オペレーションズ・リサーチ基礎

非線形計画：一次の最適性条件と最急降下法

塩浦昭義
東京工業大学 経営工学系
shioura.a.aa@m.titech.ac.jp

非線形計画問題とは？

目的関数や制約条件が必ずしも線形でない数理最適化問題

例1 : 長方形の外周最小化問題

最小化 $2x + 2y$

条件 $x\,y \geqq 1$

$x, y \geqq 0$

非線形の制約条件

例2 : 線形制約つき関数最大化問題

最大化 $-3x^2 + 5y^3 + 2xy^2 - 4y$

条件 $3x + 5\,y \leq 12$

$7x + 2y \leq 8$

$x, y \geqq 0$

非線形の目的関数

制約なし問題 (unconstrained problem)

最小化 $f(x)$ 条件 なし

制約つき問題 (constrained problem)

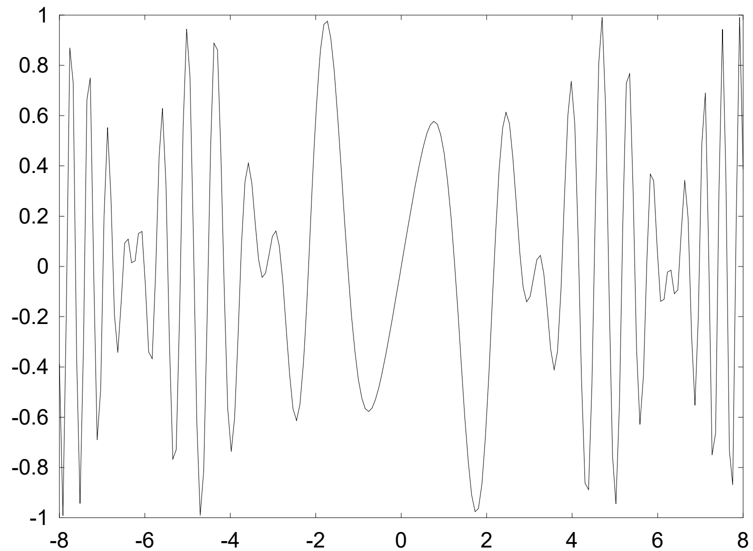
最小化 $f(x)$ 条件 $g_i(x) \leqq 0\ (i = 1, 2, \ldots, m)$

この講義では、制約なし問題を主に扱う

非線形計画問題の難しさ

- 非線形計画問題では，最適解を正確に求めることは困難

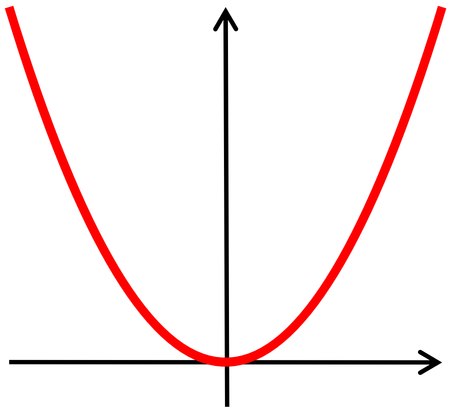
例:　$f(x) = x^4 - 4x^2$
最小解はx は 0, $\pm\sqrt{2}$
無理数をコンピュータで正確に
表現することは不可能



- 一般の場合：最適解は諦める
  最適解に何らかの意味で「近い」解
  もしくは　良さそうな解　を求める

- 良い構造をもった問題の場合：
  最適解もしくは最適解と距離の近い解を求める

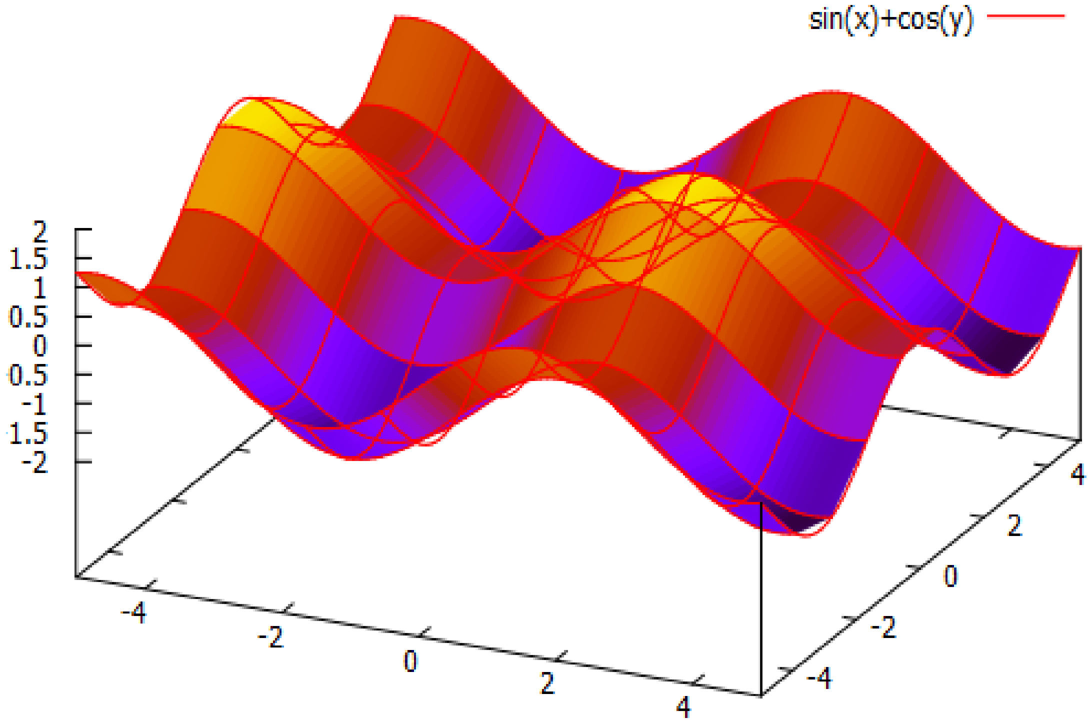
非線形関数の例(その1)



