連続最適化と凸解析

山下信雄

講義内容

1. 連続最適化問題
2. 数理最適化の諸概念
3. 凸解析

最適化による意思決定の構成要素

意思決定者：意思決定の主体

決定変数：意思決定者の決めることができる変数

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in R^n$$

目的関数：意思決定者の評価基準を数値化する

決定変数の関数

$$f : R^n \to R$$

制約条件：決定変数がみたすべき条件.

制約関数 $: c_i : R^n \to R$

等式制約 $: c_i(x) = 0,$ 不等式制約 ： $c_i(x) \leq 0$

連続最適化問題

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x) \\
\text{s.t.} \quad & c_i(x) = 0, \ i = 1, \ldots, \ell \\
& c_j(x) \leq 0, \ i = \ell + 1, \ldots, m
\end{aligned}
$$

minimize (min): ～を最小化せよ

maximize (max): ～を最大化せよ

subject to (s. t.): ～の条件のもとで

連続最適化問題の分類

- 目的関数、制約関数の性質によって，問題の性質，難しさが違う．

- どんな最適化問題でも解ける万能なアルゴリズムは存在しない！

- 理論が成立するにはいくつかの仮定が必要．その仮定を満たす問題とそうでない問題がある．

<u>連続最適化問題を分類する</u>

制約なし最小化問題

制約条件がない問題

$$
\min f(x) \quad \text{s.t.} \quad x \in R^n
$$

応用例：　最小二乗問題

解法：　最急降下法，準ニュートン法，ニュートン法

線形計画問題

$$
\begin{aligned}
\min\ & c^\top x \\
\text{s.t.}\ \ & Ax = b \\
& x \geq 0
\end{aligned}
$$

ただし、$A \in R^{m \times n},\ c \in R^n,\ b \in R^m$

応用例：　生産計画，ネットワーク計画

解法：　単体法，内点法

2次計画問題

$$
\begin{aligned}
\min\ & x^\top Q x + c^\top x \\
\text{s.t.}\ & Ax = b \\
& x \geq 0
\end{aligned}
$$

応用例：　ポートフォリオ最適化，サポートベクトルマシン
解法：　内点法，双対法

凸最適化問題

目的関数が凸関数、実行可能集合が凸集合の最適化問題

$$\min \ f(x)$$
$$\text{s.t.} \quad x \in S$$

ここで f が凸関数、S が凸集合

応用例：線形計画問題，凸２次計画問題

（あるクラスの）最尤推定

解法：内点法，逐次２次計画法

非線形方程式と最小二乗問題

非線形方程式:

$$F(x) = 0$$

ただし, $F : R^n \to R^m$

最小二乗問題:

$$\begin{aligned} &\min \quad \phi(x) \\ &\text{s. t.} \quad x \in R^n \end{aligned}$$

ただし, $\phi(x) = \dfrac{1}{2}\|F(x)\|^2$

その他の最適化モデル

- 組合せ最適化(combinatorial optimization)
- 半無限計画(semi-infinite programming)
- 多目的最適化(multi-objective optimization)
- 変分問題(variational problem)
- 制約プログラミング(constraint programming)
- 均衡問題(equilibrium problem)
- etc

講義内容

1. 連続最適化問題
2. 数理最適化の諸概念
3. 凸解析

数理最適化の諸概念

実行可能解:制約条件をみたした決定変数

実行可能領域:実行可能解の集合

$$S = \left\{ x \in R^n \,\middle|\, \begin{array}{l} c_i(x) = 0, i = 1, \ldots, \ell \\ c_i(x) \leq 0, i = \ell + 1, \ldots, m \end{array} \right\}$$

最適解(最小解, 最大解):数理最適化問題の答え.

最適解の諸概念

最適解(最小解，最大解)：最適化問題の答え.

- **最小解**
  - **大域的最小解**　$f(x) \geq f(x^*) \ \ \forall x \in S$ となる $x^* \in S$
  - **局所的最小解**　$\hat{x}$ のそばでは $f(x) \geq f(\hat{x}) \ \ \forall x \in S$ となる $\hat{x} \in S$

