数理計画法

第14回：Newton法

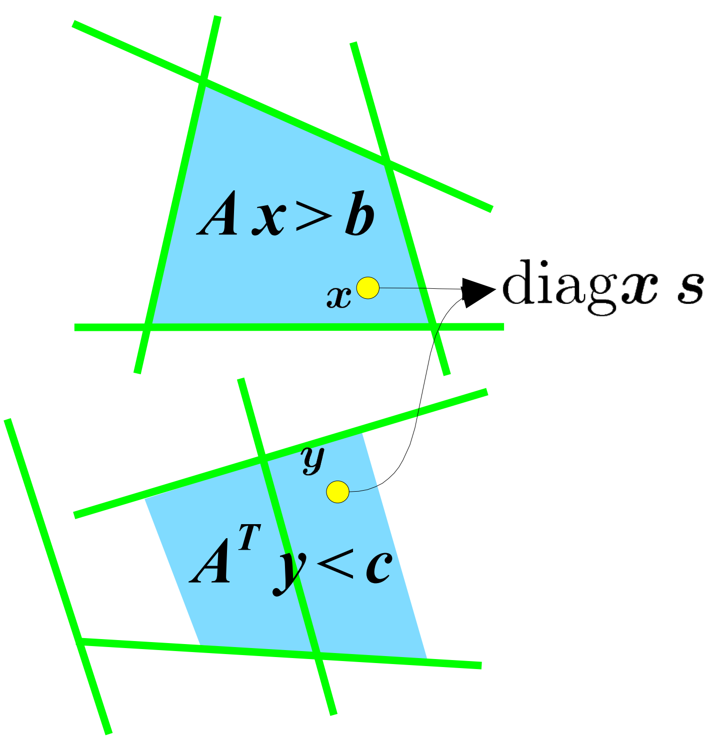
復習:自己双対型内点法

maximize
$z = \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$
subject to
$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{b}$
$\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0}$

主問題

minimize
$w = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$
subject to
$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \geq \boldsymbol{c}$
$\boldsymbol{y} \geq \boldsymbol{0}$

双対問題



- 自己双対型内点法:
  - 線形計画問題の最適解検索
    →双対ギャップのゼロ点探索
  - 実際は緩和問題を反復改良で解く

※双対ギャップ:
主問題と双対問題の目的関数値の差

※ゼロ点探索:
f(x,y,z,...)=0 となる x,y,z...を探す問題

※緩和問題:
元の問題と解が対応し、解き易い問題
(全く同等ではないという意味もある)

※反復改良:
問題の条件を完全には満たさない状態を反復的に改めて解を求める方法

復習:1変数Newton法のゼロ点探索

- 1変数の場合、初期点 $\tilde{x}$ の近傍での Taylor 展開を考えて

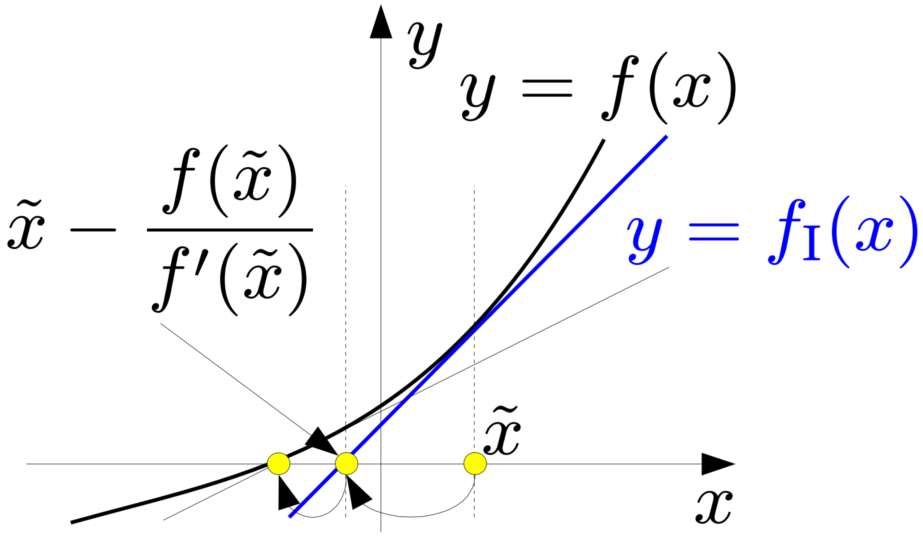
$$f(x) = f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x - \tilde{x}) + \frac{1}{2}f''(\tilde{x})(x - \tilde{x})^2 + \dots$$

