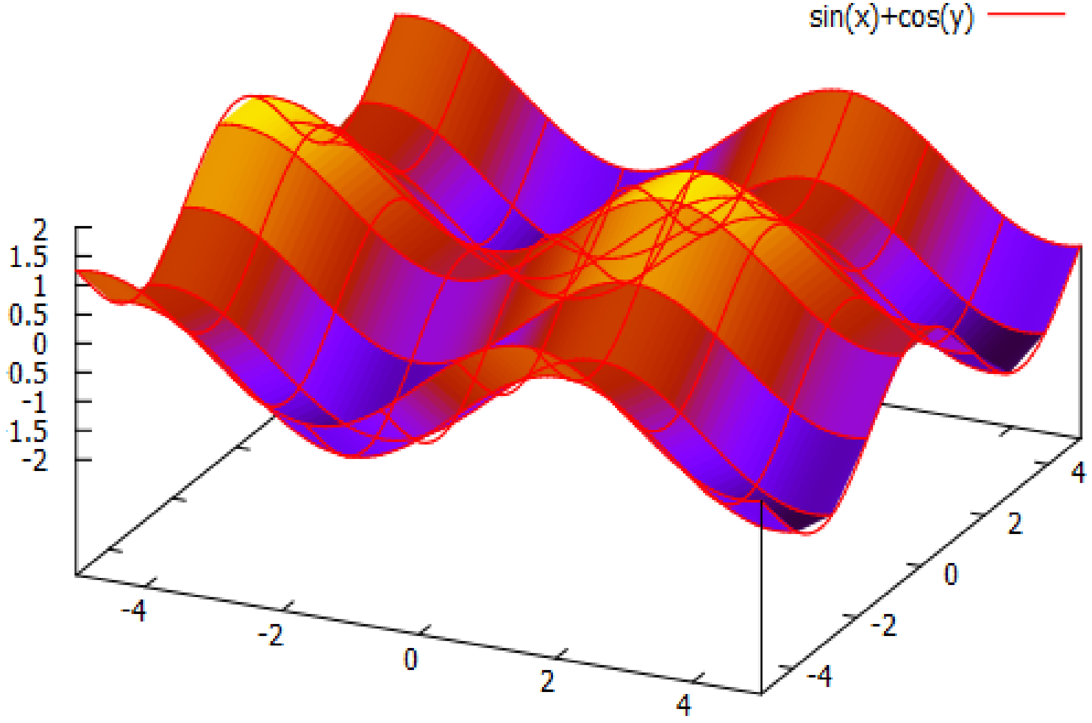
非線形関数 --- 線形でない関数



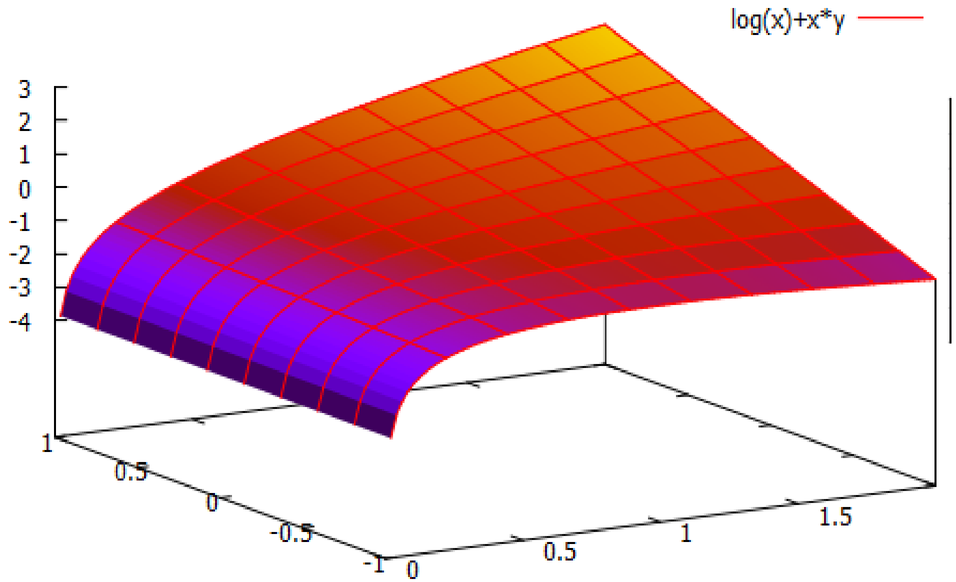
$$f_1(x) = x^2$$

微分可能な非線形関数の例

$$f_2(x_1, x_2) = \sin x_1 + \cos x_2$$



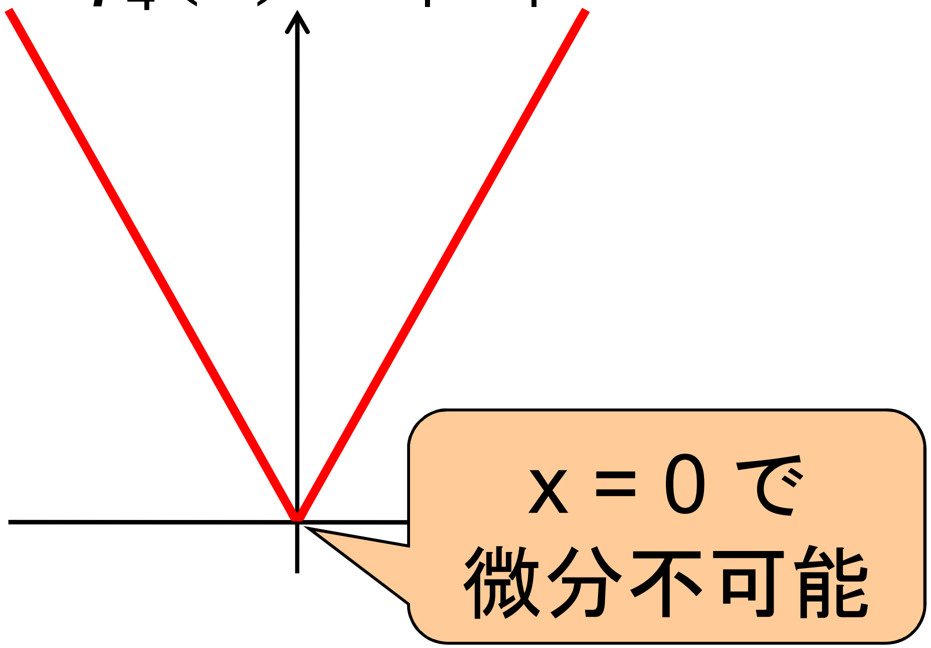

$$f_3(x_1, x_2) = x_1 x_2 + \log x_1$$



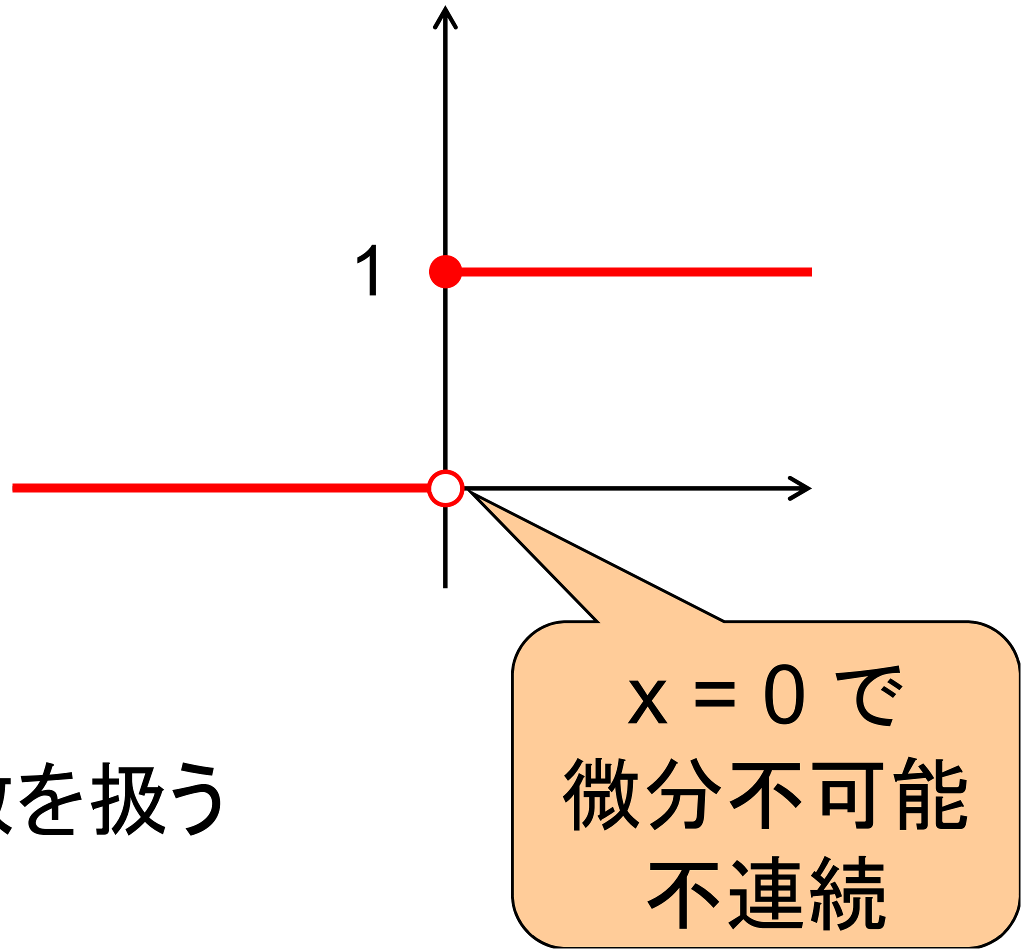
# 非線形関数の例(その2)

## 微分不可能な非線形関数の例

$$f_4(x) = |x|$$




$$f_5(x) = \begin{cases} 1 & (x \geq 0\text{のとき}) \\ 0 & (x < 0\text{のとき}) \end{cases}$$




この授業:

主に**何回でも微分可能**な関数を扱う

# 非線形計画問題の分類

## 制約なし最適化問題
## (unconstrained optimization problem)

**入力：** 目的関数 $f(x)$

**問題：** 最小化 $f(x)$ 条件 なし

## 制約つき最適化問題
## (constrained optimization problem)

**入力：** 目的関数 $f(x)$, 制約を表す関数 $g_i(x)$ $(i = 1, 2, \ldots, m)$

**問題：** 最小化 $f(x)$ 条件 $g_i(x) \leqq 0$ $(i = 1, 2, \ldots, m)$

この講義では、制約なし問題を主に扱う

# 非線形計画問題の分類

制約つき問題と制約なし問題の関係

- 制約つき問題は制約なし問題に変形できる

最小化　f(x)　条件　$g_i(x) \leqq 0$ (i = 1, 2, …, m)

→ 最小化　f(x) + h(x)　条件　なし

$$h(x) = \begin{cases} 0 & (g_i(\mathbf{x}) \le 0, i = 1,2,\ldots,m) \\ M & (\text{その他}) \end{cases}$$

$M$は十分に大きい正数

（注意）この制約なし問題を直接解くことは実用上難しい

- 制約なし問題を繰り返し解くことにより、制約つき問題を解くことが出来る

→ ペナルティ関数法、バリア関数法

# 勾配ベクトル

関数 $f$ の勾配ベクトル(gradient vector)