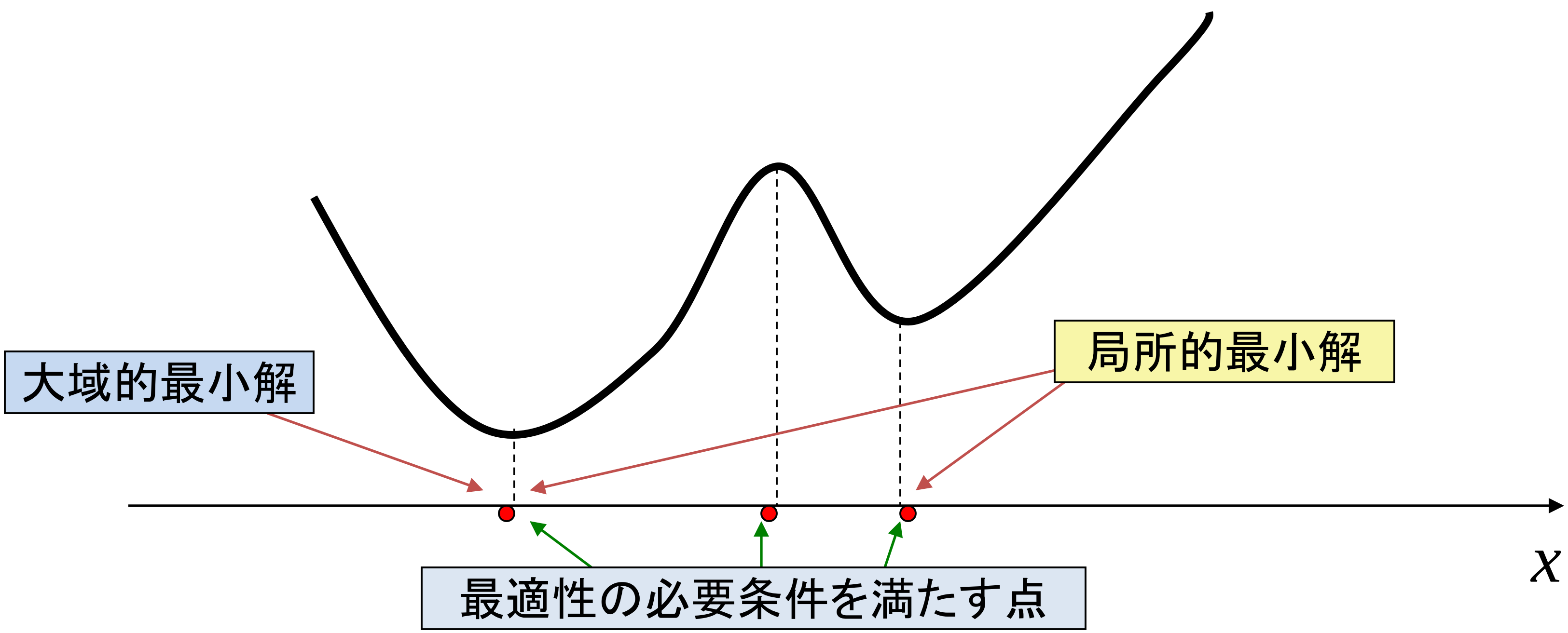
$$\exists \varepsilon > 0 \ \ \text{such that} \ \ f(x) \geq f(\hat{x}) \ \ \forall x \in S \cap \left\{ x \,\middle|\, \|x - \hat{x}\| \leq \varepsilon \right\}$$

最適解の諸概念

最適性の条件：

１点の微分や目的関数値などの情報から、その点が最小解であるかどうかを判別する条件　（例：$f'(x) = 0$　）

制約なし最小化問題



講義内容

1. 連続最適化問題

2. 数理最適化の諸概念

3. 凸解析

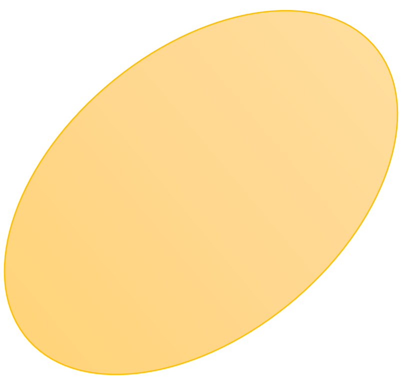
凸解析と最適化

- 凸解析は凸集合や凸関数を扱う数学の1分野
- 凸最適化問題は理論的にも応用的にも重要
  - 様々な応用問題がある.
  - 最適性の必要条件をみたす点が大域的最適解
  - 双対定理が成り立つ.
  - 内点法などで効率的に解くことができる.

