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．

$$\text{最小化} \quad f(a,b) = \{3-(a+b)\}^2 + \boxed{} + \boxed{} + \boxed{}$$

制　約　なし

制約なし最適化問題

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

ここで，最小化する関数 $f(x)$ を $\boxed{}$ 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

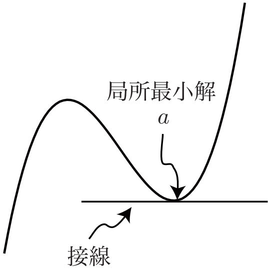
$$f(x) \geq f(\bar{x})$$

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．

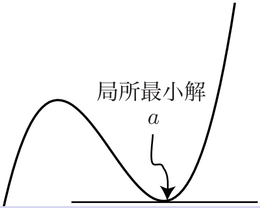
1 次の最適性条件

$f(x)$ 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,

$$\boxed{\phantom{\nabla f(\bar{x}) = \mathbf{0} \quad\quad}}$$

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 $\boxed{\phantom{\text{xxxxxx}}}$ と呼ぶ.

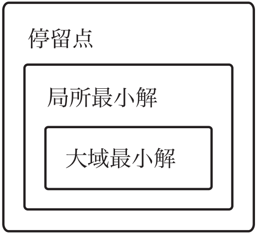
停留点は最適解？

［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，

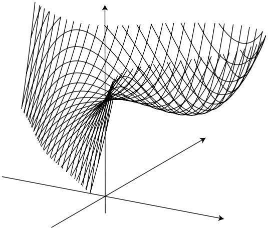
が成り立つ．

［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 $\boxed{\qquad\qquad}$ に位置している」

$$\Downarrow$$

「窪みの一番底に接する平面は $\boxed{\qquad}$」

$$\Downarrow$$

接平面 $\boxed{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad}$
は (x,y) の値に関わらず，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) $f(x, y) = x^3 + y^3 - 9xy + 1$

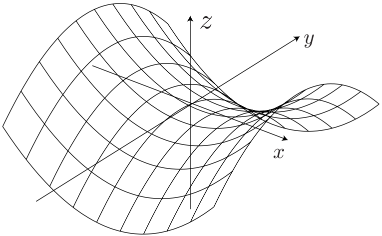
(2) $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 + xy - yz - zx + x + y - 2z + 1$

停留点であっても，局所最適解とは限らない

［例］

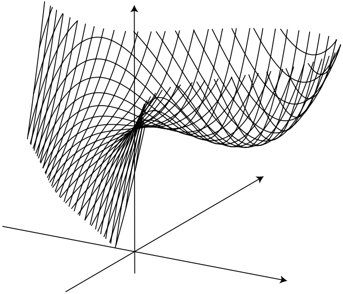
$$\text{最小化 } f(x,y) = x^2 - y^2$$

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．

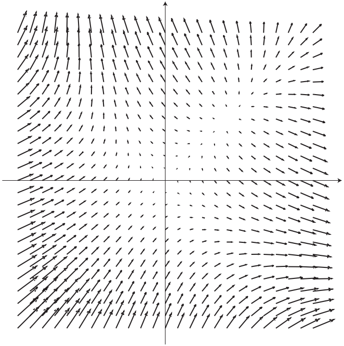


どの停留点が局所最適解？

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

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 $\boxed{}$

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 $\boxed{}$

［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 $\nabla^2 f(\bar{x})$ $\boxed{}$
2. （十分性）$\nabla f(\bar{x}) = \mathbf{0}$ かつ $\nabla^2 f(\bar{x})$ が $\boxed{}$
$\Longrightarrow \bar{x}$ は局所最小解.
3. （否定）$\nabla^2 f(\bar{x})$ が $\boxed{}$ 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 $\boxed{\qquad\qquad}$ $\Rightarrow f$ が狭義凸関数

［2 次の最適性条件］

$\nabla^2 f(a, b)$ が $\boxed{\qquad\qquad}$

$\Longrightarrow (a, b)$ に近い (x, y) で $\nabla^2 f(x, y)$ が $\boxed{\qquad\qquad}$

$\Longrightarrow f$ が「(a, b) の近くで $\boxed{\qquad\qquad\qquad}$」

1 次の最適性条件と合わせると，

$\nabla f(a, b) = \boxed{\quad}$ かつ $\nabla^2 f(a, b)$ が $\boxed{\qquad\qquad}$

$\Longrightarrow (a, b)$ は f の「$\boxed{\qquad\qquad\qquad}$」な部分の底にある

$\Longrightarrow (a, b)$ は $\boxed{\qquad\qquad\qquad}$

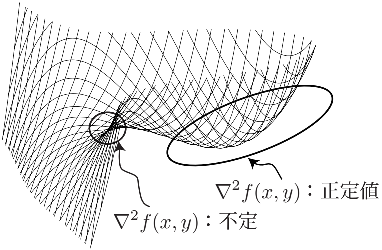
2 次の最適性条件の幾何的イメージ

ヘッセ行列 $\nabla^2 f(a,b)$ が $\boxed{}$ $(|\nabla^2 f(a,b)| < 0)$

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

グラフが捻れている

$\Longrightarrow (a,b)$ は $\boxed{}$



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