

数理工学実験レポート

第 6 章（連続最適化）

学籍番号 1029366161 中塚一瑳

2025 年 12 月 22 日

目次

1	課題 15：ニュートン法および二分法による多項式の零点計算	2
1.1	原理と方法	2
1.2	実験方法	2
1.3	結果	3
1.4	考察	3
2	課題 16：最急降下法およびニュートン法による停留点計算	4
2.1	原理と方法	4
2.2	実装	4
2.3	結果	4
2.4	考察	5
3	課題 17：勾配およびヘッセ行列の解析的導出と実装との対応	5
3.1	微分結果	6
3.2	コードとの対応	6
4	課題 18：最急降下法およびニュートン法による 2 変数関数の最小化	7
4.1	原理と方法	7
4.2	実験方法	7
4.3	結果	7
4.4	考察	8
5	課題 19：総合演習	8
5.1	原理と方法	8
5.2	実験方法	9
5.3	結果	9
5.4	考察	9
5.5	課題 1	10

5.6	課題 2	10
5.7	課題 3	10
付録 A ソースコード		11
A.1	課題 15 のコード	12
A.2	課題 16 のコード	14
A.3	課題 17 のコード	17
A.4	課題 18 のコード	19

はじめに

今回は連続最適化の様々な手法を用いて、与えられた関数の最小値を求める課題に取り組む。

1 課題 15：ニュートン法および二分法による多項式の零点計算

本課題では、多項式

$$f(x) = x^3 + 2x^2 - 5x - 6 \quad (1)$$

の零点を数値的に求める。まず関数のグラフを描画して零点の存在を確認し、その後、二分法およびニュートン法を用いて零点を計算する。

1.1 原理と方法

1.1.1 二分法

二分法は、区間 $[a, b]$ において $f(a)$ と $f(b)$ の符号が異なるとき、その区間に零点が存在することを利用した反復法である。中点 $c = (a + b)/2$ を取り、 $f(c)$ の符号に応じて零点を含む半区間に更新する操作を繰り返すことで、区間幅を徐々に縮小し零点へ収束させる。零点を挟む区間が与えられれば必ず収束するが、収束速度は比較的遅い。

1.1.2 ニュートン法

ニュートン法は、関数をある点 x_k の周りで一次近似し、その接線と x 軸の交点を次の近似値とする方法である。反復公式は

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (2)$$

で与えられる。一般に収束は速いが、初期値の選び方によっては収束しない場合がある。本課題で用いた導関数は

$$f'(x) = 3x^2 + 4x - 5 \quad (3)$$

である。

1.2 実験方法

Python を用いて $x \in [-10, 10]$ の範囲で $f(x)$ を描画し、グラフから零点が $x \approx -3, -1, 2$ 付近に存在することを確認した。二分法では、それぞれの零点を挟む区間として

$$[-4, -2], [-2, 0], [1, 3]$$

を与えた。ニュートン法では初期値として

$$x_0 = -2.5, -0.5, 1.5$$

を用いた。停止条件は $|f(x)| \leq 10^{-10}$ とした。

1.3 結果

1.3.1 関数のグラフ

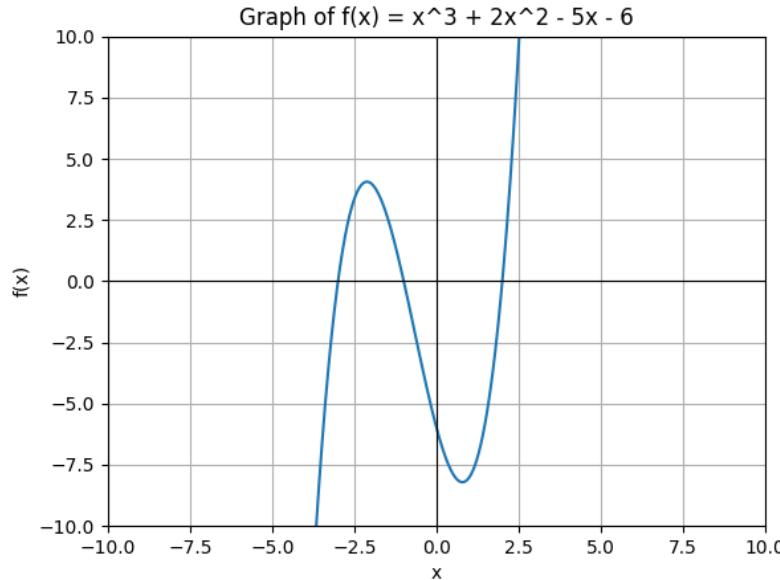


図 1: $f(x) = x^3 + 2x^2 - 5x - 6$ のグラフ

1.3.2 零点

数値計算によって得られた零点を表 1 に示す.

表 1: 二分法およびニュートン法で求めた零点

手法	近似解 x	残差 $f(x)$
二分法	-3.000	0
二分法	-1.000	0
二分法	2.000	0
ニュートン法	-3.000	0
ニュートン法	-1.000	0
ニュートン法	2.000	1.421×10^{-14}

1.4 考察

$f(x) = 0$ は因数分解により

$$f(x) = (x + 3)(x + 1)(x - 2)$$

と書け、解析解は $x = -3, -1, 2$ である。数値計算によって得られた零点はこれらと一致しており、手法が正しく実装されていることが確認できる。ニュートン法において残差が完全に 0 とならない場合があるのは、浮動小数点演算誤差によるものである。

2 課題 16：最急降下法およびニュートン法による停留点計算

2.1 原理と方法

本課題では、次の関数

$$f(x) := \frac{1}{3}x^3 - x^2 - 3x + \frac{5}{3} \quad (4)$$

の停留点 ($f'(x) = 0$ を満たす点) を、(a) 最急降下法、(b) ニュートン法により数値的に求める。まず微分は

$$f'(x) = x^2 - 2x - 3 = (x - 3)(x + 1), \quad (5)$$

$$f''(x) = 2x - 2 \quad (6)$$

である。従って停留点は解析的には $x = -1, 3$ の 2 点である。

2.1.1 (a) 最急降下法

1 次元では勾配 $\nabla f(x)$ は $f'(x)$ に一致するため、最急降下法は

$$x_{k+1} = x_k - t_k f'(x_k), \quad t_k = \frac{1}{k+1} \quad (7)$$

で与えられる。初期点は $x_0 = 1/2$ とする。停止判定は $|f'(x_k)| \leq \varepsilon$ ($\varepsilon = 10^{-8}$) とし、最大反復回数も設ける。