- 1次(=線形)近似を得る

$$f(x) \sim f_{\mathrm{I}}(x) = f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x - \tilde{x})$$

- 1次近似のゼロ点を求め

$$f_{\mathrm{I}}(x) = 0 \Leftrightarrow$$
$$x = \tilde{x} - f(\tilde{x})/f'(\tilde{x})$$



- 求めた x を $\tilde{x}$ として①に戻る
(f(x)がゼロに近ければ終了)

復習：1変数Newton法の極点探索

- 1変数の場合、初期点 $\tilde{x}$ の近傍での Taylor 展開を考えて

$$f(x) = f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x - \tilde{x}) + \frac{1}{2} f''(\tilde{x})(x - \tilde{x})^2 + \dots$$

- 2次近似を得る

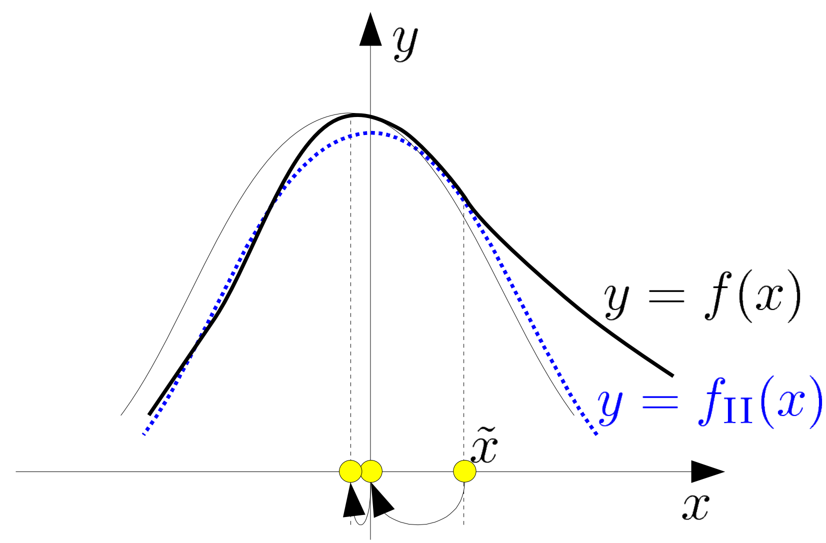
$$f_{\mathrm{II}}(x) = f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x - \tilde{x}) + \frac{1}{2} f''(\tilde{x})(x - \tilde{x})^2$$

- 2次近似の極点を求め

$$f'_{\mathrm{II}}(x) = 0 \Leftrightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d} f_{\mathrm{II}}}{\mathrm{d}(x - \tilde{x})} = 0 \Leftrightarrow$$

$$x = \tilde{x} - f'(\tilde{x}) / f''(\tilde{x})$$



- 求めた x を $\tilde{x}$ として①に戻る
  ($f(x)$ がゼロに近ければ終了)