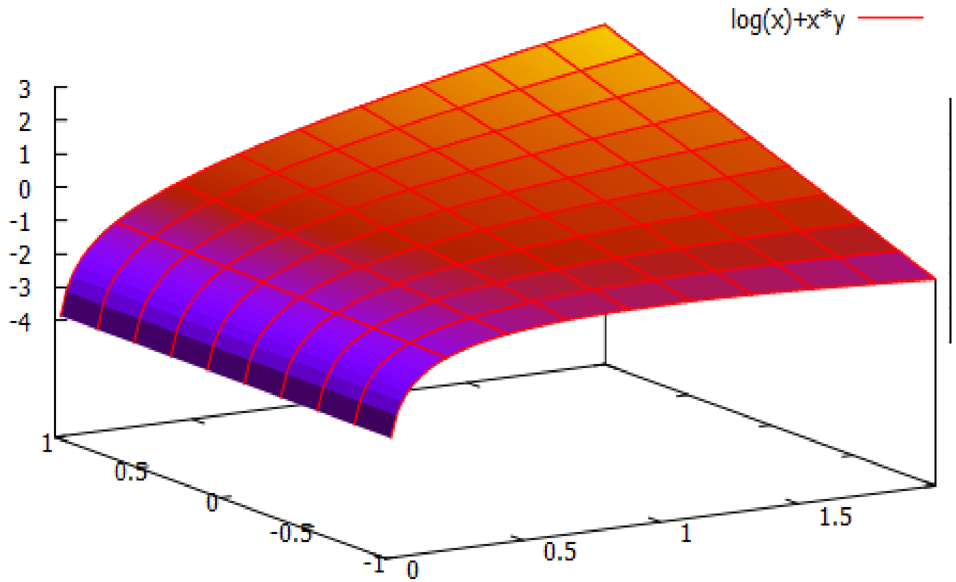
非線形関数 --- 線形でない関数

微分可能な非線形関数の例

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



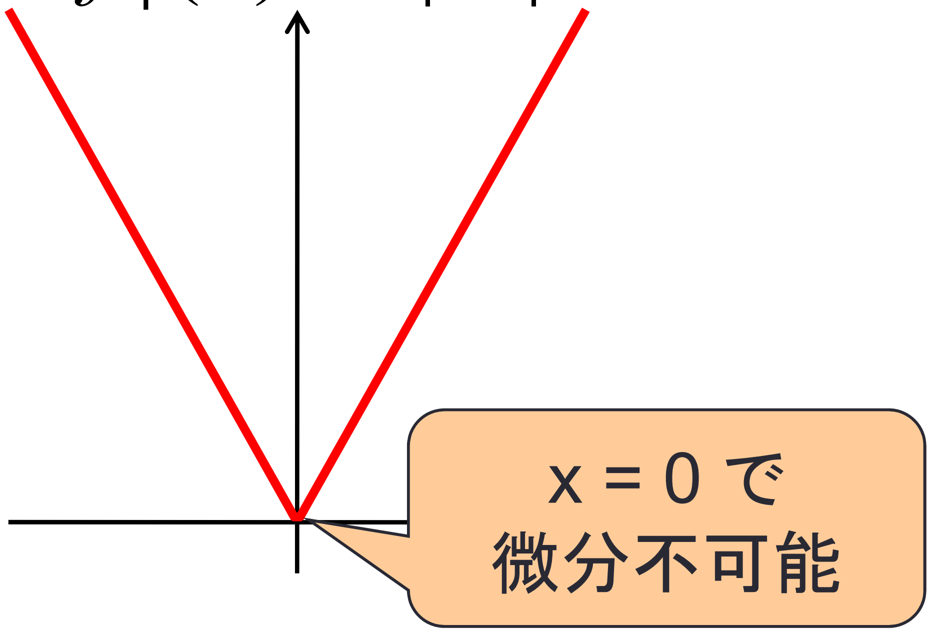
$$f_3(x_1, x_2) = x_1 x_2 + \log x_1$$



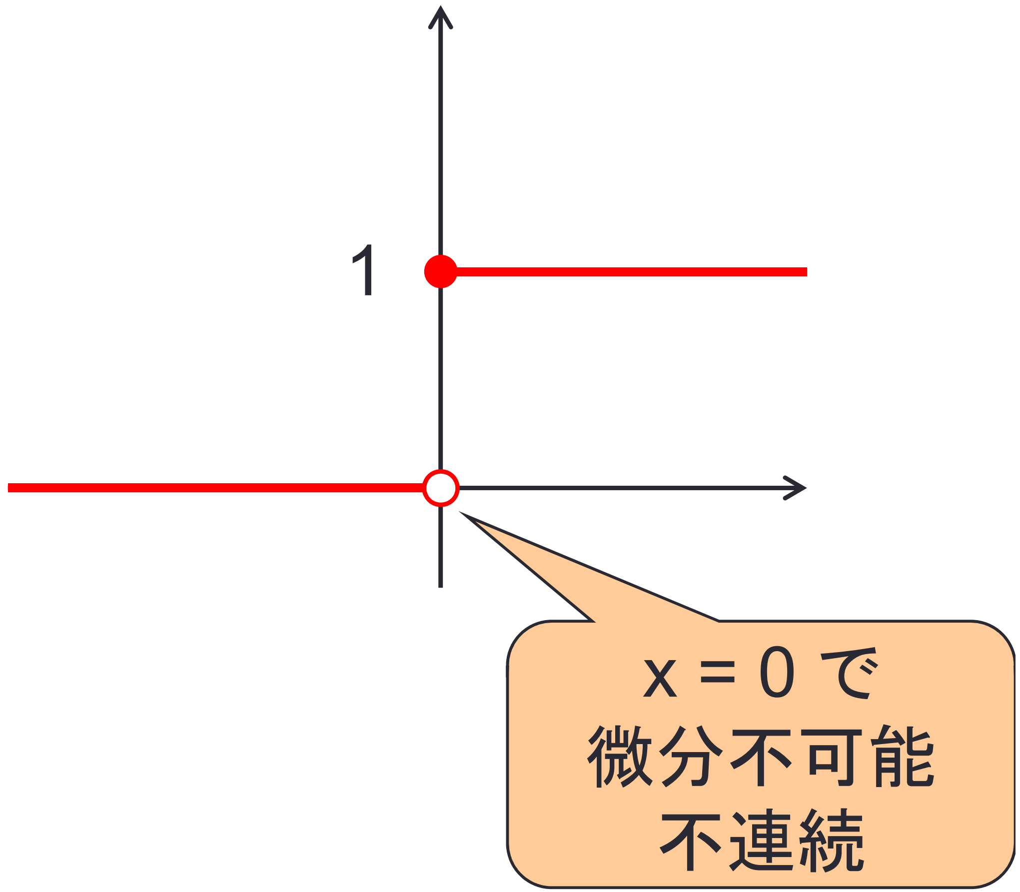
非線形関数の例(その2)

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2回微分可能な関数を扱う

制約つき問題の制約なし問題への帰着

制約つき問題 $\boxed{\text{最小化}\ \ f(x) \quad \text{条件}\ \ g_i(x) \leqq 0\ (i = 1, 2, \ldots, m)}$

➔ 制約なし問題 $\boxed{\text{最小化}\ \ f(x) + h(x) \quad \text{条件}\ \ \text{なし}}$

$$h(x) = \begin{cases} 0 & (x\text{が元の制約を満たすとき}) \\ M(\text{十分大きい数}) & (\text{それ以外のとき}) \end{cases}$$

- 関数hは微分不可能
  ➔この制約なし問題を直接解くことは実用上難しい
- 関数hを滑らかな関数で近似➔解きやすい制約なし問題
  これを繰り返し解いて，制約つき問題の（近似）最適解を求める
  ➔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：

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

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

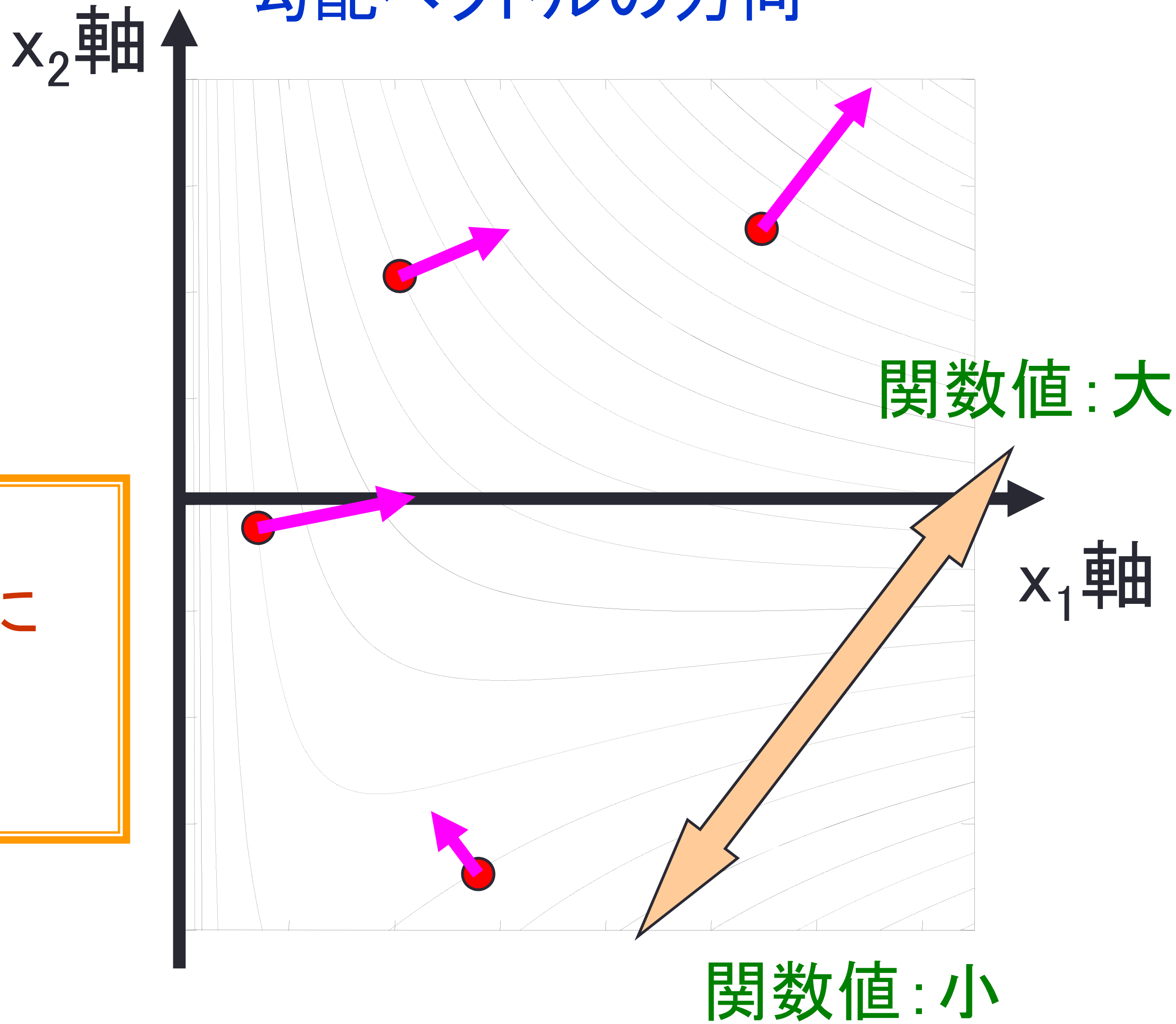
$$\Rightarrow \nabla f_2(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \cos x_1 \\ -\sin x_2 \end{pmatrix}$$