2.1.2 (b) ニュートン法

停留点探索 ($f'(x) = 0$ の零点探索) としてのニュートン法は

$$x_{k+1} = x_k - t_k \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}, \quad t_k = 1 \quad (8)$$

で与えられる。初期点は $x_0 = 5$ とし、(a) と同様に $|f'(x_k)| \leq \varepsilon$ を停止判定とした。なお、本問題では $f''(x) = 0$ (すなわち $x = 1$) で更新が不能となるため、実装では $f''(x_k) = 0$ の場合を例外として扱う。

2.2 実装

Python により f, f', f'' をそれぞれ関数として実装し、(a) と (b) の更新式をそのまま反復した。各反復で $(x_k, f(x_k), |f'(x_k)|)$ を履歴として保存し、収束挙動の可視化に用いた。

2.3 結果

(a) 最急降下法 ($x_0 = 0.5, t_k = 1/(k+1)$) および (b) ニュートン法 ($x_0 = 5, t_k = 1$) の結果を表 2 に示す。両手法とも停留点 $x^* = 3$ に収束した（もう一つの停留点 $x = -1$ には到達しなかった）。

両方法による反復点の推移を、関数 $y = f(x)$ 上に重ねて図 2 に示す。

表 2: 課題 16 の計算結果 ($\varepsilon = 10^{-8}$)

手法	初期値 x_0	近似解 x^*	$f(x^*)$	反復回数 k
最急降下法	0.5000	3.000	-7.333	193
ニュートン法	5.000	3.000	-7.333	5

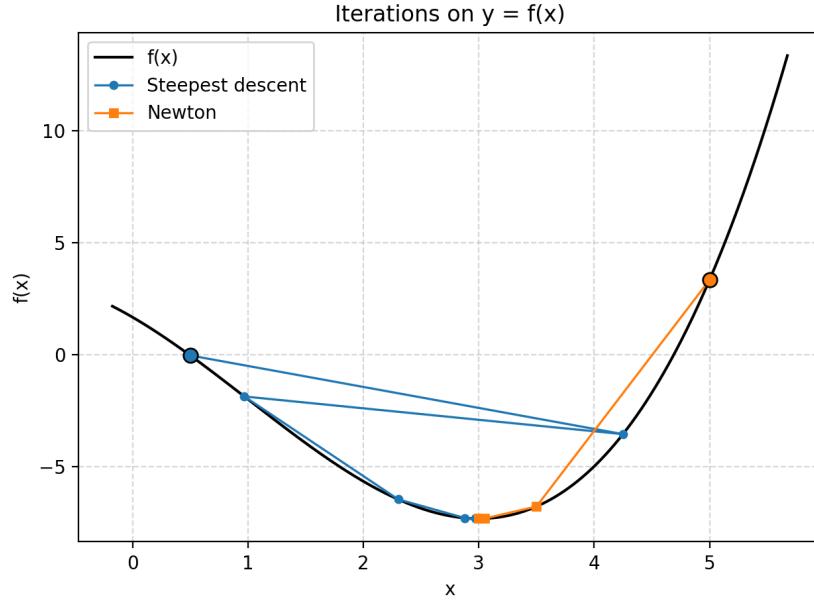


図 2: 関数 $y = f(x)$ 上における反復点の推移. 青丸は最急降下法, 橙四角はニュートン法による反復点を表す.

2.4 考察

図 2 より, 最急降下法では反復点が谷に沿って緩やかに移動しており, ステップサイズ $t_k = 1/(k+1)$ が減少することで後半の収束が遅くなっていることが視覚的に確認できる. 一方, ニュートン法では局所的な 2 次近似に基づき更新が行われるため, 停留点近傍では大きなジャンプを伴い, 極めて高速に収束している.

3 課題 17：勾配およびヘッセ行列の解析的導出と実装との対応

本課題では, 次の関数

$$f(x_0, x_1) = x_0^2 + e^{x_0} + x_1^4 + x_1^2 - 2x_0x_1 + 3 \quad (9)$$

について, 勾配およびヘッセ行列を解析的に求め, それを実装したコードとの対応を示す.

3.1 微分結果

まず、各変数による 1 階微分は

$$\frac{\partial f}{\partial x_0} = 2x_0 + e^{x_0} - 2x_1, \quad (10)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 4x_1^3 + 2x_1 - 2x_0 \quad (11)$$

である。従って勾配ベクトルは

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_0 + e^{x_0} - 2x_1 \\ 4x_1^3 + 2x_1 - 2x_0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

と表される。

次に、2 階微分よりヘッセ行列は

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_0^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_0 \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_0} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 + e^{x_0} & -2 \\ -2 & 12x_1^2 + 2 \end{pmatrix} \quad (13)$$

となる。

3.2 コードとの対応

上記の解析結果は、以下の Python コードとして実装されている。

- 目的関数

```
1 f = x0**2 + exp(x0) + x1**4 + x1**2 - 2*x0*x1 + 3
```

- 勾配

```
1 g0 = 2*x0 + exp(x0) - 2*x1
2 g1 = 4*x1**3 + 2*x1 - 2*x0
3 g = [g0, g1]
```

- ヘッセ行列

```
1 h00 = 2 + exp(x0)
2 h01 = -2
3 h10 = -2
4 h11 = 12*x1**2 + 2
5 H = [[h00, h01],
       [h10, h11]]
```

これにより、関数値・勾配・ヘッセ行列が理論式と一致して計算されていることが確認できる。

4 課題 18：最急降下法およびニュートン法による 2 変数関数の最小化

4.1 原理と方法

本課題では、2 変数関数

$$f(x_0, x_1) = x_0^2 + e^{x_0} + x_1^4 + x_1^2 - 2x_0x_1 + 3 \quad (14)$$

を最小化する。勾配およびヘッセ行列は

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_0 + e^{x_0} - 2x_1 \\ 4x_1^3 + 2x_1 - 2x_0 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 2 + e^{x_0} & -2 \\ -2 & 12x_1^2 + 2 \end{pmatrix} \quad (16)$$