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

一変数関数の場合　$\nabla f(x) = f'(x)$

例:

$$f_1(x) = x^2 \Longrightarrow \nabla f_1(x) = 2x$$

$$f_2(x_1, x_2) = \sin x_1 + \cos x_2$$

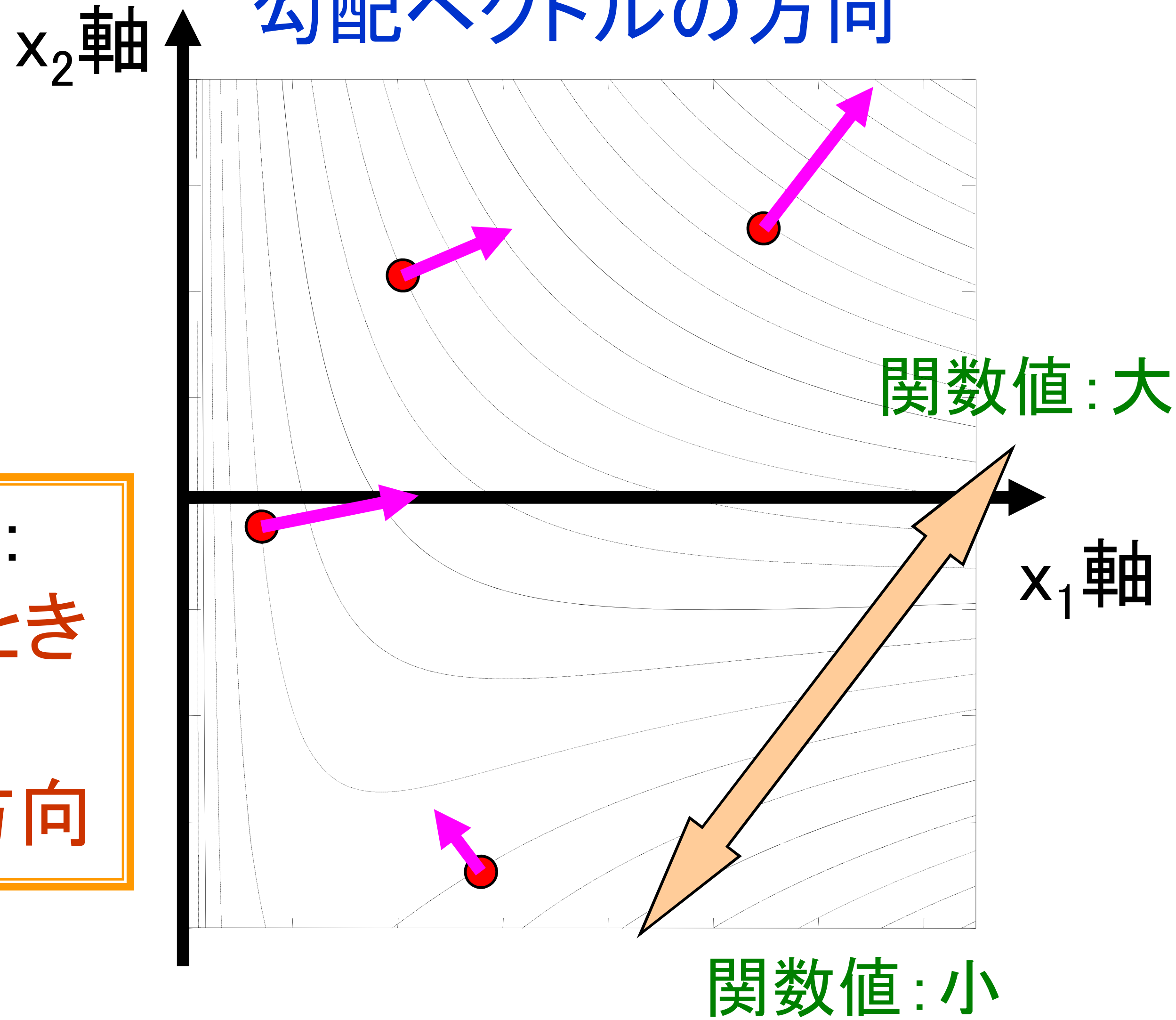
$$\Longrightarrow \nabla f_2(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \cos x_1 \\ -\sin x_2 \end{pmatrix}$$

# 勾配ベクトル(続き)

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

$$\nabla f_3(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} x_2 + 1/x_1 \\ x_1 \end{pmatrix}$$

関数$f_3$の等高線と
勾配ベクトルの方向




勾配ベクトルのイメージ:

- 関数という山を登るときに最も急な方向
- 関数値が増加する方向

# 一次のテイラー展開

任意の関数 $f$ はベクトル $a \in \mathbb{R}^n$ を使って次の形に表現できる

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

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)

