数理計画法

第15回：Newton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

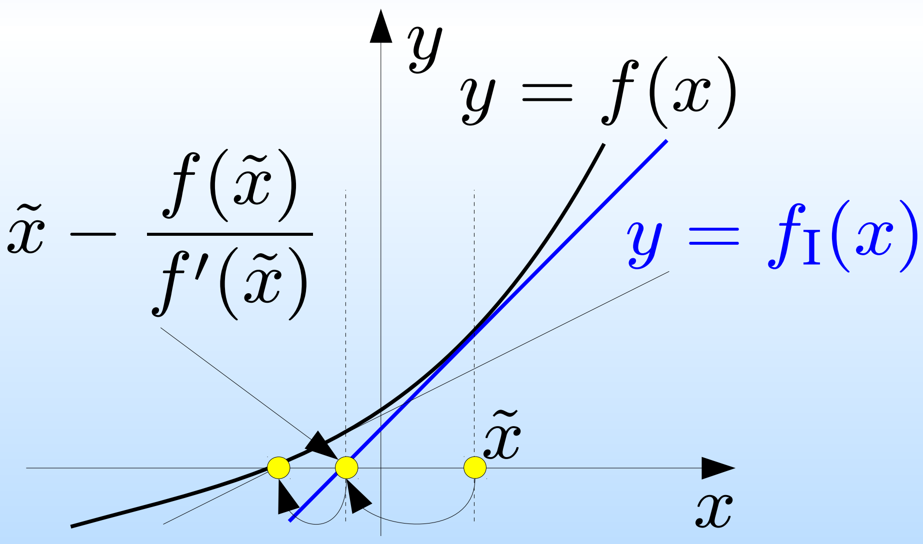
$$f(x) = f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x - \tilde{x}) + \frac{1}{2}f''(\tilde{x})(x - \tilde{x})^2 + \ldots$$

- 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

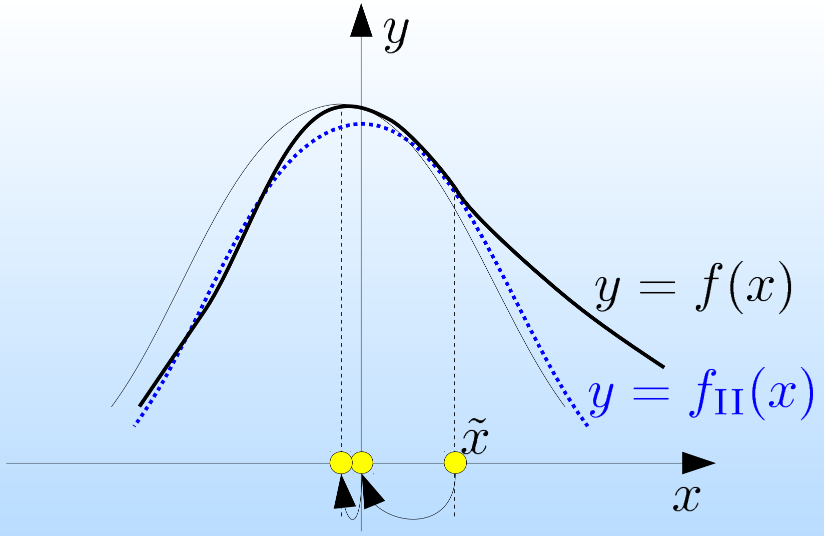
$$f_{\mathrm{II}}(x) = f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x-\tilde{x}) + \frac{1}{2}f''(\tilde{x})(x-\tilde{x})^2$$

- 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: $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}$

多変数Newton法の例

- 例題： $f(x) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1x_2$ の極小点を求めよ
- 二次近似: $f_{\mathrm{II}}(\boldsymbol{x}) = \tilde{f} + \sum_j \tilde{f}_{x_j}\delta_j = \tilde{f} + \tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\delta} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\boldsymbol{\delta}$

$(3x_1^2 - 3x_2, 3x_2^2 - 3x_1)$

$$\tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}} = (f_{x_1}(\tilde{\boldsymbol{x}}), \ldots, f_{x_n}(\tilde{\boldsymbol{x}})), \quad \boldsymbol{H} = \begin{pmatrix} f_{x_1x_1} \cdots f_{x_1x_n} \\ \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ f_{x_nx_1} \cdots f_{x_nx_n} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 6x_1 & -3 \\ -3 & 6x_2 \end{pmatrix}$$