である。更新は

$$x_{k+1} = x_k + t_k d_k \quad (17)$$

とし、方向 d_k は (a) 最急降下法 $d_k = -\nabla f(x_k)$, (b) ニュートン法 $\nabla^2 f(x_k) d_k = -\nabla f(x_k)$ の解として定める。

ステップ幅 t_k はバックトラック法 (Armijo 条件) で決定した。すなわち、 $t \leftarrow t_{\text{init}}$ から開始し、

$$f(x_k + t d_k) \leq f(x_k) + \xi t \langle \nabla f(x_k), d_k \rangle \quad (18)$$

を満たすまで $t \leftarrow \rho t$ により縮小する。

4.2 実験方法

初期点は $x_0 = (1, 1)^T$ とし、共通パラメータを

$$\xi = 1.0 \times 10^{-4}, \quad \rho = 0.5, \quad t_{\text{init}} = 1 \quad (19)$$

とした。停止条件は $\|\nabla f(x_k)\| \leq 1.0 \times 10^{-6}$ とし、最大反復回数は 1000 とした。各反復で $(x_k, f(x_k))$ を保存し、 x_0-x_1 平面上の等高線図に反復点列を重ねて可視化した (図 3)。

4.3 結果

(a) バックトラック法付き最急降下法および (b) バックトラック法付きニュートン法の収束結果を表 3 に示す。両手法は同一の解に収束し、ニュートン法の方が少ない反復回数で収束した。

table3 より、ニュートン法は最急降下法に比べて訳 5 分の 1 の反復回数で収束している。

反復点列を等高線図上に重ねた結果を図 3 に示す。

表 3: 課題 18 の計算結果 (初期点 $x_0 = (1, 1)^\top$)

手法	x_0^*	x_1^*	$f(x^*)$	反復回数 k
最急降下法 +BT	-0.7335	-0.4933	3.597	31
ニュートン法 +BT	-0.7335	-0.4933	3.597	6

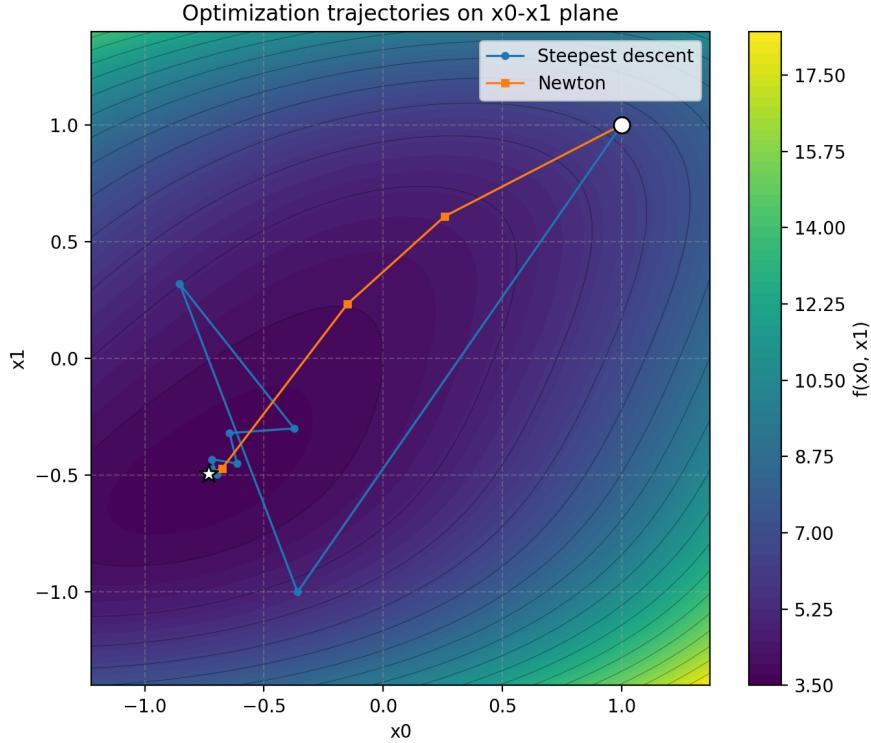


図 3: x_0-x_1 平面における等高線図と反復点列. ○が最急降下法 +BT, □がニュートン法 +BT の反復点列を表す.

4.4 考察

図 3 より, 最急降下法では反復点同士を結ぶ線分が等高線に対して直交しているのに対し, ニュートン法では直交していないものの、あたかも低い場所を知っているかのように、等高線の谷に沿って効率的に移動している様子がわかる. これは、ニュートン法がヘッセ行列を用いて関数の曲率を考慮しているためであり、その結果として少ない反復回数で収束していると考えられる.

5 課題 19：総合演習

5.1 原理と方法

本課題では、 $x = (x_0, x_1)^\top \in \mathbb{R}^2$ に対し

$$f(x) = \sum_{i=0}^2 f_i(x)^2, \quad f_i(x) = y_i - x_0 (1 - x_1^{i+1}) \quad (20)$$

を最小化する. 定数は $y_0 = 1.5$, $y_1 = 2.25$, $y_2 = 2.625$ とする(最適値は 0, 最適解は $x^* = (3, 0.5)^\top$).

f_i の勾配およびヘッセ行列は

$$\nabla f_i(x) = \begin{pmatrix} -1 + x_1^{i+1} \\ x_0(i+1)x_1^i \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$\nabla^2 f_0(x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f_i(x) = \begin{pmatrix} 0 & (i+1)x_1^i \\ (i+1)x_1^i & x_0(i+1)i x_1^{i-1} \end{pmatrix} \quad (i=1, 2) \quad (22)$$

である. よって, 勾配・ヘッセ行列は課題 18 と同様に

$$\nabla f(x) = 2 \sum_{i=0}^2 f_i(x) \nabla f_i(x), \quad (23)$$

$$\nabla^2 f(x) = 2 \sum_{i=0}^2 (f_i(x) \nabla^2 f_i(x) + \nabla f_i(x) \nabla f_i(x)^\top) \quad (24)$$

より計算できる. 更新式 $x_{k+1} = x_k + t_k d_k$, 方向の選び方(最急降下法／ニュートン法), およびバックトラック法(Armijo 条件)によるステップ幅決定は課題 18 と同様である.