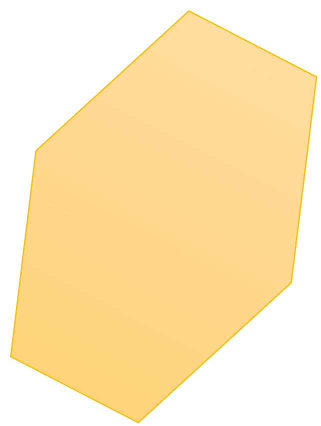
凸集合

任意の $x, y \in S$ と $\alpha \in [0,1]$ に対して

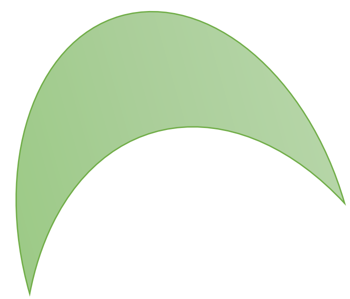
$$\alpha x + (1-\alpha) y \in S$$



凸集合



凸集合



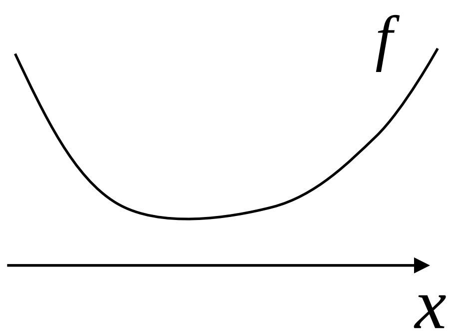
凸集合でない

凸関数　$f: S \to R$　（S は凸集合）

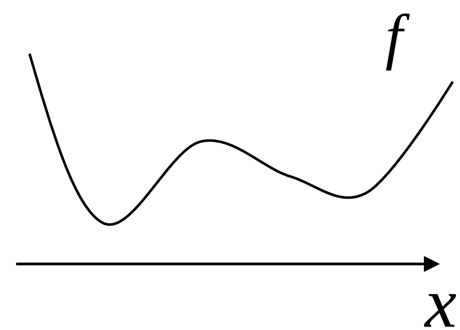
任意の $x, y \in S$ と $\alpha \in [0,1]$ に対して

$$f(\alpha x + (1-\alpha) y) \le \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$$

が成り立つとき f を S 上で凸関数という.