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$f(x)$の$x = a$における
一次のテイラー展開

$\varphi(d)$ は $d = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ に関する
2次以上の項からなる n 変数多項式
（定数項，１次の項は存在しない）
➔任意のベクトル d に対して

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\varphi(\varepsilon d)}{\varepsilon} = 0$$

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

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

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

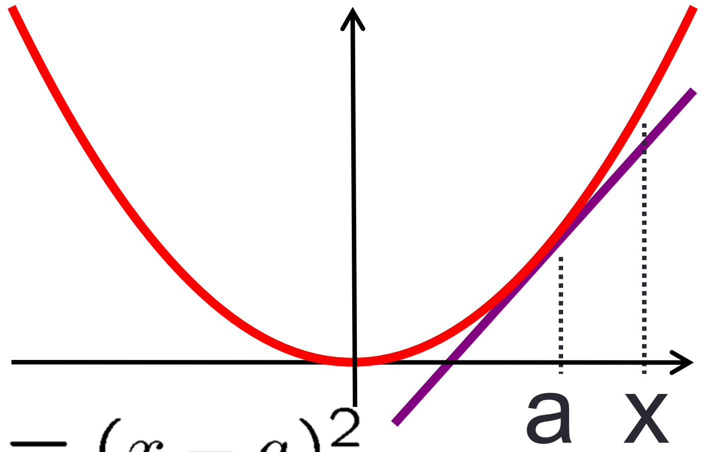
$$\tilde{f}(x) = f(a) + \nabla f(a)^T (x-a)$$

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 $\tilde{f}(a) = f(a)$

テイラー展開とテイラー近似の例

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



x=aでのテイラー展開

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

ここで

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

テイラー近似 $\widetilde{f}_1(x) = a^2 + 2a(x-a)$

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

x=1でのテイラー展開

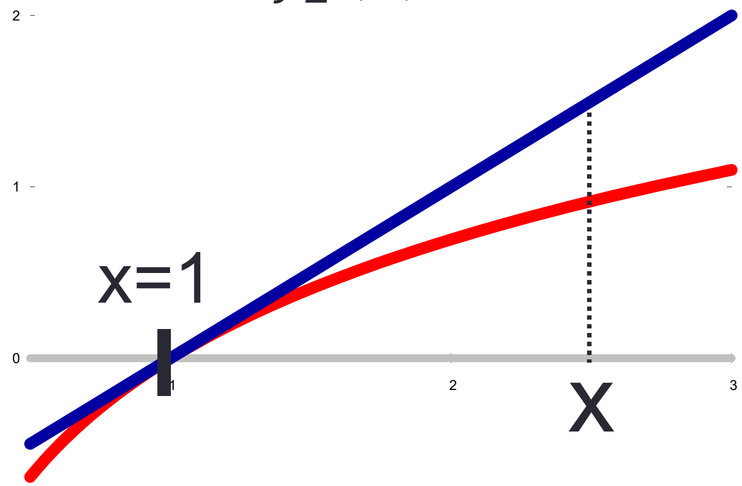
テイラー近似 $\widetilde{f}_2(x) = x - 1$

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

ここで

$$\varphi(x-1)$$

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



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

命題: 任意の$y \in \mathbb{R}^n$に対し, $\nabla f(y) \neq 0$ならば,
十分小さい$\delta > 0$に対し, $f\big(y - \delta \nabla f(y)\big) < f(y)$成立

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

一次のテイラー展開において x = y + d, a = y とおくと,

$$f(y+d) = f(y) + \nabla f(y)^T d + \varphi(d)$$
$$= f(y) - \delta \big|\big|\nabla f(y)\big|\big|^2 + \varphi\big(-\delta \nabla f(y)\big)$$
$$= f(y) - \delta \left(\big|\big|\nabla f(y)\big|\big|^2 - \frac{\varphi\big(-\delta \nabla f(y)\big)}{\delta} \right) \quad (1)$$

$\nabla f(y) \neq 0$ なので $||\nabla f(y)||^2 > 0$ である.

また, 任意のベクトル d に対して $\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\varphi(\varepsilon d)}{\varepsilon} = 0$ なので,

十分小さい $\delta > 0$ に対し, $\frac{\varphi\big(-\delta \nabla f(y)\big)}{\delta} < ||\nabla f(y)||^2$ (2)

式 (1), (2) より $f\big(y - \delta \nabla f(y)\big) = f(y+d) < f(y)$

勾配ベクトルの性質

勾配ベクトルの方向に進むと関数値が増える

命題: 任意の$y \in \mathbb{R}^n$に対し, $\nabla f(y) \neq 0$ならば,
十分小さい$\delta > 0$に対し, $f\bigl(y + \delta \nabla f(y)\bigr) > f(y)$成立

証明は省略（直前の命題と同様に証明できる）

最適性条件

非線形計画問題の最適性条件：
ベクトル x が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（制約なし問題の最適性条件）:

x*: 制約なし問題の最適解　⇒　∇f(x*) = 0

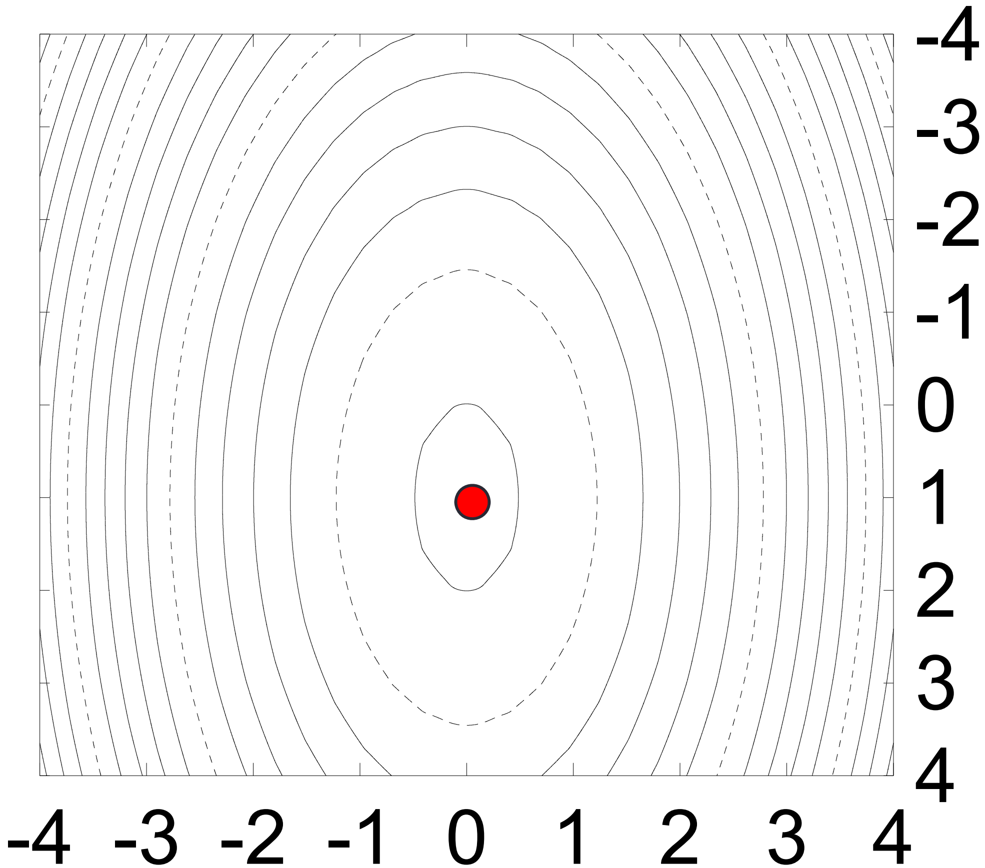
例: $f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 - 2x_1 + 4x_2^2$