多変数Newton法によるゼロ点探索

- 初期点 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 近傍での Taylor 展開を考えて同様に、

$$f(\boldsymbol{x}) = \tilde{f} + \sum_j \tilde{f}_{x_j}\delta_j + \frac{1}{2}\sum_{j,k}\tilde{f}_{x_j x_k}\delta_j\delta_k + \dots$$

$$\tilde{f} = f(\tilde{\boldsymbol{x}}), \tilde{f}_{x_j} = \frac{\partial f}{\partial x_j}(\tilde{\boldsymbol{x}}), \tilde{f}_{x_j x_k} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k}(\tilde{\boldsymbol{x}}), \delta_j = x_j - \tilde{x}_j$$

一次近似: $f_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{x}) = \tilde{f} + \sum_j \tilde{f}_{x_j}\delta_j = \tilde{f} + \tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\delta}$

$$\tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\tilde{\boldsymbol{x}}), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\tilde{\boldsymbol{x}})\right), \boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}} = (\delta_1, \dots, \delta_n)$$

$f_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{x}) = 0$ より、$\tilde{f} + \tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\delta} = 0$ を解いて $\boldsymbol{\delta}$ を定める

反復公式: $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}$

多変数Newton法による極値探索

- 二次近似: $f_{\mathrm{II}}(\boldsymbol{x}) = \tilde{f} + \sum_j \tilde{f}_{x_j}\delta_j = \tilde{f} + \tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\delta}^{\mathbf{T}}\boldsymbol{H}\boldsymbol{\delta}$

$$\tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\tilde{\boldsymbol{x}}), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\tilde{\boldsymbol{x}})\right),\ \boldsymbol{H} = \begin{pmatrix} f_{x_1x_1} & \cdots & f_{x_1x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{x_nx_1} & \cdots & f_{x_nx_n} \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}} = (\delta_1, \ldots, \delta_n).$$

条件: $\left(\frac{\partial}{\partial \delta_1}, \ldots, \frac{\partial}{\partial \delta_n}\right)^{\mathrm{T}} (f_{\mathrm{II}} - \tilde{f}) = 0$

より連立方程式 $\tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{H}(\tilde{x})\boldsymbol{\delta} = 0$ を得、$\boldsymbol{\delta}$ を求める

反復公式: $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}$

制約のある問題のNewton法

- 自己双対型内点法では双対ギャップそのもののゼロ点を求めずに、弱双対定理と変数の非負性による関係式を $f(x)=0$ にあたるものとする;

  $$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\text{-}\boldsymbol{c})\equiv\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{s}=0 \Leftrightarrow \mathrm{diag}(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{s}=0.$$

  さらに関係式そのものではなく、その緩和された関係式の解を扱うために Newton 法を用いる,

  $$\mathrm{diag}(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{s}=0 \;\Leftarrow \mathrm{diag}(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{s}=\lambda\mathbf{1},\ \lambda\to 0.$$

- 初期点 x,y,s を何らかの方法で定め、その近傍にある関係式 $\mathrm{diag}(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})(\boldsymbol{s}+\Delta\boldsymbol{s})=0$ の解を一次近似式

  $\mathrm{diag}(\boldsymbol{x})\Delta\boldsymbol{s}+\mathrm{diag}(\Delta\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{s} = \text{-}[\mathrm{diag}(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{s}\ \text{-}\lambda\mathbf{1}]$ により求める

多変数Newton法の例

- 例題

  $f(x)=x_1^{\ 3}+x_2^{\ 3}$-$3x_1 x_2$ の極小点を求めよ

- 二次近似: $f_{\mathrm{II}}(\boldsymbol{x}) = \tilde{f} + \sum_j \tilde{f}_{x_j}\delta_j = \tilde{f} + \tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\delta}^{\mathbf{T}}\boldsymbol{H}\boldsymbol{\delta}$

  $\tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}}=(f_{x_1}(\tilde{\boldsymbol{x}}),\ldots,f_{x_n}(\tilde{\boldsymbol{x}}))$, $\boldsymbol{H}=\begin{pmatrix} f_{x_1x_1} \cdots f_{x_1x_n} \\ \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ f_{x_nx_1} \cdots f_{x_nx_n} \end{pmatrix}$,