5.2 実験方法

初期点は $x_0 = (2, 0)^\top$ とし, 共通パラメータを

$$\xi = 1.0 \times 10^{-4}, \quad \rho = 0.5, \quad t_{\text{init}} = 1 \quad (25)$$

とした. 停止条件は $\|\nabla f(x_k)\| \leq 1.0 \times 10^{-6}$ とし, 最大反復回数は 1000 とした. 各反復で $(x_k, f(x_k))$ を保存し, x_0-x_1 平面上の等高線図に反復点列を重ねて可視化した(図 4).

5.3 結果

(a) バックトラック法付き最急降下法および(b) バックトラック法付きニュートン法の収束結果を表 4 に示す. 両手法はほぼ同一の解に収束し, ニュートン法の方が少ない反復回数で収束した.

表 4: 課題 19 の計算結果(初期点 $x_0 = (2, 0)^\top$)

手法	x_0^*	x_1^*	$f(x^*)$	反復回数 k
最急降下法 +BT	2.99999781	0.49999946	7.68×10^{-13}	791
ニュートン法 +BT	3.00000013	0.50000005	9.47×10^{-15}	5

表 4 より, ニュートン法は最急降下法に比べて大幅に少ない反復回数で収束している. 反復点列を等高線図上に重ねた結果を図 4 に示す.

5.4 考察

図 4 より, 最急降下法では最適解近傍でジグザグに進む傾向が見られ, 収束までに多くの反復を要した. 一方, ニュートン法はヘッセ行列により曲率情報を用いるため, より適切な方向・スケールで更新でき, 少ない反復回数で効率的に収束したと考えられる.

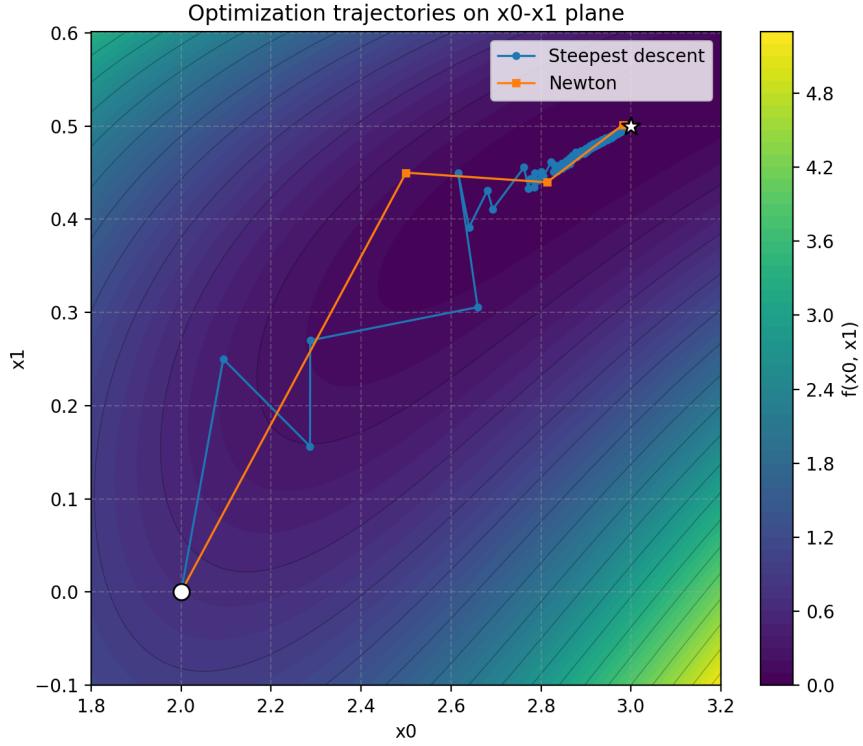


図 4: x_0-x_1 平面における等高線図と反復点列. ○が最急降下法 +BT, □がニュートン法 +BT の反復点列を表す.

追加課題

5.5 課題 1

5.6 課題 2

5.7 課題 3

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} x^\top G x + c^\top x \quad \text{subject to} \quad Ax \leq b,$$

ただし G は対称半正定値行列とする。

本課題では、文献で扱われている $Ax \geq b$ の形式に合わせるため、

$$Ax \leq b \iff (-A)x \geq (-b)$$

と左右反転し、 $\tilde{A} = -A$, $\tilde{b} = -b$ を用いて

$$\tilde{A}x \geq \tilde{b}$$

として以下を進める（記号の簡略化のため、再び A, b と書く）。

制約 $Ax \geq b$ に対し、スラック変数 $y \geq 0$ を導入すると、

$$Ax - y - b = 0$$

と書ける。これに対する KKT 条件は

$$\begin{cases} Gx - A^\top \lambda + c = 0, \\ Ax - y - b = 0, \\ y_i \lambda_i = 0 \quad (i = 1, \dots, m), \\ y \geq 0, \lambda \geq 0 \end{cases}$$

である。問題は凸であるため、これらの条件は必要十分である。

相補性条件 $y_i \lambda_i = 0$ は境界条件であり直接扱いにくいため、補完性の平均尺度

$$\mu = \frac{y^\top \lambda}{m}$$

を導入し、摂動 KKT 系

$$F(x, y, \lambda; \sigma\mu) = \begin{pmatrix} Gx - A^\top \lambda + c \\ Ax - y - b \\ Y\Lambda e - \sigma\mu e \end{pmatrix} = 0$$

を考える。ここで $Y = \text{diag}(y_1, \dots, y_m)$, $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$, $e = (1, \dots, 1)^\top$, $\sigma \in (0, 1)$ は固定定数である。 $\sigma\mu > 0$ の解は central path を成し、 $\sigma\mu \rightarrow 0$ により元の KKT 解（最適解）に収束する。

現在の反復点 $z = (x, y, \lambda)$ において、Newton 法により

$$F(z + \Delta z) \approx F(z) + J_F(z)\Delta z = 0$$

を解く。ヤコビ行列は

$$J_F(z) = \begin{pmatrix} G & 0 & -A^\top \\ A & -I & 0 \\ 0 & \Lambda & Y \end{pmatrix}$$