関数 $f(x)$ の $x = a$ における
一次のテイラー展開

# 一次のテイラー展開

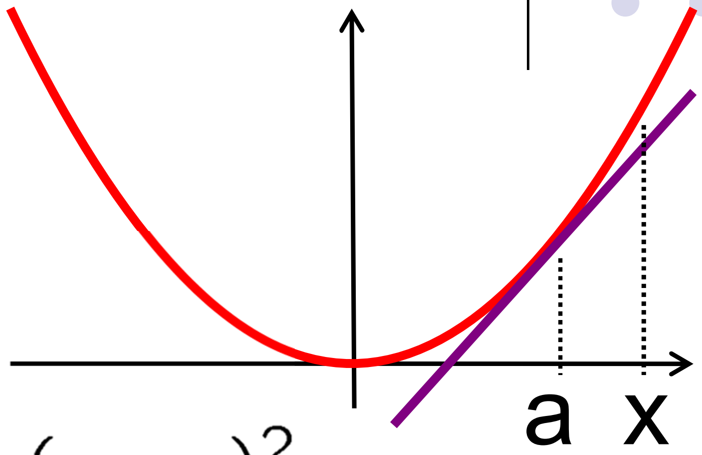
例１: $f_1(x) = x^2 \qquad f_1'(x) = 2x,$

$f_1$ の x=a における一次のテイラー展開

$$f(x) = a^2 + 2a(x-a) + \varphi(x-a)$$

ここで

$$\varphi(x-a) = f(x) - \{a^2 + 2a(x-a)\} = (x-a)^2$$




例2: $f_2(x) = \log x \qquad f_2'(x) = 1/x$

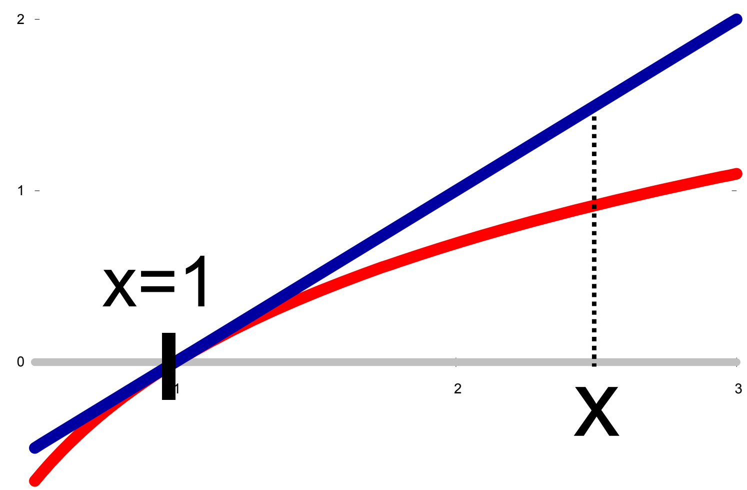
$f_2$ の x=1 における一次のテイラー展開

$$f_2(x) = 0 + \frac{1}{1}(x-1) + \varphi(x-1)$$

ここで

$$\varphi(x-1)$$

$$= -\frac{(x-1)^2}{2} + \frac{(x-1)^3}{3} - \frac{(x-1)^4}{4} + \cdots$$



# 一次のテイラー近似

関数$f(x)$の$x = a$における
一次のテイラー展開

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

$\varphi(x-a)$の値は他の項に比べて十分小さい（0に近い）
➔無視できる

$$\tilde{f}(x) = f(a) + \nabla f(a)^T(x-a)$$

関数$f(x)$の$x = a$における
一次のテイラー近似

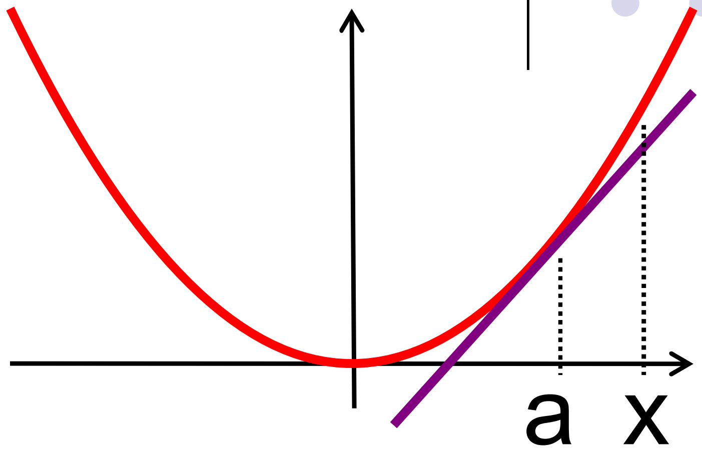
- 線形関数，傾き$= \nabla f(a)$
- $x \simeq a$のとき $\tilde{f}(x) \simeq f(x)$，
  とくに $\tilde{f}(a) = f(a)$

# 一次のテイラー近似

例1：$f_1(x) = x^2 \qquad f_1'(x) = 2x,$

$f_1$ の $x = a$ における一次のテイラー近似

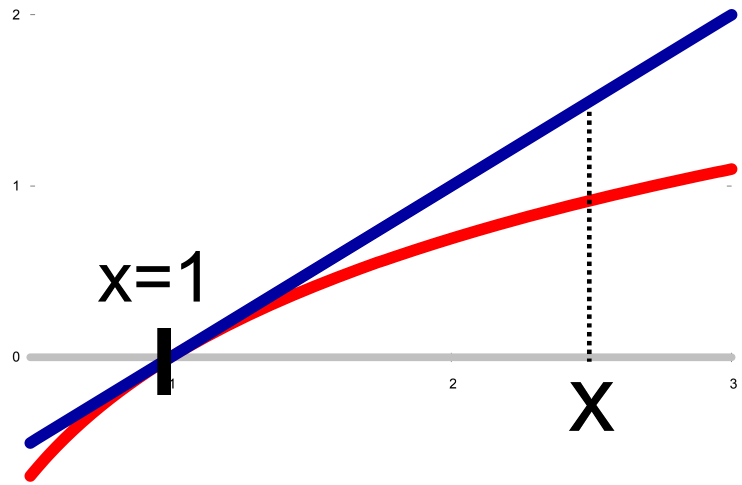
$$\widetilde{f}_1(x) = a^2 + 2a(x - a)$$