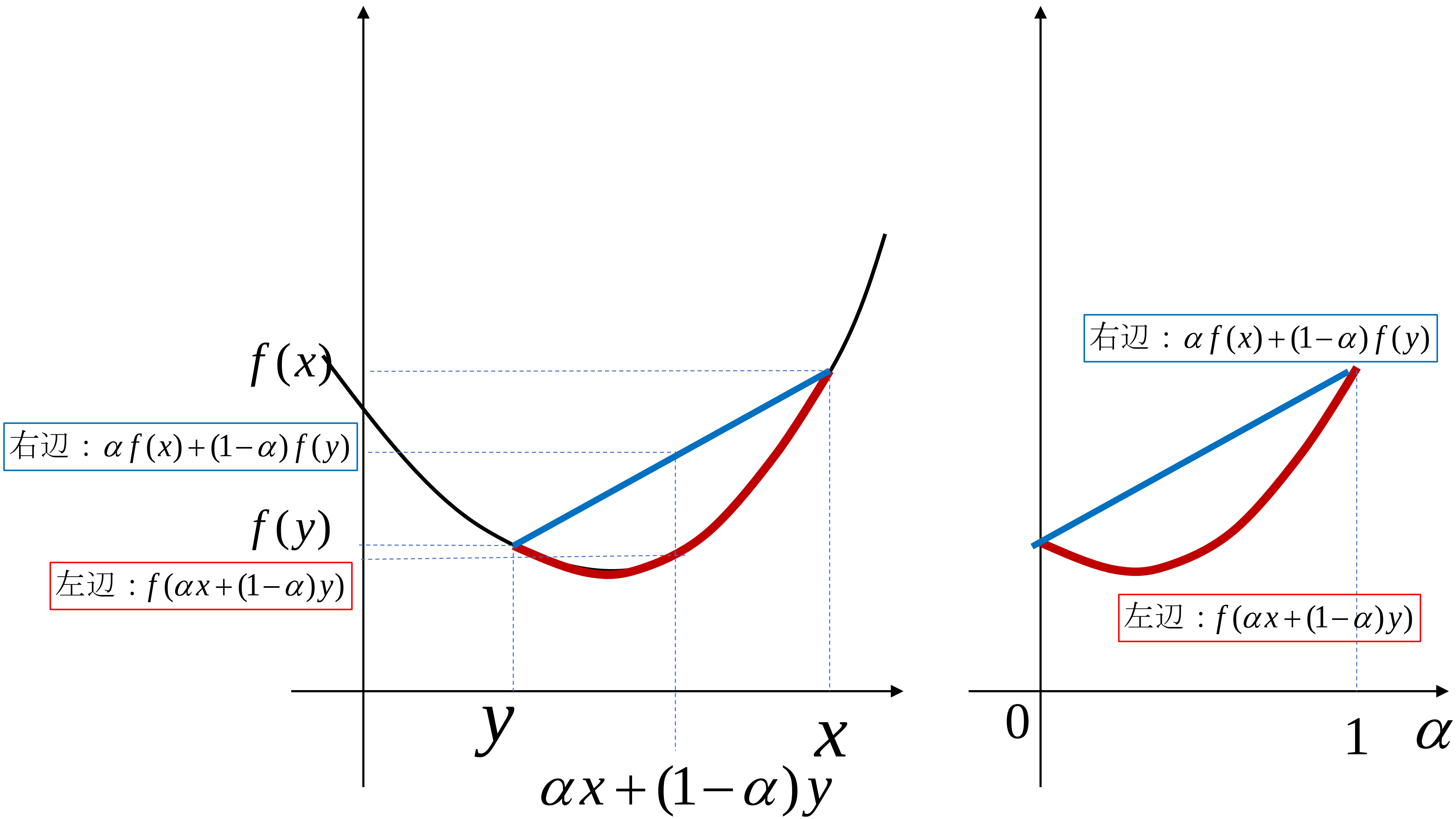


凸関数



凸関数でない

凸関数　$f(\alpha x+(1-\alpha)y)\leq\alpha f(x)+(1-\alpha)f(y)$



凸関数の例

- 一次関数： $f(x) = a^\top x + b = \sum_{i=1}^{n} a_i x_i + b$

  $f(\alpha x + (1-\alpha) y) = a^\top (\alpha x + (1-\alpha) y) + b = \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y)$

- 指数関数
- 凸２次関数 $x^\top Q x$　（ただし Q は半正定値行列）
- 凸関数の和
- 凸関数と正数の積
- 複数の凸関数の最大 $\max\{ f_1(x), f_2(x), \cdots, f_m(x) \}$

凸集合の例

(i) 凸集合 S_i の共通集合 $\bigcap_i S_i$

$x, y \in \cap S_i$ より，$x, y \in S_i$

$\alpha \in [0,1]$ に対して $\alpha x + (1-\alpha) y \in S_i$

よって， $\alpha x + (1-\alpha) y \in \cap S_i$

(ii) 凸関数 c の不等式を満たす集合 $\left\{ x \middle| c(x) \le 0 \right\}$

$c(x) \le 0, c(y) \le 0, \alpha \in [0,1]$ とすると

$$c(\alpha x + (1-\alpha) y) \le \alpha c(x) + (1-\alpha) c(y) \le 0$$

凸集合の例

(iii) 一次関数 c の等式を満たす集合 $\{x \mid c(x)=0\}$

$c(x)=0, c(y)=0, \alpha \in [0,1]$ とすると

$$c(\alpha x+(1-\alpha)y)=\alpha c(x)+(1-\alpha)c(y)=0$$

定理： $c_i, i=1,\ldots,\ell$ を一次関数，$c_i, i=\ell+1,\ldots,m$ を凸関数とする．このとき

$$S=\left\{x \in R^n \,\middle|\, \begin{array}{l} c_i(x)=0, i=1,\ldots,\ell \\ c_i(x)\le 0, i=\ell+1,\ldots,m \end{array}\right\}$$

は凸集合.

⇒　線形計画問題は凸最適化問題

凸最適化の局所最適解

定理
凸最適化問題において，局所的最適解は大域的最適解

証明．(背理法)　$x^* \in S$ を局所的最適解ではあるが，大域的最適解でないとする．このとき，

$$f(y^*) < f(x^*)$$

をみたす $y^* \in S$ が存在する．

いま，

$$x(\alpha) = \alpha y^* + (1-\alpha)x^*,\ \alpha \in (0,1]$$

とする．

証明のつづき

$\alpha \in (0,1]$ のとき，実行可能領域 S が凸集合であることより，

$$x(\alpha) = \alpha y^* + (1-\alpha)x^* \in S$$

実行可能解

さらに，目的関数 f が凸関数であることから

$$\begin{aligned} f(x(\alpha)) &= f(\alpha y^* + (1-\alpha)x^*) \\ &\leq \alpha f(y^*) + (1-\alpha) f(x^*) \\ &< \alpha f(x^*) + (1-\alpha) f(x^*) = f(x^*) \end{aligned}$$

つまり，任意の $\alpha \in (0,1]$ に対して $f(x(\alpha)) < f(x^*)$

$\alpha \to 0$ とすると $x(\alpha) \to x^*$ となる．

これは x^* が局所的最適解であることに矛盾する．

凸最適化の最適解の集合

定理
凸最適化問題の最適解の集合 X^* は凸集合

証明.　$x^*, y^* \in X^*, \alpha \in [0,1]$　とする.

$x^*, y^* \in S$ であり,　S は凸集合であるから

$$\alpha x^* + (1-\alpha) y^* \in S$$

実行可能解

さらに,　目的関数が凸関数であることから

$$f(\alpha x^* + (1-\alpha) y^*) \le \alpha f(x^*) + (1-\alpha) f(y^*) = f(x^*)$$

よって,　$\alpha x^* + (1-\alpha) y^* \in X^*$