であり、Newton 方程式は

$$\begin{pmatrix} G & 0 & -A^\top \\ A & -I & 0 \\ 0 & 0 & Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r_d \\ -r_p \\ -\Lambda Y e + \sigma\mu e \end{pmatrix}$$

となる。ここで

$$r_d = Gx - A^\top \lambda + c, \quad r_p = Ax - y - b$$

はそれぞれ双対残差および主残差である。

得られた方向に対して

$$(x^+, y^+, \lambda^+) = (x, y, \lambda) + \alpha(\Delta x, \Delta y, \Delta \lambda)$$

と更新する。ただし $y^+ > 0$, $\lambda^+ > 0$ を保つように $\alpha \in (0, 1]$ を選ぶ。

以上を反復し、 $\|r_p\|$, $\|r_d\|$, μ が十分小さくなった時点で停止する。凸性より、停止点 x は元の制約 $Ax \leq b$ を満たす二次計画問題の最適解である。

結論

付録 A ソースコード

コード作成、レポート作成の一部に GitHub Copilot を使用した。

A.1 課題 15 のコード

```
1 #!/usr/bin/env python
2 # -*- coding: utf-8 -*-
3
4 import numpy as np
5 import matplotlib.pyplot as plt
6
7 # -----
8 # 課題 15: 関数の定義
9 #  $f(x) = x^3 + 2x^2 - 5x - 6$ 
10 # -----
11
12 def f(x):
13     return x**3 + 2*x**2 - 5*x - 6
14
15 def df(x):
16     """ $f(x)$  の導関数:  $f'(x) = 3x^2 + 4x - 5$ """
17     return 3*x**2 + 4*x - 5
18
19
20 # -----
21 # (a) グラフ描画
22 # -----
23
24 def plot_function():
25     x = np.linspace(-10, 10, 2000)
26     y = f(x)
27
28     plt.figure()
29     plt.plot(x, y)
30     plt.axhline(0, color="black", linewidth=0.8) # x軸
31     plt.axvline(0, color="black", linewidth=0.8) # y軸
32     plt.xlim(-10, 10)
33     plt.ylim(-10, 10)
34     plt.xlabel("x")
35     plt.ylabel("f(x)")
36     plt.title("Graph of  $f(x) = x^3 + 2x^2 - 5x - 6$ ")
37     plt.grid(True)
38     plt.savefig("task15.png")
39     plt.show()
40
41
42 # -----
43 # (b) 二分法
44 # -----
45
46 def bisection(f, a, b, eps=1e-10, max_iter=1000):
47     """[a, b] で二分法により  $f(x) = 0$  の解を求める。
48      $f(a)$  と  $f(b)$  の符号は異なることが前提。
49     """
50     fa = f(a)
51     fb = f(b)
52     if fa * fb > 0:
53         raise ValueError("f(a) と f(b) の符号が同じです: a={}, b={}".format(a, b))
54
```

```

55     for _ in range(max_iter):
56         c = 0.5 * (a + b)
57         fc = f(c)
58
59         if abs(fc) <= eps or 0.5 * (b - a) < eps:
60             return c
61
62         # 符号でどちらの区間を残すか決める
63         if fa * fc < 0:
64             b = c
65             fb = fc
66         else:
67             a = c
68             fa = fc
69
70         # 最大反復に達した場合
71     return 0.5 * (a + b)
72
73
74 def solve_with_bisection():
75     # グラフから零点が -3, -1, 2 付近にあることが分かるので
76     # それを挟む区間を手で指定する
77     intervals = [
78         (-4.0, -2.0),    # -3 付近
79         (-2.0, 0.0),    # -1 付近
80         (1.0, 3.0),    # 2 付近
81     ]
82
83     roots = []
84     for (a, b) in intervals:
85         r = bisection(f, a, b)
86         roots.append(r)
87     return roots
88
89
90 # -----
91 # (c) ニュートン法
92 # -----
93
94 def newton(f, df, x0, eps=1e-10, max_iter=1000):
95     """ニュートン法:  $f(x) = 0$  の解を初期値  $x_0$  から探索."""
96     x = x0
97     for _ in range(max_iter):
98         fx = f(x)
99         dfx = df(x)
100
101        if abs(fx) <= eps:
102            return x
103
104        if dfx == 0:
105            # 導関数が 0 になると更新できない
106            raise ZeroDivisionError("f'(x) = 0 となったため打ち切り (x={})".format(x))
107
108        x = x - fx / dfx
109
110    return x  # 収束しなかった場合は最後の値を返す
111
112

```

```

113 def solve_with_newton():
114     # グラフから零点が -3, -1, 2 付近にあることを利用
115     initial_points = [-2.5, -0.5, 1.5]
116     roots = []
117     for x0 in initial_points:
118         r = newton(f, df, x0)
119         roots.append(r)
120     return roots
121
122
123 # -----
124 # メイン
125 # -----
126
127 def main():
128     # (a) グラフ描画
129     plot_function()
130
131     # (b) 二分法
132     bisection_roots = solve_with_bisection()
133     print("Bisection method roots:")
134     for r in bisection_roots:
135         print(" x ≈ {:.10f}, f(x) ≈ {:.3e}".format(r, f(r)))
136
137     # (c) ニュートン法
138     newton_roots = solve_with_newton()
139     print("\nNewton method roots:")
140     for r in newton_roots:
141         print(" x0 -> root ≈ {:.10f}, f(x) ≈ {:.3e}".format(r, f(r)))
142
143
144 if __name__ == "__main__":
145     main()

```

A.2 課題 16 のコード

```

1 #!/usr/bin/env python
2 # -*- coding: utf-8 -*-
3
4 # 課題 16
5 # f(x) = (1/3)x^3 - x^2 - 3x + 5/3 の停留点を求める
6 # (a) 最急降下法 (x0 = 1/2, tk = 1/(k+1))
7 # (b) ニュートン法 (x0 = 5, tk = 1)
8
9 from __future__ import annotations
10
11 from dataclasses import dataclass
12 from pathlib import Path
13
14
15 def f(x):
16     """目的関数 f(x) = 1/3 x^3 - x^2 - 3x + 5/3"""
17     return (1.0 / 3.0) * x**3 - x**2 - 3.0 * x + 5.0 / 3.0
18
19
20 def df(x):