例2：$f_2(x) = \log x \qquad f_2'(x) = 1/x$

$f_2$ の $x = 1$ における一次のテイラー近似

$$\widetilde{f}_2(x) = x - 1$$



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

**証明のアイディア**: $d = -\delta \nabla f(y)$ とおく（$\delta$: 正の実数)

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

本当は，テイラー近似で省略した項
$\varphi(x-a)$の影響を考慮する必要有り

# 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（$\delta$: 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,

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

$\varphi$は2次以上の項からなる多項式関数

$\Rightarrow$ $\varphi(-\delta \nabla f(y))$ は $\delta$ 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 $\delta$ 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 $\delta$ 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

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

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

# 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、$\nabla f \neq 0$ ならば
十分小さい $\delta > 0$ に対して $f(\boldsymbol{x}+\delta\nabla f(\boldsymbol{x})) > f(\boldsymbol{x})$

証明は省略（直前の性質と同様に証明できる）

# 最適性条件

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(または十分条件)

定義: x は停留点 ⇔ $\nabla f(x) = 0$

> 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

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 $\delta > 0$に対して

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

$x^*$ が最適解であることに矛盾　$\therefore \nabla f(x^*) = 0$

# 最適性条件

**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 ⇒ $\nabla f(x^*) = 0$

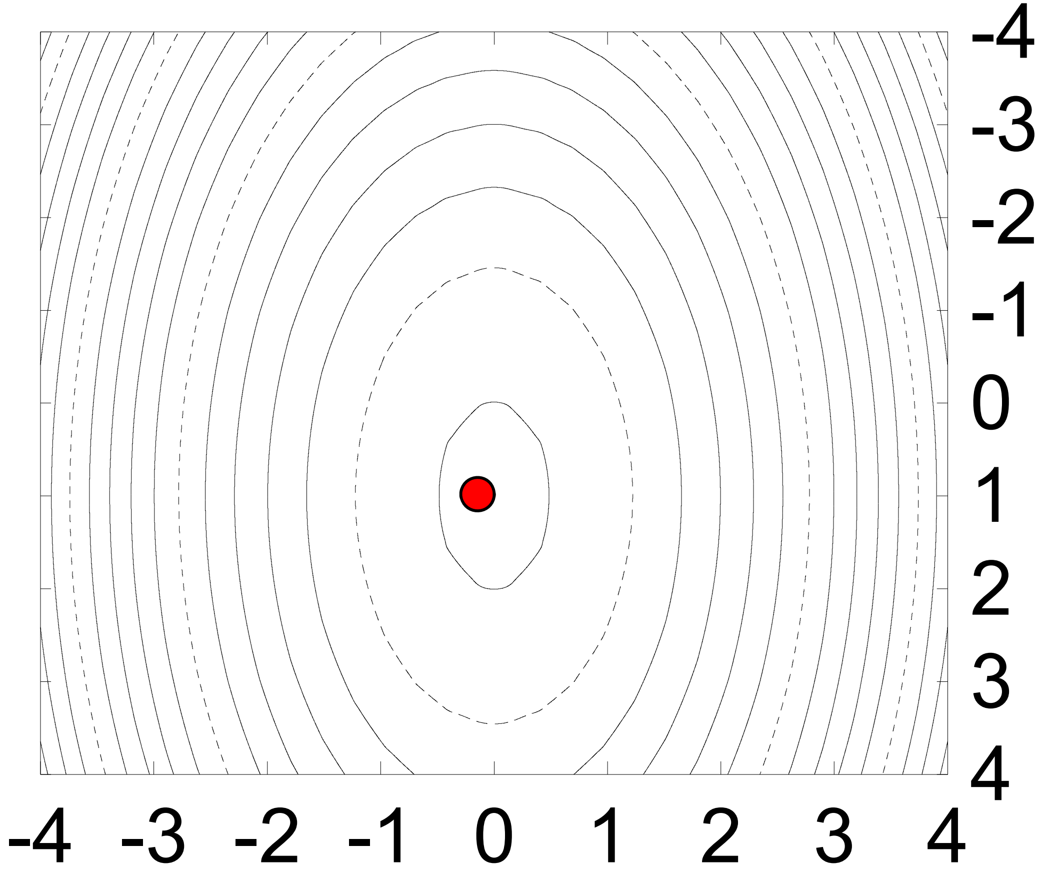
例: $f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 - 2x_1 + 4x_2^2$

