最適化数学 第 3 回

[今回の項目]

1. 制約なし最適化問題
2. 1 次の最適性条件
3. 停留点と局所最適解
4. 2 次の最適性条件
5. 局所最適解の求め方

最適化問題とは？

問題

平面に 4 点 $(1,3)$，$(2,5)$，$(3,5)$, $(4,7)$ が与えられたとき，これらの点の最も近くを通る直線は？

直線は $y = ax + b$ と書け，点 $(1,3)$ と直線との誤差は

$$3 - (1 \cdot a + b)$$

となる．同様に他の点との誤差を考え，それらの二乗の和を最小にする問題を考える．

$$\begin{aligned} \text{最小化} \quad & f(a,b) = \{3 - (a+b)\}^2 + \{5 - (2a+b)\}^2 \\ & \qquad + \{5 - (3a+b))\}^2 + \{7 - (4a+b)\}^2 \\ \text{制　約} \quad & \text{なし} \end{aligned}$$

制約なし最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{制　約} & \text{なし} \end{array}$$

ここで，最小化する関数 $f(x)$ を 目的関数 と呼ぶ．

関数を最大化する問題を最大化問題と呼び，最小化問題と最大化問題をまとめて，最適化問題 と呼ぶ．

最適解の定義

［定義］

$\bar{x}$ がすべての $x \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$f(x) \geq f(\bar{x})$$

のとき $f(\bar{x})$ を 大域最小値，$\bar{x}$ を大域最小解と呼ぶ．

［定義］

$\bar{x}$ に <u>十分近い</u> すべての $x \in \mathbb{R}^n$ に対して

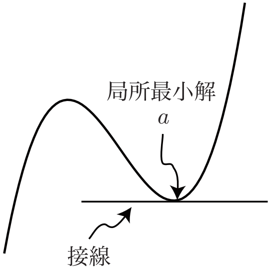
$$f(x) \geq f(\bar{x})$$

のとき $f(\bar{x})$ を 局所最小値，$\bar{x}$ を 局所最小解 と呼ぶ．

不等号が逆だと最大解．最小・最大解をまとめて最適解と呼ぶ
微積で扱う極値との違いは教科書参照．

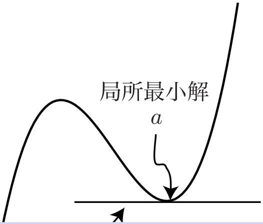
1 次の最適性条件

$f(x)$ が 1 変数関数のとき,
点 a が局所最適解ならば,
$f'(a) = 0$ が成り立つ.



1 次の最適性条件

$f(x)$ が 1 変数関数のとき,
点 a が局所最適解ならば,
$f'(a) = 0$ が成り立つ.



［定理］（一次の最適性条件）

$f(x)$ ：多変数関数
点 $\bar{x}$ が局所最適解ならば,

$$\nabla f(\bar{x}) = \mathbf{0} \quad (\text{零ベクトル})$$

が成り立つ.

［定義］

点 p が, $\nabla f(p) = \mathbf{0}$ を満たすとき, p を f の停留点と呼ぶ.

停留点は最適解？

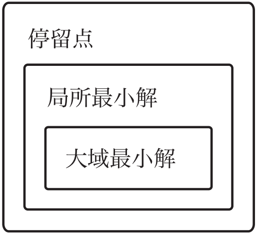
［定理］（一次の最適性条件）

$f(x)$：多変数関数
点 $\bar{x}$ が局所最適解ならば，

$$\nabla f(\bar{x}) = \mathbf{0} \quad （零ベクトル）$$

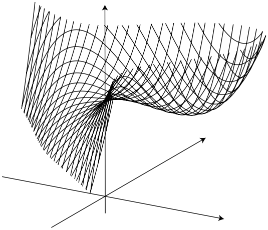
が成り立つ．

［解説］．局所最適解が存在すれば，定理より，それは常に停留点になる．よって，停留点をすべて見つければ最適解は必ずその中にある．このことから，停留点を見つけることは重要なのである．



停留点の幾何的イメージ

最小化　$f(x,y) = x^3 - 3xy + y^3$
の局所最小解を $(x,y) = (a,b)$ とする．



点 (a,b) は局所最小解であるので，

「点 $(a,b,f(a,b))$ はグラフ
が下に窪んだ部分の一番底に位置している」

$\Downarrow$

「窪みの一番底に接する平面は水平」

$\Downarrow$

接平面 $z = f(a,b) + f_x(a,b)(x-a) + f_y(a,b)(y-b)$ は (x,y) に対して，一定の値を取る．

$\Downarrow$

$$f_x(a,b) = f_y(a,b) = 0$$

証明は教科書を参照．

練習問題

停留点を求めよ.