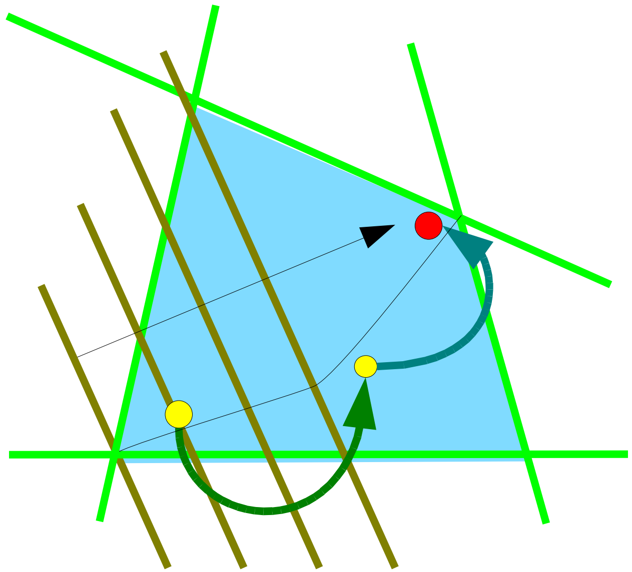
  $\boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}} = (\delta_1,\ldots,\delta_n)$.

- $\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}} = (2,2)$ とすれば、$\tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}} = (6,6), \boldsymbol{H} = \begin{pmatrix} 12 & -3 \\ -3 & 12 \end{pmatrix}$,

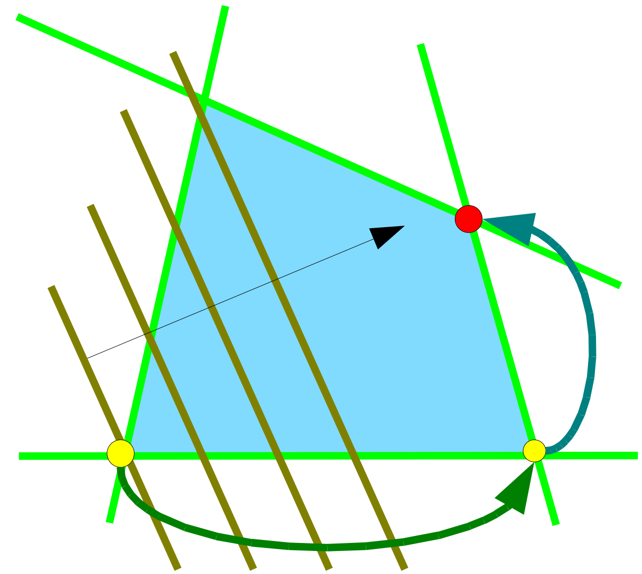
  $\tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{H}(\tilde{x})\boldsymbol{\delta} = 0$ を解いて、$\boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}} = (-\frac{2}{3},-\frac{2}{3})$.

  1回目の更新で $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = (1\frac{1}{3},1\frac{1}{3})$ となる.

自己双対型内点法



単体法(simplex法)



単体法は線形計画問題に特化した専用の解法であり、線形計画問題の特徴に対応した方法で、本質的に可算個の可能性を順番に辿る直接的方法である。

自己双対型内点法は、線形計画問題の解法ではあるが、実際の実行過程は非線形最適問題の反復解法になっている。

演習問題

A4用紙を横に使って、左上に名前･学年･学籍番号を記入

課題: $f(\boldsymbol{x}) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1x_2$ の極小点を求めよ

課題1: 2次近似を利用した Newton 法の手順を示せ

課題2 初期点を $\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}} = (2, 2)$とした場合の 2 回目以降の更新を実施し、どの程度の改善が見られるか確認せよ

1回目の反復後は $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = (1\frac{1}{3}, 1\frac{1}{3})$

課題3 初期点を変えて同様の確認を実行せよ

$$\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}} = (1, 2)$$