$= (x_1 - 1)^2 + 4x_2^2 - 1$

$(x_1, x_2) = (1,0)$ 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

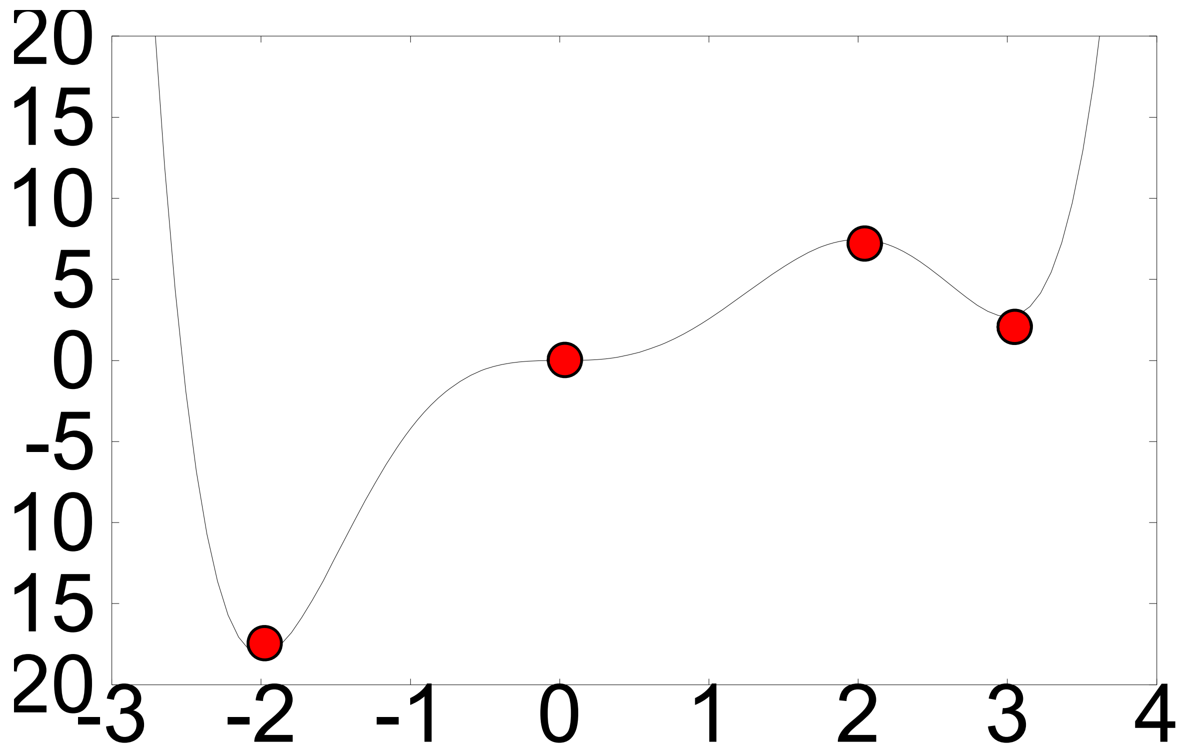
※「x*は停留点 ⇒ x*は最適解」は必ずしも成り立たない

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

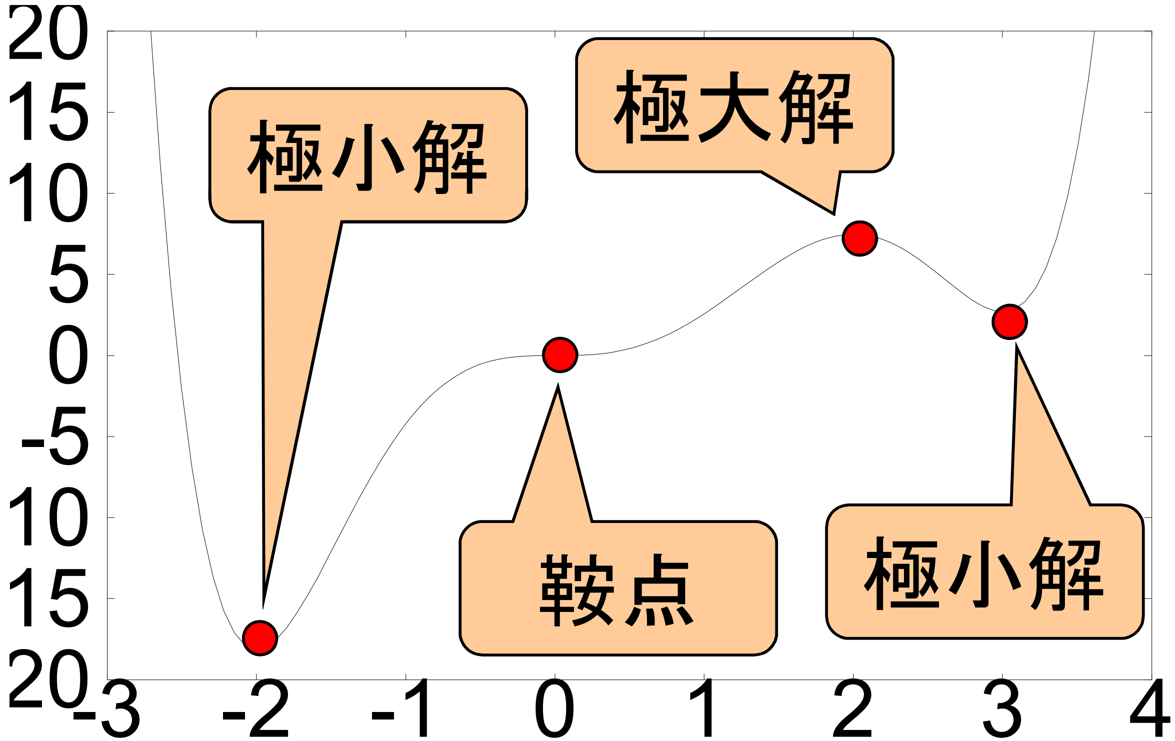
## 停留点 x* の分類

極小解: x* の付近だけに注目したとき、x* は最小

> あるδ＞0 が存在して、‖x − x*‖ ≦ δを満たす
> すべての x に対して f(x) ≧ 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