```

```

21     """1階微分 f'(x) = x^2 - 2x - 3"""
22     return x**2 - 2.0 * x - 3.0
23
24
25 def d2f(x):
26     """2階微分 f''(x) = 2x - 2"""
27     return 2.0 * x - 2.0
28
29
30 @dataclass(frozen=True)
31 class IterationHistory:
32     x: list[float]
33     f: list[float]
34     grad_abs: list[float]
35
36
37 # -----
38 # (a) 最急降下法
39 # -----
40
41
42 def steepest_descent(x0, eps=1e-8, max_iter=1000, *, return_history=False):
43     """
44         最急降下法 (1次元版)
45         x_{k+1} = x_k - t_k * f'(x_k)
46         t_k = 1 / (k+1)
47     """
48
49     x = x0
50     history_x = [float(x)]
51     history_f = [float(f(x))]
52     history_grad_abs = [float(abs(df(x)))]
53
54     for k in range(max_iter):
55         g = df(x) # 勾配 (1次元なので単なる導関数)
56         if abs(g) <= eps:
57             # 停留点に到達したとみなす
58             if return_history:
59                 return x, k, IterationHistory(history_x, history_f, history_grad_abs)
60             return x, k
61
62         t_k = 1.0 / (k + 1) # 指定どおりのステップ幅
63         x = x - t_k * g
64
65         history_x.append(float(x))
66         history_f.append(float(f(x)))
67         history_grad_abs.append(float(abs(df(x))))
68
69     # 最大反復に到達した場合
70     if return_history:
71         return x, max_iter, IterationHistory(history_x, history_f, history_grad_abs)
72     return x, max_iter
73
74 # -----
75 # (b) ニュートン法
76 # -----
77
78

```

```

79 | def newton_method(x0, eps=1e-8, max_iter=1000, *, return_history=False):
80 |
81 |     """
82 |     ニュートン法
83 |     x_{k+1} = x_k - t_k * f'(x_k) / f''(x_k)
84 |     ここでは t_k = 1
85 |     """
86 |
87 |     x = x0
88 |     history_x = [float(x)]
89 |     history_f = [float(f(x))]
90 |     history_grad_abs = [float(abs(df(x)))]
91 |
92 |     for k in range(max_iter):
93 |         g = df(x)
94 |         h = d2f(x)
95 |
96 |         if abs(g) <= eps:
97 |             # 停留点に到達したとみなす
98 |             if return_history:
99 |                 return x, k, IterationHistory(history_x, history_f, history_grad_abs)
100 |             return x, k
101 |
102 |         if h == 0.0:
103 |             raise ZeroDivisionError(f"f''(x) = 0 となったため更新できません (x = {x})")
104 |
105 |         t_k = 1.0 # 指定どおり常に1
106 |         x = x - t_k * g / h
107 |
108 |         history_x.append(float(x))
109 |         history_f.append(float(f(x)))
110 |         history_grad_abs.append(float(abs(df(x))))
111 |
112 |     if return_history:
113 |         return x, max_iter, IterationHistory(history_x, history_f, history_grad_abs)
114 |     return x, max_iter
115 |
116 | # -----
117 | # メイン
118 | # -----
119 |
120 | def main():
121 |     print("== (a) 最急降下法 ==")
122 |     x0_sd = 0.5 # 初期点 x0 = 1/2
123 |     x_star_sd, it_sd, hist_sd = steepest_descent(x0_sd, return_history=True)
124 |     print("初期値 x0 = {:.6f}".format(x0_sd))
125 |     print("近似停留点 x* ? {:.10f}".format(x_star_sd))
126 |     print("f'(x*) ? {:.3e}".format(df(x_star_sd)))
127 |     print("反復回数 k =", it_sd)
128 |     print()
129 |
130 |     print("== (b) ニュートン法 ==")
131 |     x0_nt = 5.0 # 初期点 x0 = 5
132 |     x_star_nt, it_nt, hist_nt = newton_method(x0_nt, return_history=True)
133 |     print("初期値 x0 = {:.6f}".format(x0_nt))
134 |     print("近似停留点 x* ? {:.10f}".format(x_star_nt))
135 |     print("f'(x*) ? {:.3e}".format(df(x_star_nt)))

```

```

136     print("反復回数 k =", it_nt)
137     print()
138
139     # y=f(x) 上で、反復点が収束していく様子を同一グラフにプロット
140     try:
141         import matplotlib.pyplot as plt
142     except ImportError:
143         print("matplotlib が見つからないため、プロットをスキップします。")
144         return
145
146     all_x = hist_sd.x + hist_nt.x
147     x_min = min(all_x)
148     x_max = max(all_x)
149     margin = 0.15 * (x_max - x_min) if x_max > x_min else 1.0
150     x_left = x_min - margin
151     x_right = x_max + margin
152
153     n = 600
154     xs = [x_left + (x_right - x_left) * i / n for i in range(n + 1)]
155     ys = [f(x) for x in xs]
156
157     plt.figure()
158     plt.plot(xs, ys, color="black", linewidth=1.5, label="f(x)")
159
160     plt.plot(hist_sd.x, hist_sd.f, marker="o", markersize=4, linewidth=1.2, label=
161               "Steepest descent")
162     plt.plot(hist_nt.x, hist_nt.f, marker="s", markersize=4, linewidth=1.2, label=
163               "Newton")
164
165     plt.scatter([hist_sd.x[0]], [hist_sd.f[0]], s=60, edgecolors="black", zorder=3)
166     plt.scatter([hist_nt.x[0]], [hist_nt.f[0]], s=60, edgecolors="black", zorder=3)
167
168     plt.xlabel("x")
169     plt.ylabel("f(x)")
170     plt.title("Iterations on y = f(x)")
171     plt.grid(True, linestyle="--", alpha=0.5)
172     plt.legend()
173
174     out_path = Path(__file__).with_name("task16.png")
175     plt.tight_layout()
176     plt.savefig(out_path, dpi=200)
177     print(f"プロットを保存しました: {out_path}")
178     import matplotlib
179
180
181
182     if __name__ == "__main__":
183         main()