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

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

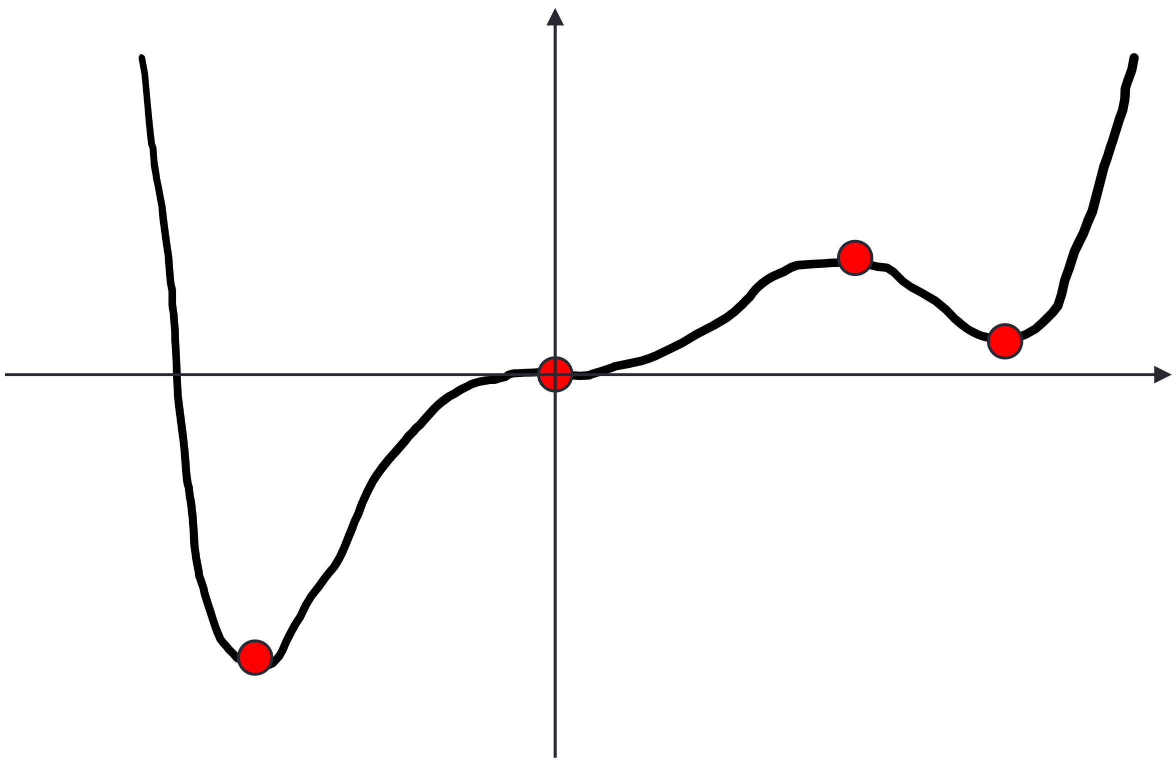
※「x*は停留点 ⇒ x*は最適解」は必ずしも成り立たない

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

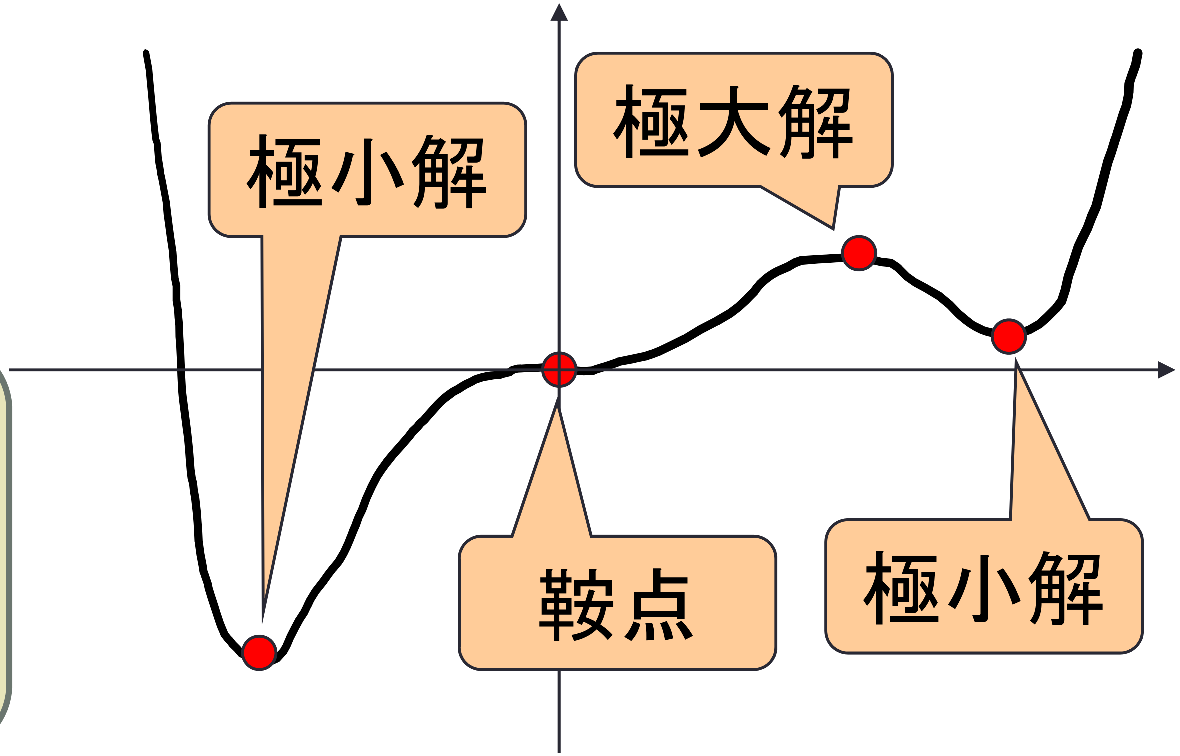
極小解: x* の付近だけに注目したとき、x* は最小

> ある $\delta > 0$ 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

最小化問題において，
最適解を**大域的最適解**，
極小解を**局所的最適解**
と呼ぶ



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　$\alpha > 0$

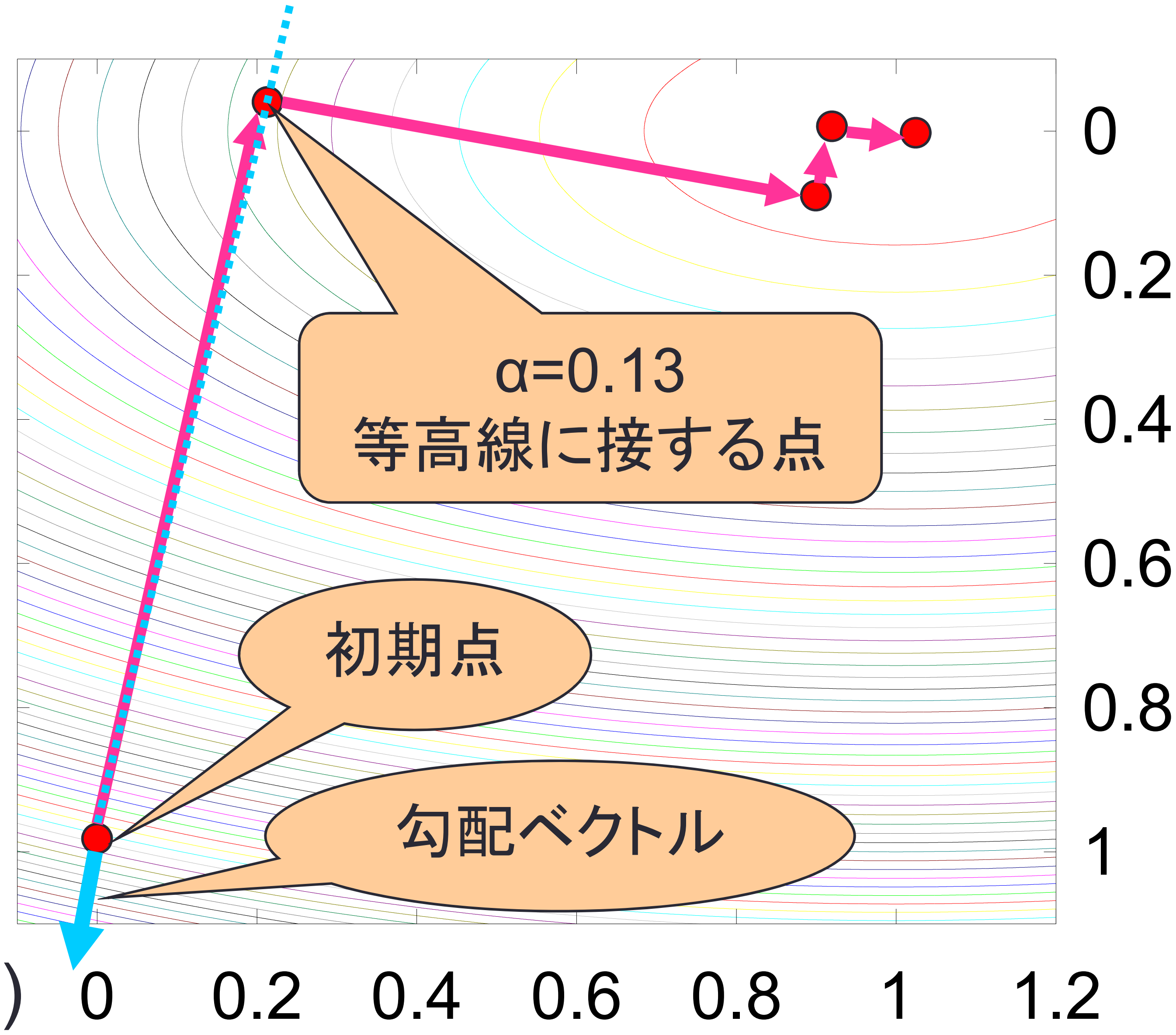
直線探索と呼ばれる

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 $(x_1,x_2) = (0.26,- 0.04)$



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

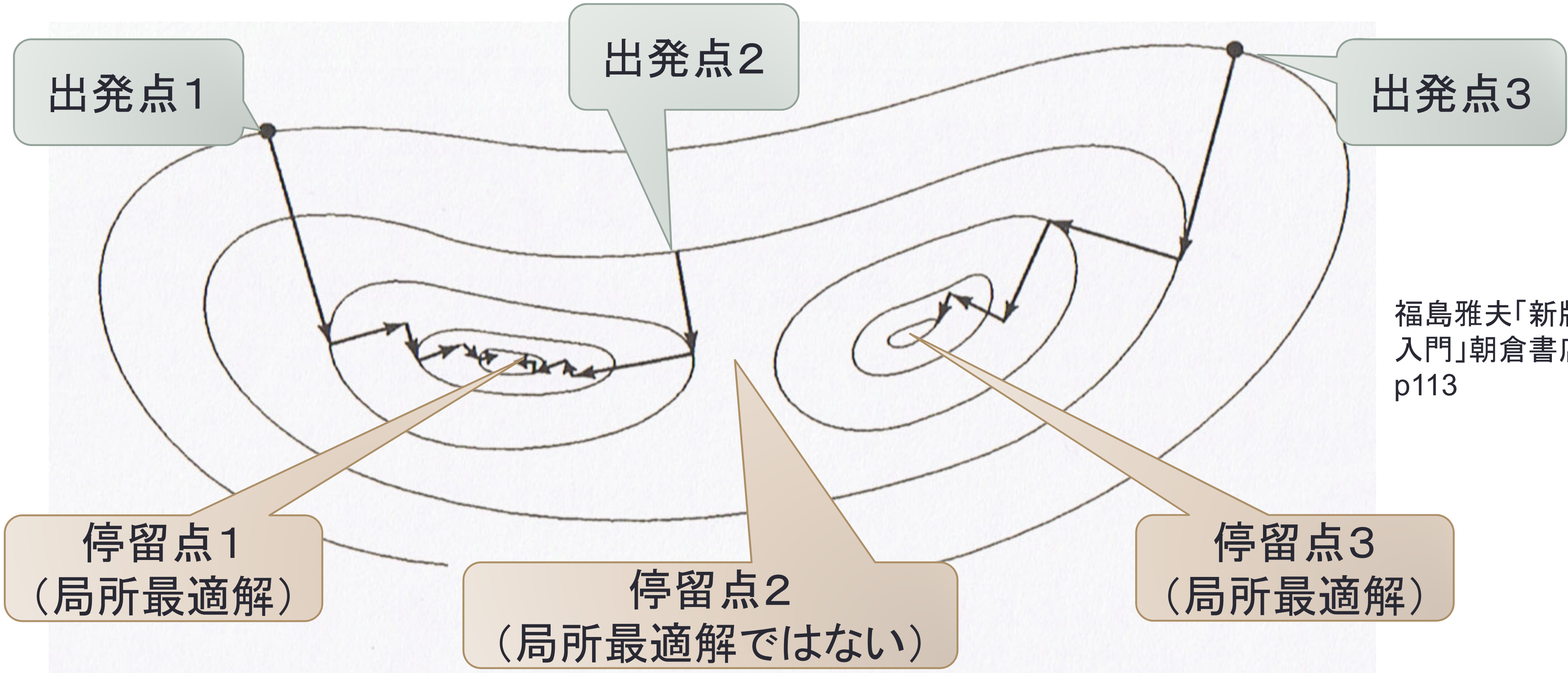
最小化　$f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))$ 条件　$\alpha > 0$