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

⇒　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　$\alpha > 0$

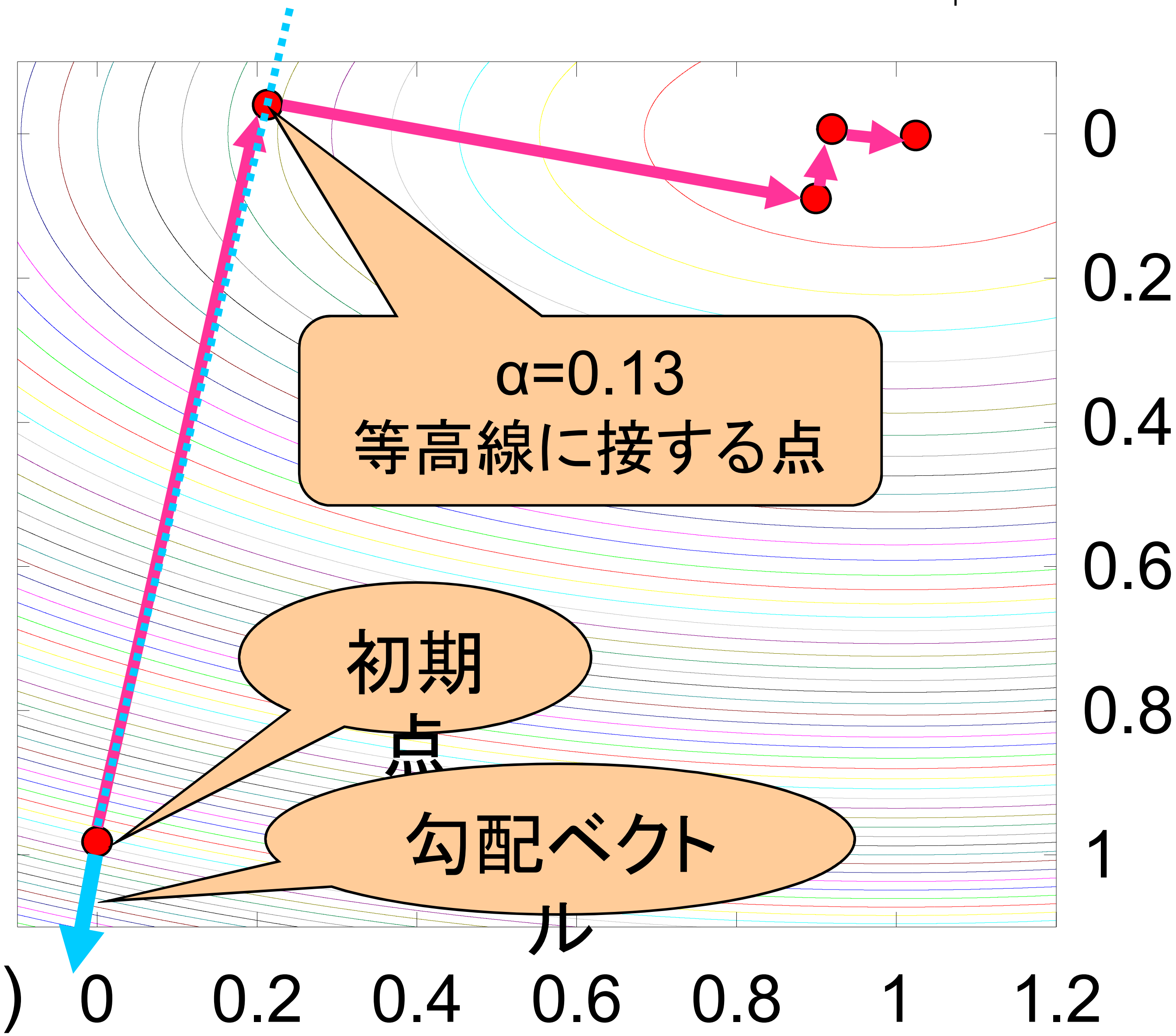
直線探索と呼ばれる

# 最急降下法の実行例

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

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

- $(x_1,x_2) = (0,1)$ 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

入力：関数 $f$ とその勾配ベクトル $\nabla f$

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

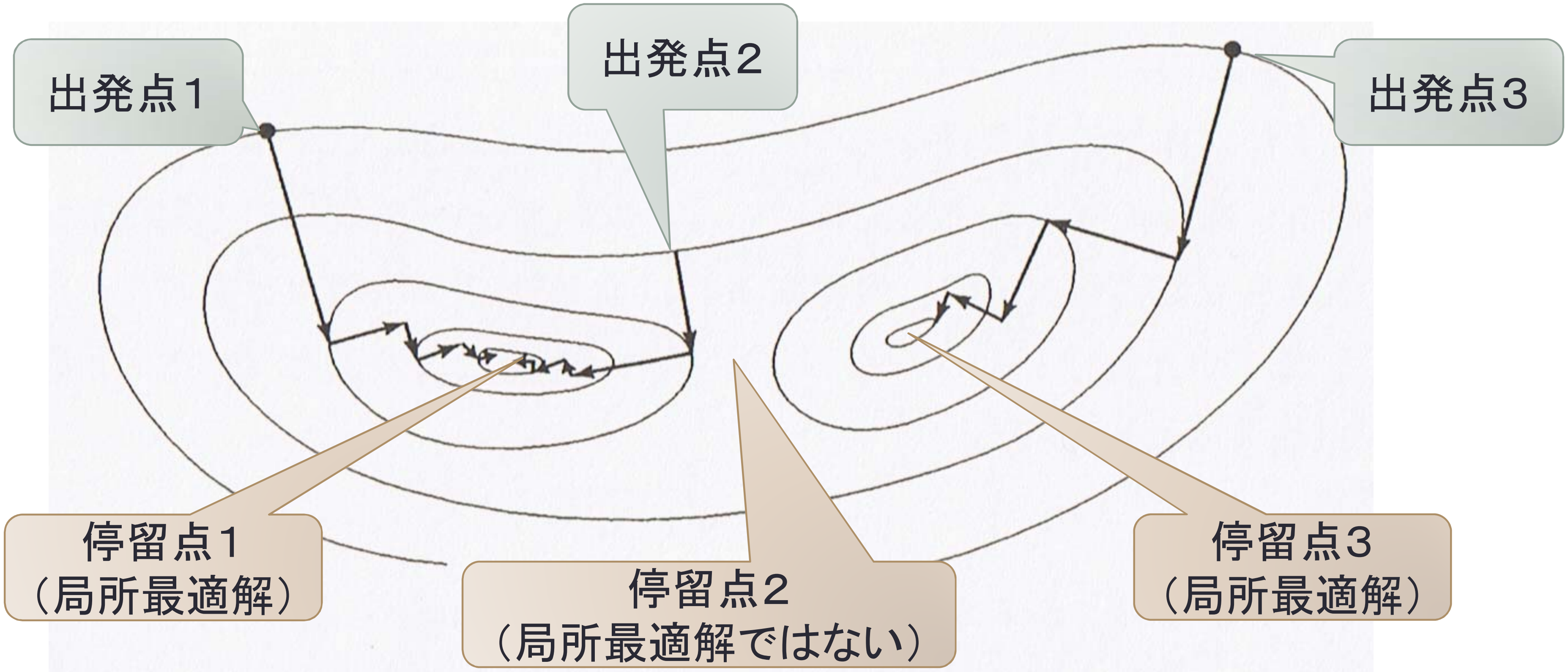
最小化　$f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))$　条件　$\alpha > 0$