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

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

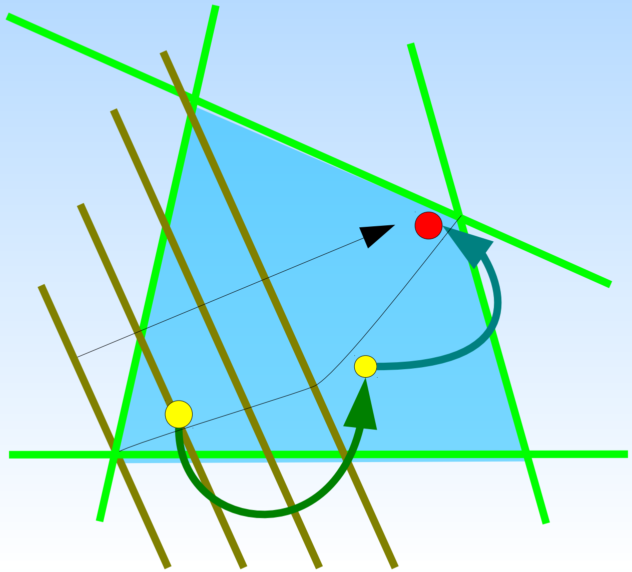
$\tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{H}(\tilde{x})\boldsymbol{\delta} = 0$ を解いて、$\boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}} = (-\frac{2}{3}, -\frac{2}{3}).$

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

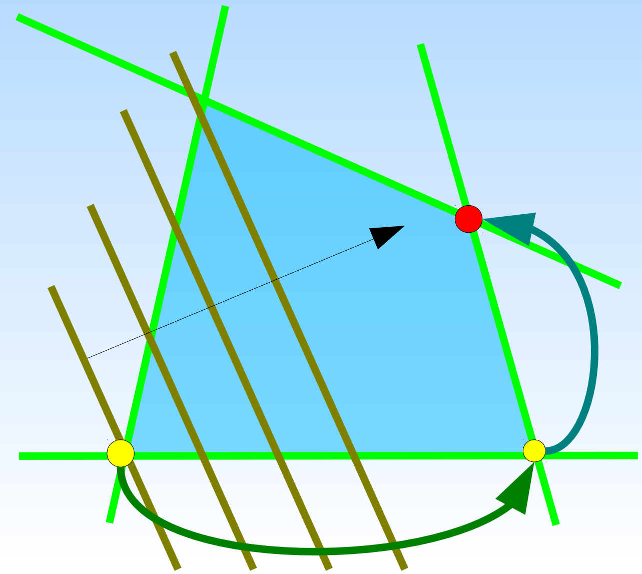
自己双対型内点法のNewton法

- 双対ギャップのゼロ点 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$ をニュートン法で求める
  制約式を満たすにはどうする?
- 双対ギャップを主･スラック変数を用いて表わせば
  $$\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=(\boldsymbol{c}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})=\boldsymbol{t}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{s}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{t}\\\boldsymbol{y}\end{pmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}\\\boldsymbol{s}\end{pmatrix}$$
  制約式は変数の非負性に対応する。
- 逆に変数の非負性より双対ギャップのゼロ点を求める問題に同等な連立方程式を導くことができる
  $$(\boldsymbol{t}^{\mathrm{T}}\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}})\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}\\\boldsymbol{s}\end{pmatrix}=0\iff\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}\\\boldsymbol{s}\end{pmatrix}(\boldsymbol{t}^{\mathrm{T}}\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{0}$$
- 初期点 $\boldsymbol{x}_0,\boldsymbol{y}_0,\boldsymbol{s}_0,\boldsymbol{t}_0\geq\boldsymbol{0}$ を何らかの方法で定め、
  その近傍で関係式 $(\boldsymbol{X}+\delta\boldsymbol{X})(\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}+\delta\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{0}$の解を
  一次近似式を緩和した式から反復法で求める;
  $$\boldsymbol{X}\delta\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}+\delta\boldsymbol{X}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{T}}=\lambda\boldsymbol{1}\qquad\lambda\to0\qquad\boldsymbol{X}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}\\\boldsymbol{s}\end{pmatrix},\quad\boldsymbol{Y}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{t}\\\boldsymbol{y}\end{pmatrix}$$

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

課題1: $x^2 = 2$ の解をニュートン法で求め、$\sqrt{2}$ の近似値を 4桁まで得るのに必要な反復回数を調べよ

課題2: 例題の続きを確認せよ

例題: $f(\boldsymbol{x}) = x_1^3 + x_2^3 - 3x_1x_2$ の極小値を求めよ

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

の与える漸化式: $\tilde{\boldsymbol{f}}' + \boldsymbol{H}(\tilde{x})\boldsymbol{\delta} = 0, \quad \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{\delta},$

$$\tilde{\boldsymbol{f}}'^{\mathrm{T}} = (3x_1^2 - 3x_2, 3x_2^2 - 3x_1), \boldsymbol{H} = \begin{pmatrix} 6x_1 & -3 \\ -3 & 6x_2 \end{pmatrix}.$$

初期点: $\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}} = (2, 2)$ →1回反復後: $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = (1\frac{1}{3}, 1\frac{1}{3})$