を解き、解をα^kとする

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



福島雅夫「新版 数理計画入門」朝倉書店，2011. p113

- 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
  - 凸関数に対しては，必ず大域的最適解に収束

最適解の判定

- 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

- 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

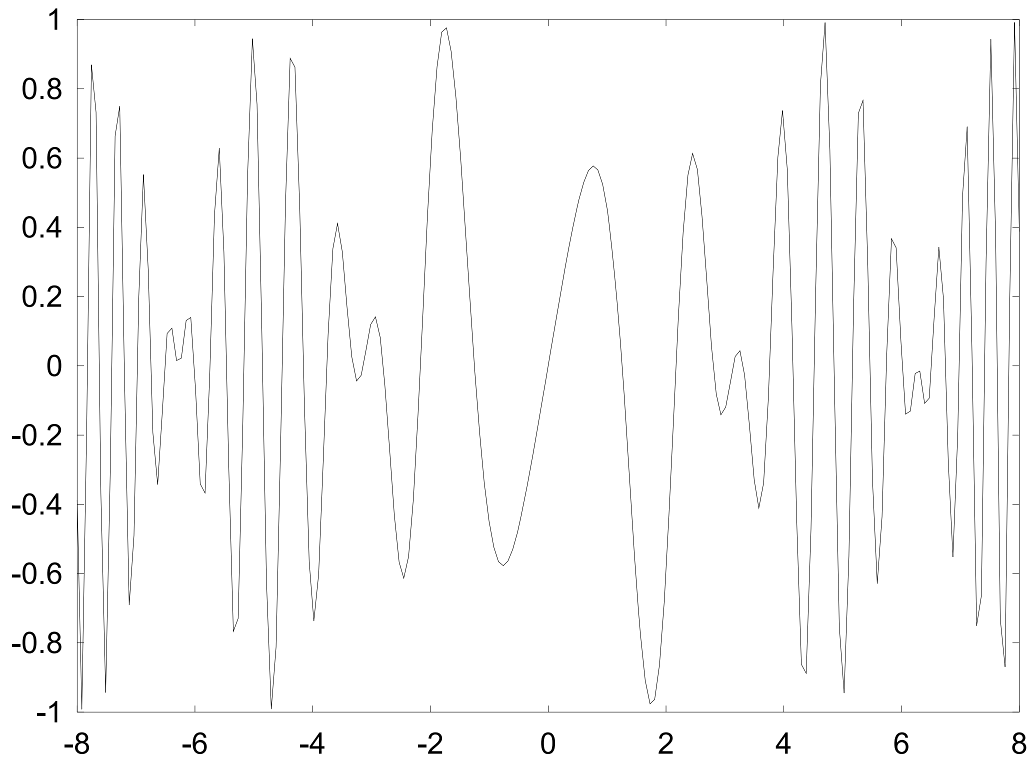
（方法2）最適解の近くでは x^k があまり変化しない

⇒ $||x^{k+1} - x^k||$ の値が十分小さくなったら終了

最適解の判定（つづき）

- 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

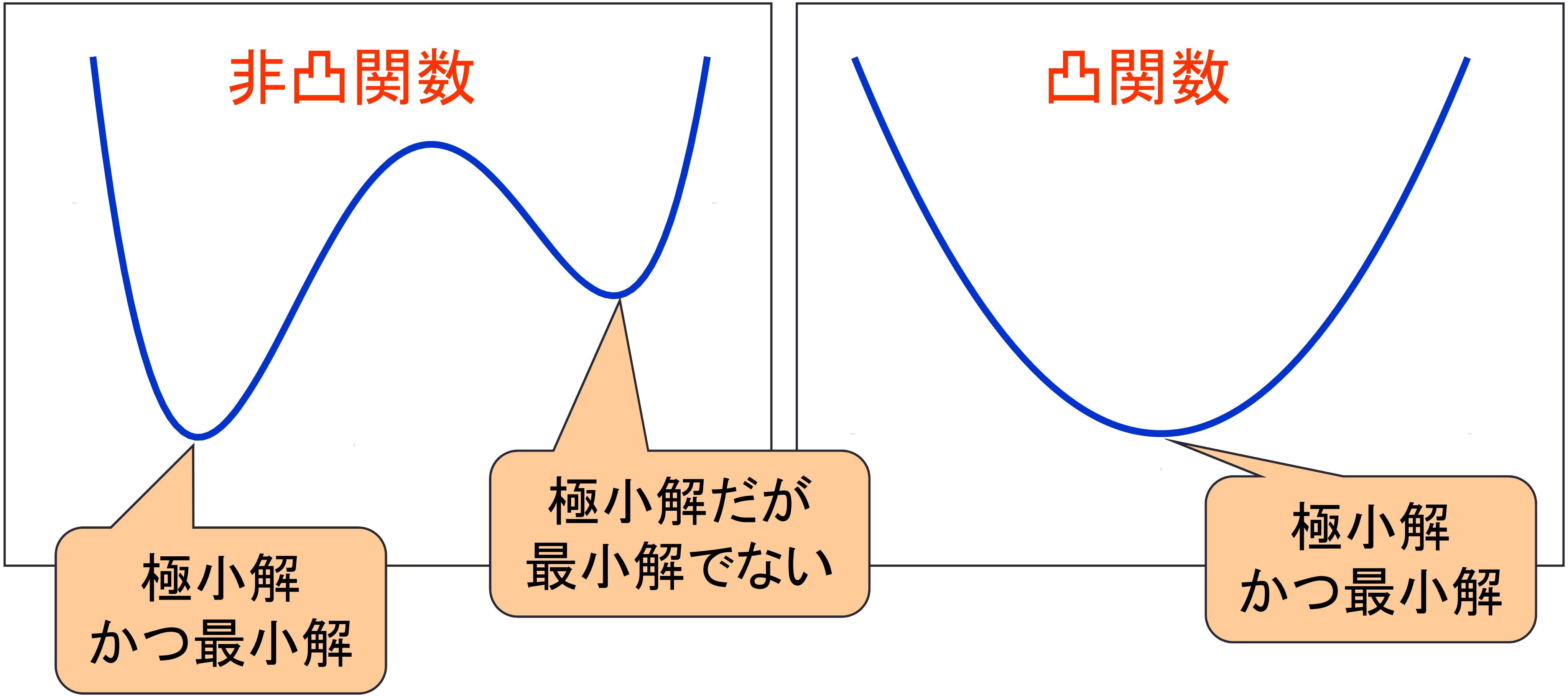


- 極小解は良い解であることが多い
- 凸関数では
  極小解⇔最小解

定理：ある仮定の下で，最急降下法の求める点列は
停留点に収束する

凸関数

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

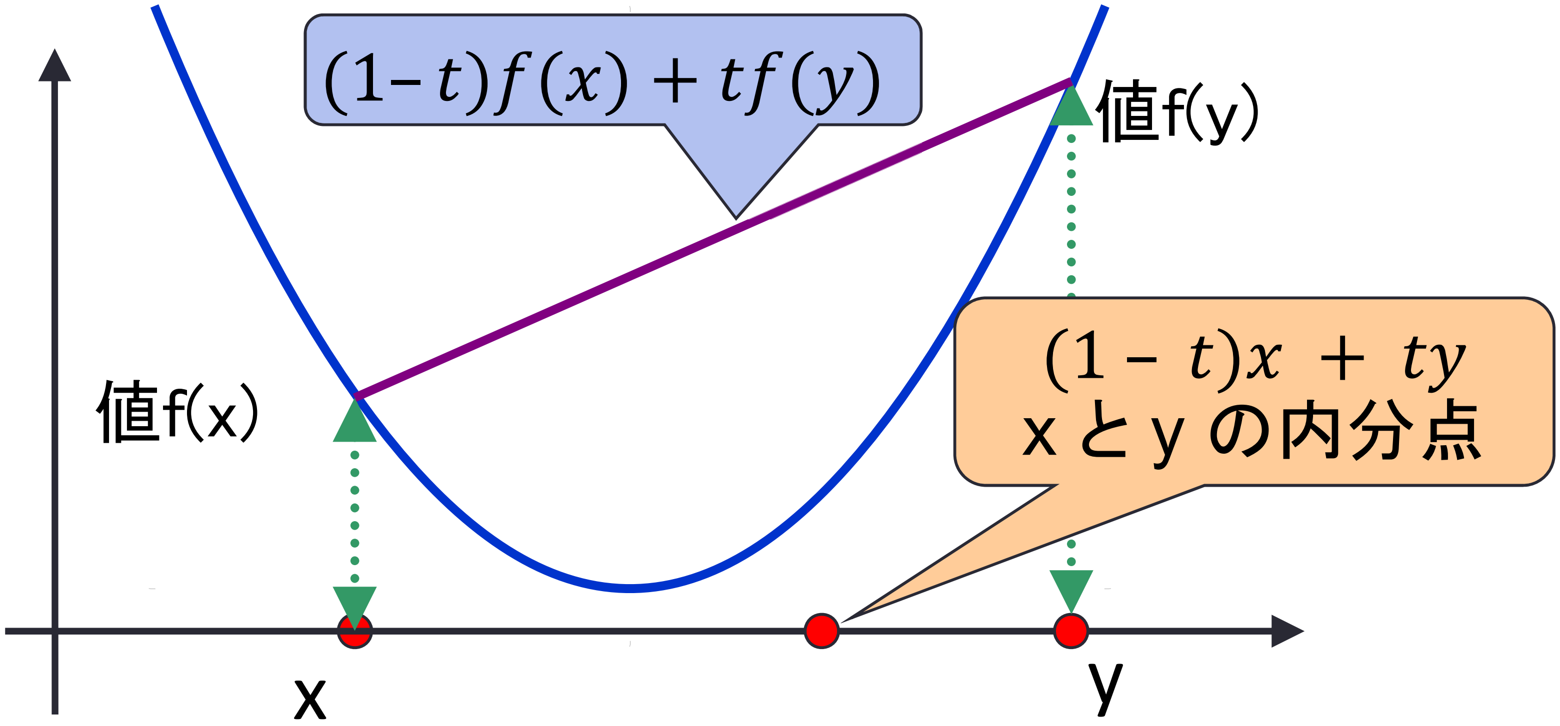
極小解が一つ
➔最小化しやすい

凸関数の定義

定義 : 関数 f は凸関数

⇔　任意の異なるベクトル x, y および任意の $0 < t < 1$ に対し

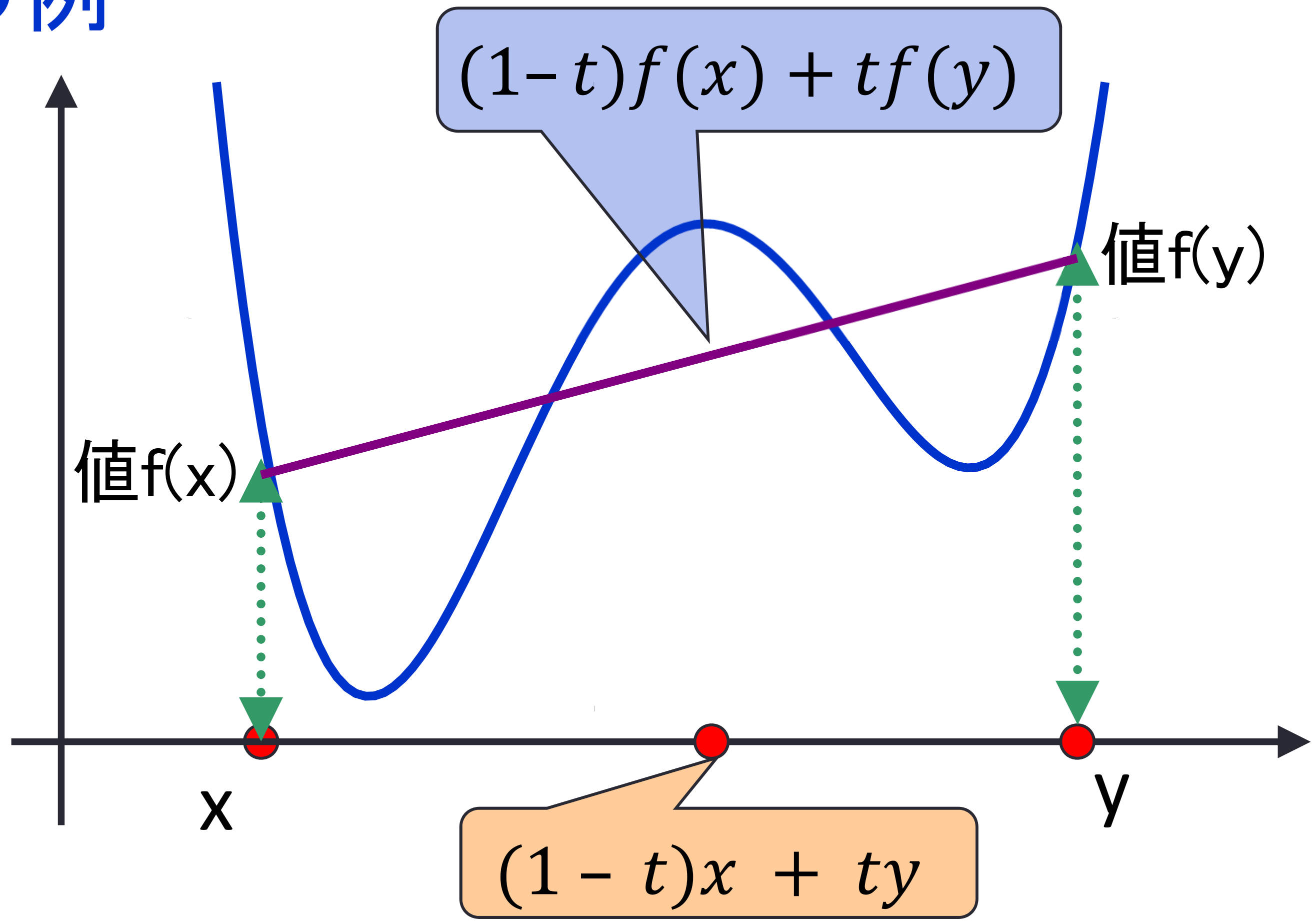
$$(1-t)f(x) + t\,f(y) \geq f((1-t)\,x + t\,y)$$

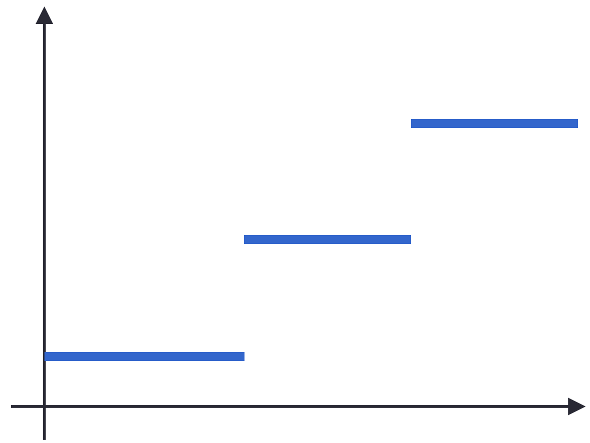


凸関数の定義(続き)

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

非凸関数の例





2次の凸関数

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

- 1変数の2次関数 $f(x) = ax^2 + bx + c\ (a > 0)$ は凸関数

（証明）任意の異なる x, y と $0 < t < 1$ に対して、

$$
\begin{aligned}
&(1-\mathrm{t})f(x) + tf(y) - f((1-t)x + ty) \\
&= (1-t)\,ax^2 + t\,a\,y^2 - a\,[(1-t)x + t\,y]^2 \\
&= (1-t)\,ax^2 + t\,a\,y^2 - a\,(1-t)^2\,x^2 - a\,t^2\,y^2 - 2a\,(1-t)\,t\,x\,y \\
&= (t-t^2)\,ax^2 + (t-t^2)\,a\,y^2 - 2a\,(t-t^2)\,x\,y \\
&= (t-t^2)\,a\,(x-y)^2 \\
&> 0 \qquad (0 < t < 1, x \neq y \text{より})
\end{aligned}
$$

2次の凸関数(続き)

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

より一般に,

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

(V: n ×n 行列, c: n次元ベクトル, c_0: 定数)

は V が**半正定値**行列 ➔ 凸関数

例:

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

1次関数は凸関数

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

- （n変数の）1次関数 $f(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i x_i + c$ は凸関数