を解き、解を $\alpha^k$ 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

# 最急降下法の実行例その2




- 最急降下法は，必ず停留点（$\nabla f(x) = 0$となる点）に収束（大域的収束性）
  - 出発点の選び方次第では，局所的最適解に収束
  - 凸関数の場合，必ず大域的最適解に収束

# 演習問題

**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

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

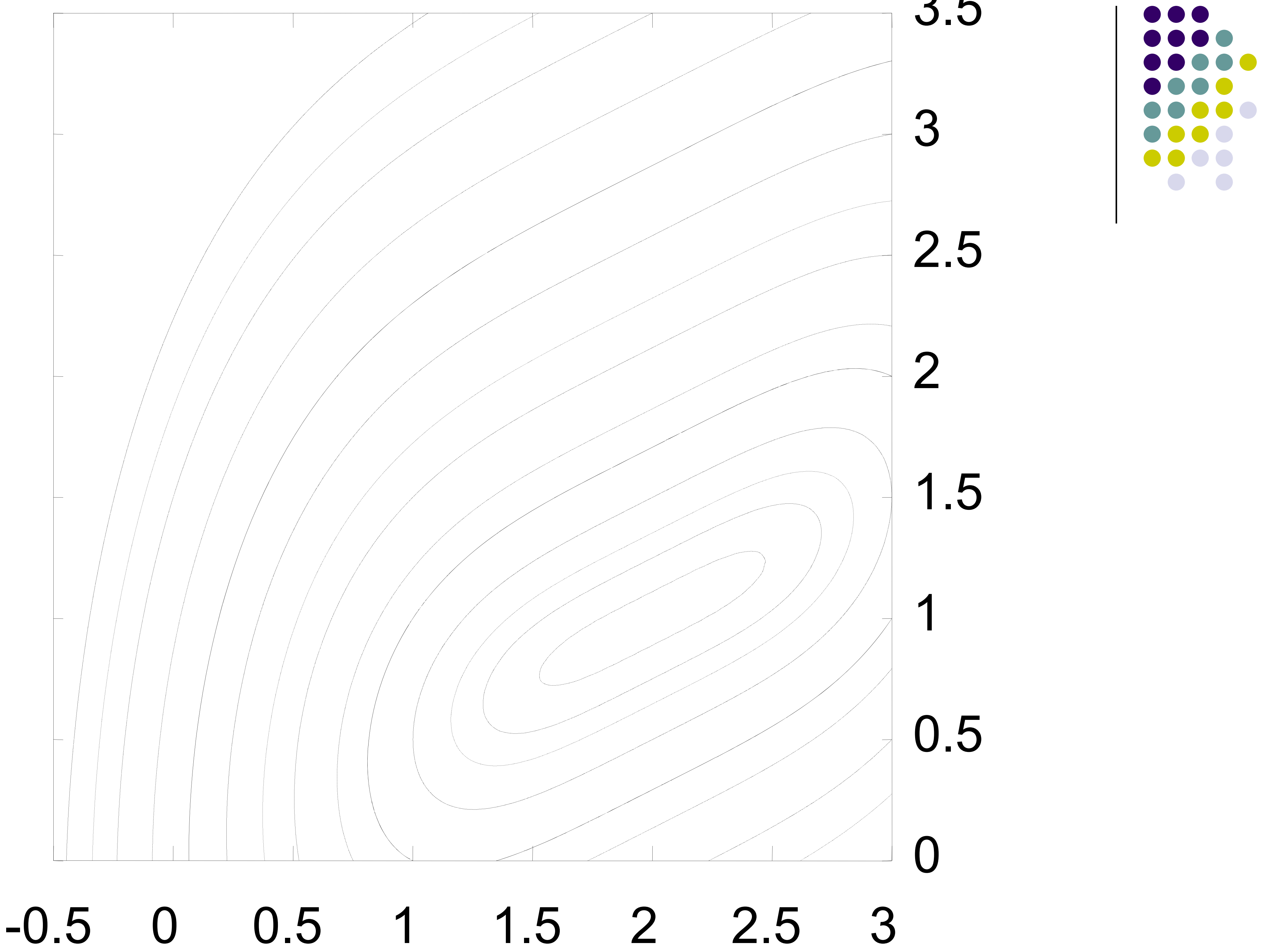
$$f_3(x_1, x_2) = x_1 \log x_2 - x_2 \log x_1$$

$$f_4(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{V}\boldsymbol{x} \quad (\text{ただし，}\boldsymbol{x}\text{は}n\text{次元ベクトル，}\boldsymbol{V}\text{は}n\times n\text{対称行列})$$

**問題2**: 3つの関数 $f_1(x_1, x_2)$, $f_2(x_1, x_2)$, $f_3(x_1, x_2)$ に対して，$(a_1,a_2)$ における一次のテイラー近似を求めなさい.

**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.（具体的な数値は計算しなくてもよい）

ポイント: 点の動きを表す折れ線の角度は必ず90度



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