1 4.1 導入

一般的な非線形最適化問題は次の 3 つに分類される

1. 一次元無制約問題
2. 多次元無制約問題
3. 多次元制約問題

一つ目の問題は最も簡単に解け、三つ目の問題が一番難しい。実際には多次元制約問題は通常多次元無制約問題に変形され、次に一次元無制約問題へと変形される。事実上多くの利用可能な非線形計画アルゴリズムは無制約の 1 変数関数の最小化に基づいている。それゆえ、効率的な多次元無制約最適化アルゴリズムと多次元制約最適化アルゴリズムを構築する際には、効率的な一次元最適化アルゴリズムが要求されることになっている。

$minimizeF = f(x)$ (f は一変数関数)

この問題は $f(x)$ がある範囲で単峰性関数である場合に解を持つ。つまり、$f(x)$ がある範囲 $[x_L \leq x \leq x_U]$ (x_L と x_U はそれぞれ最小点 $x*$ の下限と上限) で $f(x)$ が唯一の最小点を持つ場合、解を持つ。

一次元最適化法には一般的に二つの方法がある、即ち、探索法と近似法である。

探索法では x を含む $[x_L, x_U]$ の範囲を関数の評価にしたがって縮小していき $[x_{\{}L,k\}, x_{\{}U,k\}]$ なる充分に小さい範囲を得るまで縮小を繰り返す。最小点は $[x_{\{}L,k\}, x_{\{}U,k\}]$ の範囲の中間点に存在すると予想できる。これらの方法はあらゆる関数に適用でき、$f(x)$ の微分可能性は必要でない。

近似法では、低次の多項式の形の関数の近似が想定される。通常は 2 次や 3 次の多項式である。これは、初等微積分及び推定される近似値 x^* を用いる解析の時である。 $[x_L, x_U]$ の範囲はこのとき変形され、その作業は充分に正確な x^* の値を得るまで幾度も繰り返される、

これらの方法では、$f(x)$ は連続的微分可能である必要がある、つまり、$f(x) \in C^1$ ということである。

この章では次の 1 から 8 のいくつかの 1 次元の最適化のアプローチが考察されている。

1. 二分探索法
2. フィボナッチ探索
3. 黄金分割探索
4. 二次補間法
5. 三次補間法
6. Davies-Swann-Campey 法

1 から 3 は探索法であり、4,5 番目は近似法である、そして 6 番目は実用的かつ有用な、探索法と近似法を組み合わせた方法である。この章はさらに、Fletcher による非厳密直線探索と呼ばれる方法を扱う。この方法はいくつかの最適化法における計算量を減らすようなある重要な利点をもたらしている。

4.2 二分探索

$[x_L, x_U]$ の区間に最小値が存在すると考えられる単峰性関数について考える。この区間は不確実の区間と呼ばれる。$f(x)$ の最小点 x^* は, 十分に小さい区間が得られるまで漸次不確実の区間に帰着していくことにより位置付けられる。探索法では,$f(x)$ の適切な点での値を用いて最小点は記録される。

もし,$f(x)$ の値が $x_a \in (x_L, x_U)$ の単一点のみ分かる場合, 図 4.1(a) で描かれているように x^* の点は x_L から x_a または,x_a から x_U の範囲の中に一致しそうである。その結果として, 利用可能な情報は不確実な区間の帰着するのに十分ではない。しかしながら, もし $f(x)$ の値が 2 点分かれば, つまり x_a と x_b が分かれば、すぐに帰着は可能になる。それには 3 つの可能性があるだろう、いわゆる

- (a) $f(x_a)<f(x_b)$
- (b) $f(x_a)>f(x_b)$
- (c) $f(x_a)=f(x_b)$

(a) のケースでは x^* は $x_L<x^*Mx_a$ または $x_a<x^*<x_b$ の範囲にあるだろう、 すなわち、図 4.1a で示されるように、$x_L<x^*<x_b$ である。 $x_b<^*<x_U$ の可能性は明確に除外する、なぜならこの範囲は $f(x)$ が x_b の左右に一つずつ最小値を持つことを暗示するからである。。似たように、(b) のケースでは、図 4.1b で示されるように x^* は $x_a<x^*<x_b$ の範囲にあるはずだ。 (c) のケースでは、x^* は $x_a<x^*<x_b$ にあるはずだ、 すなわち図 4.1c で示されるように $x_L<x^*<x_b$ と $x_a<x^*<x_U$ の両方の不等式はともに除外するのに十分だからだ。

不確実な範囲を帰着していく基本的な戦略はいわゆる二分探索である。この方法では,$f(x)$ は十分小さな正の ϵ の下、$x_a=x_1-\epsilon/2$ と $x_b=x_1+\epsilon/2$ の 2 点で計算される。 このとき、$f(x_a)<f(x_b)$ か $f(x_a)>f(x_b)$ かによって x_L から $x_1+\epsilon/2$ の範囲か、$x_1-\epsilon/2$ から x_L の範囲かを選んで帰着できる。、そして $f(x_a)=f(x_b)$ の時、範囲は 2 点を端とする範囲に帰着できるだろう。もし $x_1=-x_L=x_U-x_1$ つまり、$x_1=(x_L+x_U)/2$ と仮定すると、不確実な範囲は即座に半分に帰着できる。同じ手順を帰着された範囲に繰り返すことができる、つまり、x_2 が帰着された範囲の中心の点に位置する場合など、$f(x)$ は $x_2-\epsilon/2$ と $x_2+\epsilon/2$ で計算することができる。例えば、もし二分法が図 4.2 の関数に適用されるとき、不確実な範囲は 4 回の反復で $0<x^*<1$ から $9/16+\epsilon/2<x^*<5/8-\epsilon/2$ に帰着される。それぞれの反復は不確実な範囲を半分の範囲に帰着し、また、従って k 回の反復で不確実な範囲の広さは $I_0=x_U-x_L$ としたとき $I_k=\frac{1}{2}^k I_0$ に帰着される。例えば、7 回の反復で不確実な範囲は 1%未満の大きさの範囲に帰着される。計算量の対応は各反復に 2 回の関数計算が必要になるとして、14 回の関数計算になるだろう。