(1) $f(x,y) = x^3 + y^3 - 9xy + 1$

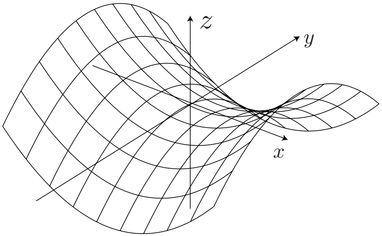
(2) $f(x,y,z) = x^2 + y^2 + z^2 + xy - yz - zx + x + y - 2z + 1$

停留点であっても，局所最適解とは限らない

［例］

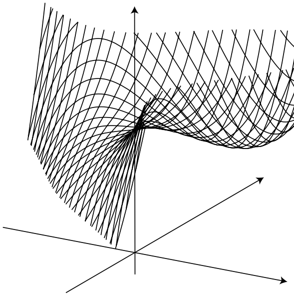
$$\text{最小化}\ f(x,y) = x^2 - y^2$$

では $\nabla f(0,0) = \mathbf{0}$ となるが, $(0,0)$ は局所最小解ではない．実際, $f(0,0)$ と，点 $(0,0)$ に近い点 (x,y) での f の値を比べても, $f(0,0)$ は最も小さい値にはなっていない.

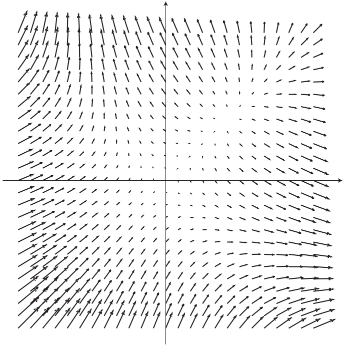


どの停留点が局所最適解？

最小化　$f(x,y) = x^3 - 3xy + y^3$



$x^3 - 3xy + y^3$ のグラフ



$x^3 - 3xy + y^3$ の勾配ベクトル

ヘッセ行列を用いた判定法

停留点 $\bar{x}$ を局所最小解とすると,

$\bar{x}$ で『グラフは局所的に下に窪んでいる』

$\longleftrightarrow$ 点 $\bar{x}$ の近くで関数 f は『局所的に凸関数である』

ヘッセ行列を用いた判定法

停留点 $\bar{x}$ を局所最小解とすると,

$\bar{x}$ で『グラフは局所的に下に窪んでいる』

$\longleftrightarrow$ 点 $\bar{x}$ の近くで関数 f は『局所的に凸関数である』

［定理］（2 次の最適性条件）

1. （必要性）$\bar{x}$ が局所最小解
   $\Longrightarrow \nabla f(\bar{x}) = \mathbf{0}$ かつ $\nabla^2 f(\bar{x})$ が半正定値
2. （十分性）$\nabla f(\bar{x}) = \mathbf{0}$ かつ $\nabla^2 f(\bar{x})$ が正定値
   $\Longrightarrow \bar{x}$ は局所最小解.
3. （否定）$\nabla^2 f(\bar{x})$ が不定値のとき, $\bar{x}$ は局所最適解ではない.

局所最大解についても, それぞれ対応する箇所を半負定値, 負定値, 極大値に置き換えたものが成り立つ.

2 次の最適性条件の幾何的イメージ

［凸関数の復習］

任意の (x, y) について $\nabla^2 f(x, y)$ が正定値 $\Longrightarrow f$ が狭義凸関数

［2 次の最適性条件］

$\nabla^2 f(a, b)$ が正定値

$\Longrightarrow (a, b)$ に近い (x, y) で $\nabla^2 f(x, y)$ が正定値

$\Longrightarrow f$ が「(a, b) の近くで狭義凸関数」

1 次の最適性条件と合わせると,

$\nabla f(a, b) = \mathbf{0}$ かつ $\nabla^2 f(a, b)$ が正定値

$\Longrightarrow (a, b)$ は f の「局所的に狭義凸」な部分の底にある

$\Longrightarrow (a, b)$ は局所最適解

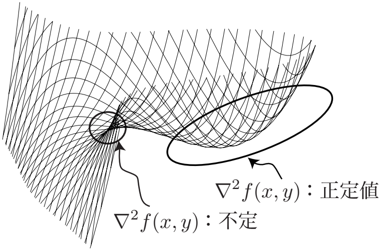
2 次の最適性条件の幾何的イメージ

ヘッセ行列 $\nabla^2 f(a,b)$ が不定 $(|\nabla^2 f(a,b)| < 0)$

$\Longrightarrow f$ が (a,b) の近くで凸関数にも凹関数にならず,

グラフが捻れている

$\Longrightarrow (a,b)$ は最適解ではない



例題

$$f(x,y) = x^3 - 3xy + y^3$$

の局所最適値を求めよ．

練習

局所最適解を求めよ.

(1) $f(x, y) = x^2 - 3y^2 + y^3$

(2) $f(x, y) = x^3 + 5x^2 + xy + \frac{1}{2}y^2 + 3x - 3y + 1$

(3) $f(x, y) = x^3 + 3xy^2 + 4y^3 - 3x + 1$

(4) $f(x, y, z) = x^2 + \frac{3}{2}y^2 + z^2 + xz - 3x - 6y - 3z$