```

A.3 課題 17 のコード

```

1 #!/usr/bin/env python
2 # -*- coding: utf-8 -*-
3

```

```

4 import numpy as np
5
6 # f(x) = x0^2 + exp(x0) + x1^4 + x1^2 - 2 x0 x1 + 3
7
8 def evalf(x):
9     """
10    目的関数の値 f(x) を計算する
11    x: np.array shape (2,)
12    """
13    x0, x1 = x[0], x[1]
14    f = x0**2 + np.exp(x0) + x1**4 + x1**2 - 2.0*x0*x1 + 3.0
15    return f
16
17 def evalg(x):
18     """
19    勾配ベクトル ∇f(x) を計算する
20    ∇f(x) = [ 2x0 + exp(x0) - 2x1,
21               4x1^3 + 2x1 - 2x0 ]
22    """
23    x0, x1 = x[0], x[1]
24    g0 = 2.0*x0 + np.exp(x0) - 2.0*x1
25    g1 = 4.0*x1**3 + 2.0*x1 - 2.0*x0
26    g = np.array([g0, g1])
27    return g
28
29 def evalh(x):
30     """
31    ヘッセ行列 ∇^2 f(x) を計算する
32    ∇^2 f(x) =
33    [[ 2 + exp(x0),      -2          ],
34     [      -2          , 12 x1^2 + 2   ]]
35    """
36    x0, x1 = x[0], x[1]
37    h00 = 2.0 + np.exp(x0)
38    h01 = -2.0
39    h10 = -2.0
40    h11 = 12.0*x1**2 + 2.0
41    H = np.array([[h00, h01],
42                  [h10, h11]])
43    return H
44
45 def main():
46     # 動作確認用
47     x = np.array([0.3, 5.0])
48     f = evalf(x)
49     g = evalg(x)
50     H = evalh(x)
51
52     print("x =", x)
53     print("f(x) =", f)
54     print("g(x) =", g)
55     print("H(x) =\n", H)
56
57 if __name__ == "__main__":
58     main()

```

A.4 課題 18 のコード

```
1 #!/usr/bin/env python
2 # -*- coding: utf-8 -*-
3
4 from __future__ import annotations
5
6 from dataclasses import dataclass
7 from pathlib import Path
8
9 import numpy as np
10
11 # =====
12 # 課題17の設定
13 # f(x) = x0^2 + exp(x0) + x1^4 + x1^2 - 2 x0 x1 + 3
14 # =====
15
16
17 def evalf(x):
18     """
19     目的関数 f(x) を計算する
20     x: np.array shape (2,)
21     """
22     x0, x1 = x[0], x[1]
23     f = x0**2 + np.exp(x0) + x1**4 + x1**2 - 2.0 * x0 * x1 + 3.0
24     return f
25
26
27 def evalg(x):
28     """
29     勾配ベクトル ∇f(x) を計算する
30     ∇f(x) = [ 2x0 + exp(x0) - 2x1,
31               4x1^3 + 2x1 - 2x0 ]
32     """
33     x0, x1 = x[0], x[1]
34     g0 = 2.0 * x0 + np.exp(x0) - 2.0 * x1
35     g1 = 4.0 * x1**3 + 2.0 * x1 - 2.0 * x0
36     return np.array([g0, g1])
37
38
39 def evalh(x):
40     """
41     ハッセ行列 ∇^2 f(x) を計算する
42     ∇^2 f(x) =
43     [[ 2 + exp(x0),      -2          ],
44      [-2            , 12 x1^2 + 2   ]]
45     """
46     x0, x1 = x[0], x[1]
47     h00 = 2.0 + np.exp(x0)
48     h01 = -2.0
49     h10 = -2.0
50     h11 = 12.0 * x1**2 + 2.0
51     return np.array([[h00, h01], [h10, h11]])
52
53
54 @dataclass(frozen=True)
```

```

55  class IterationHistory2D:
56      x: np.ndarray # shape (n, 2)
57      f: np.ndarray # shape (n,)
58
59
60  # =====
61  # バックトラック法（共通で使う）
62  # =====
63
64
65  def backtracking(xk, dk, evalf, evalg, t_init=1.0, rho=0.5, xi=1e-4):
66      """
67          バックトラック法（アルミホ条件）
68          与えられた点 xk と方向 dk に対してステップ幅 t を返す。
69      """
70      t = t_init
71      fk = evalf(xk)
72      gk = evalg(xk)
73      # アルミホ条件: f(xk + t dk) <= fk + xi * t * np.dot(dk, gk)
74      while True:
75          x_new = xk + t * dk
76          if evalf(x_new) <= fk + xi * t * np.dot(dk, gk):
77              break
78          t *= rho
79      return t
80
81
82  # =====
83  # (a) バックトラック法付き最急降下法
84  # =====
85
86
87  def steepest_descent_bt(
88      x0,
89      evalf,
90      evalg,
91      eps=1e-6,
92      max_iter=1000,
93      xi=1e-4,
94      rho=0.5,
95      t_init=1.0,
96      *,
97      return_history=False,
98  ):
99      """
100         バックトラック法付き最急降下法
101         x_{k+1} = x_k + t_k d_k, d_k = -\nabla f(x_k)
102     """
103     x = x0.copy()
104     history_x = [x.copy()]
105     history_f = [float(evalf(x))]
106
107     for k in range(max_iter):
108         g = evalg(x)
109         norm_g = np.linalg.norm(g)
110         if norm_g <= eps:
111             if return_history:

```

```

112         hist = IterationHistory2D(np.stack(history_x, axis=0), np.array(
113             history_f))
114         return x, evalf(x), k, hist
115     return x, evalf(x), k
116
117     dk = -g
118     tk = backtracking(x, dk, evalf, evalg, t_init=t_init, rho=rho, xi=xi)
119     x = x + tk * dk
120
121     history_x.append(x.copy())
122     history_f.append(float(evalf(x)))
123
124     if return_history:
125         hist = IterationHistory2D(np.stack(history_x, axis=0), np.array(history_f))
126         return x, evalf(x), max_iter, hist
127     return x, evalf(x), max_iter
128
129 # =====
130 # (b) バックトラック法付きニュートン法
131 # =====
132
133
134 def newton_bt(
135     x0,
136     evalf,
137     evalg,
138     evalh,
139     eps=1e-6,
140     max_iter=1000,
141     xi=1e-4,
142     rho=0.5,
143     t_init=1.0,
144     *,
145     return_history=False,
146 ):
147     """
148     バックトラック法付きニュートン法
149     d_k はハッセ行列を用いて  $\nabla^2 f(x_k) d_k = -\nabla f(x_k)$  を解く
150     """
151     x = x0.copy()
152     history_x = [x.copy()]
153     history_f = [float(evalf(x))]
154
155     for k in range(max_iter):
156         g = evalg(x)
157         norm_g = np.linalg.norm(g)
158         if norm_g <= eps:
159             if return_history:
160                 hist = IterationHistory2D(np.stack(history_x, axis=0), np.array(
161                     history_f))
162                 return x, evalf(x), k, hist
163             return x, evalf(x), k
164
165         H = evalh(x)
166         # ニュートン方向を解く:  $H d = -g$ 
167         try:
168             dk = np.linalg.solve(H, -g)

```

```

168     except np.linalg.LinAlgError:
169         break
170
171     tk = backtracking(x, dk, evalf, evalg, t_init=t_init, rho=rho, xi=xi)
172     x = x + tk * dk
173
174     history_x.append(x.copy())
175     history_f.append(float(evalf(x)))
176
177     if return_history:
178         hist = IterationHistory2D(np.stack(history_x, axis=0), np.array(history_f))
179         return x, evalf(x), max_iter, hist
180     return x, evalf(x), max_iter
181
182
183 # =====
184 # メイン
185 # =====
186
187
188 def main():
189     # 共通パラメータ（課題文指定）
190     xi = 1e-4
191     rho = 0.5
192     t_init = 1.0
193     x0 = np.array([1.0, 1.0])  # 初期点 (1, 1)^T
194
195     print("初期点 x0 =", x0)
196
197     # (a) 最急降下法
198     print("\n==== (a) バックトラック法付き最急降下法 ===")
199     x_sd, f_sd, k_sd, hist_sd = steepest_descent_bt(
200         x0,
201         evalf,
202         evalg,
203         eps=1e-6,
204         max_iter=1000,
205         xi=xi,
206         rho=rho,
207         t_init=t_init,
208         return_history=True,
209     )
210     print("最適解近似 x* ?", x_sd)
211     print("最適値近似 f(x*) ?", f_sd)
212     print("反復回数 =", k_sd)
213
214     # (b) ニュートン法
215     print("\n==== (b) バックトラック法付きニュートン法 ===")
216     x_nt, f_nt, k_nt, hist_nt = newton_bt(
217         x0,
218         evalf,
219         evalg,
220         evalh,
221         eps=1e-6,
222         max_iter=1000,
223         xi=xi,
224         rho=rho,
225         t_init=t_init,

```

```

226         return_history=True,
227     )
228     print("最適解近似 x* ?", x_nt)
229     print("最適値近似 f(x*) ?", f_nt)
230     print("反復回数 =", k_nt)
231
232     # x0-x1 平面に f の値を色で表示し、両手法の反復点の遷移を同一グラフに重ねる
233     try:
234         import matplotlib.pyplot as plt
235     except ImportError:
236         print("matplotlib が見つからないため、プロットをスキップします。")
237         return
238
239     all_points = np.vstack([hist_sd.x, hist_nt.x])
240     x0_min, x1_min = np.min(all_points, axis=0)
241     x0_max, x1_max = np.max(all_points, axis=0)
242
243     margin0 = 0.2 * (x0_max - x0_min) if x0_max > x0_min else 1.0
244     margin1 = 0.2 * (x1_max - x1_min) if x1_max > x1_min else 1.0
245     x0_left, x0_right = x0_min - margin0, x0_max + margin0
246     x1_bottom, x1_top = x1_min - margin1, x1_max + margin1
247
248     n = 250
249     grid_x0 = np.linspace(x0_left, x0_right, n)
250     grid_x1 = np.linspace(x1_bottom, x1_top, n)
251     X0, X1 = np.meshgrid(grid_x0, grid_x1)
252     F = X0**2 + np.exp(X0) + X1**4 + X1**2 - 2.0 * X0 * X1 + 3.0
253
254     plt.figure(figsize=(7, 6))
255     cf = plt.contourf(X0, X1, F, levels=60, cmap="viridis")
256     plt.contour(X0, X1, F, levels=20, colors="k", linewidths=0.4, alpha=0.35)
257     cbar = plt.colorbar(cf)
258     cbar.set_label("f(x0, x1)")
259
260     plt.plot(hist_sd.x[:, 0], hist_sd.x[:, 1], "-o", markersize=3.5, linewidth=1.2,
261             label="Steepest descent")
262     plt.plot(hist_nt.x[:, 0], hist_nt.x[:, 1], "-s", markersize=3.5, linewidth=1.2,
263             label="Newton")
264
265     plt.scatter([hist_sd.x[0, 0]], [hist_sd.x[0, 1]], s=80, c="white", edgecolors="black",
266                zorder=4)
267     plt.scatter([hist_nt.x[0, 0]], [hist_nt.x[0, 1]], s=80, c="white", edgecolors="black",
268                zorder=4)
269     plt.scatter([hist_sd.x[-1, 0]], [hist_sd.x[-1, 1]], s=110, marker="*", c="white",
270                 edgecolors="black", zorder=5)
271     plt.scatter([hist_nt.x[-1, 0]], [hist_nt.x[-1, 1]], s=110, marker="*", c="white",
272                 edgecolors="black", zorder=5)
273
274     plt.xlabel("x0")
275     plt.ylabel("x1")
276     plt.title("Optimization trajectories on x0-x1 plane")
277     plt.grid(True, linestyle="--", alpha=0.3)
278     plt.legend()
279
280     out_path = Path(__file__).with_name("task18.png")
281     plt.tight_layout()
282     plt.savefig(out_path, dpi=200)
283     print(f"プロットを保存しました: {out_path}")

```

```
278  
279     import matplotlib  
280  
281     if "agg" not in matplotlib.get_backend().lower():  
282         plt.show()  
283  
284  
285 if __name__ == "__main__":  
286     main()
```

参考文献

参考文献

- [1] 数理工学実験（2025 年度配布資料）.