とくに $(1-t)f(x) + t f(y) = f((1-t)x + t y)$ をみたす

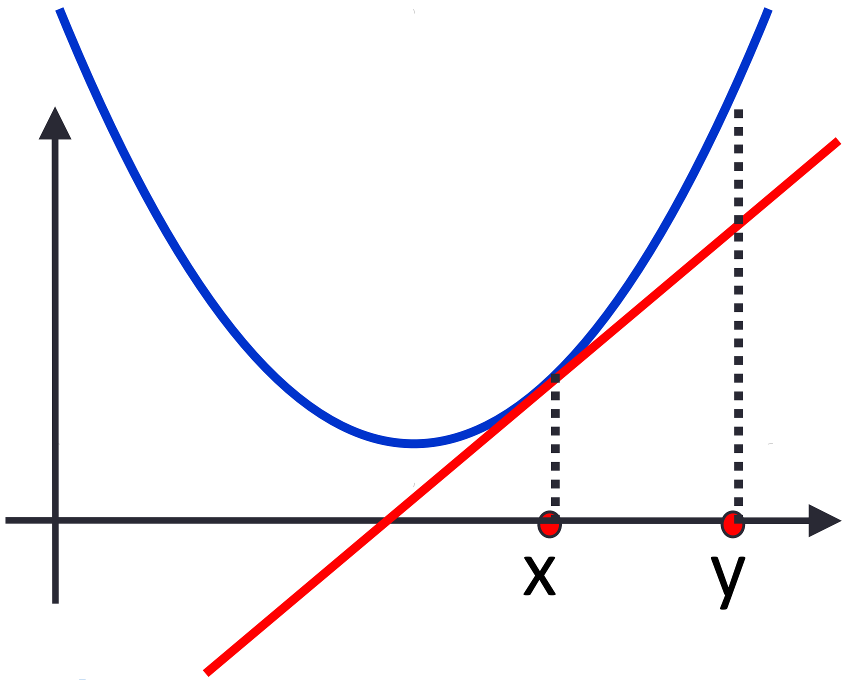
注意:
応用では，非自明な凸関数がしばしば現れる

凸関数の特徴付け

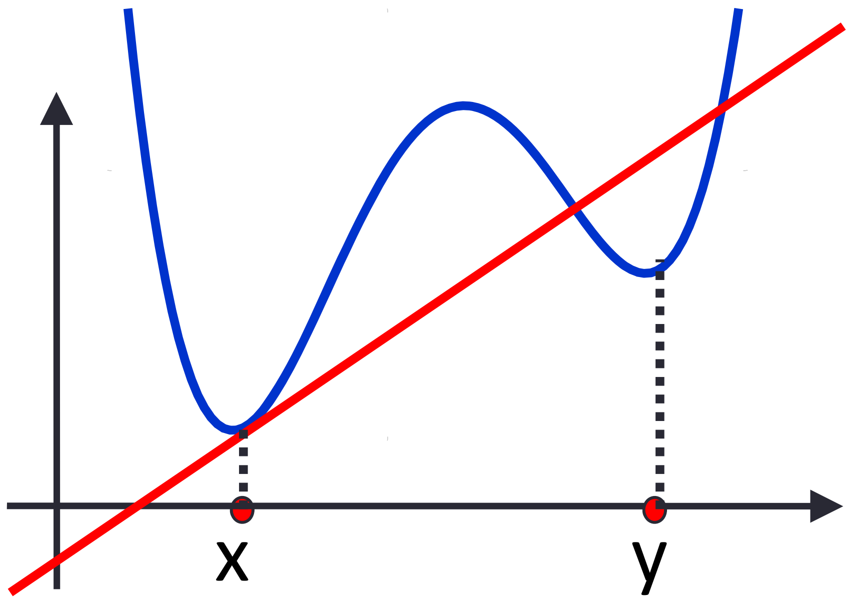
定理: f: 凸関数, 微分可能(勾配ベクトルが定義可能)
←→ 任意のベクトル x, y に対して次の不等式が成立

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

証明は略



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

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

証明：「⇐」はすでに証明したので，「⇒」を示す．
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

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

ベクトル y は任意なので，x*は最適解

凸関数の最適解の必要条件

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

証明:「$\Leftarrow$」は自明なので,「$\Rightarrow$」を示す.

極小解の定義より, 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

$\Rightarrow$ $0 < t < 1$ 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

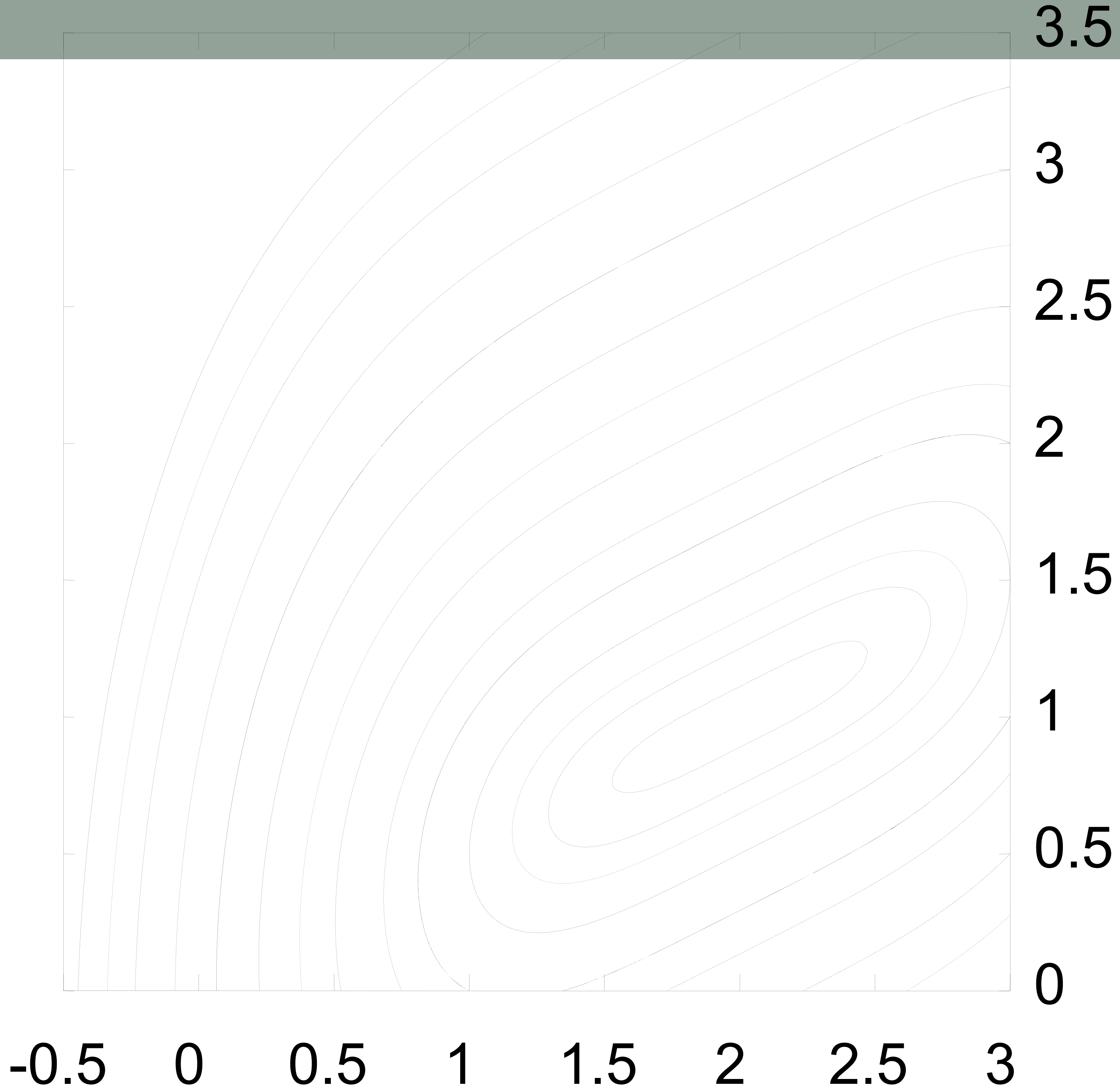
問題1: 以下の関数 $f_1(x_1, x_2)$, $f_2(x_1, x_2)$, $f_3(x_1, x_2)$ に対して，
$(x_1, x_2) = (a_1, a_2)$ における一次のテイラー近似を求めなさい.

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

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

問題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。
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