クレジット：
Mathematics and Informatics Center 文科系のための線形代数・解析Ⅱ
2020 藤堂 眞治・松尾 泰・藤原 毅夫

多変数関数に対する制約条件なしの最適化法

目的関数 $f(\mathbf{x})$ が多変数関数であるときには，変数をベクトル表示で $\mathbf{x}$ と表す.

$f(\mathbf{x})$ は $\mathbf{x}^j$ の周りで任意の回数だけ偏微分可能であるとし

$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^j$ ，$\mathbf{p} = \nabla f(\mathbf{x}^j)$，$H = \nabla^2 f(\mathbf{x}^j)$

とおく. $\nabla f(\mathbf{x}) = (\dfrac{\partial f}{\partial x_1}, \dfrac{\partial f}{\partial x_2}, \cdots)$ は勾配ベクトルであり，$H = \nabla^2 f(\mathbf{x})$ はヘッセ行列.

$f(\mathbf{x})$ が最低値を持つ条件（H が正定値行列）を満たすとする.

目的関数 $f(\mathbf{x})$ を $\mathbf{x}^j$ の周りでテイラー展開し，$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^j$ の2次で止めると

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^j) + {}^t\mathbf{p}\ \boldsymbol{\xi} + \frac{1}{2}\ {}^t\boldsymbol{\xi} H \boldsymbol{\xi} = f(\mathbf{x}_k) - \frac{1}{2}{}^t\mathbf{p} H^{-1}\mathbf{p} + \frac{1}{2}{}^t(\boldsymbol{\xi} + H^{-1}\mathbf{p}) H (\boldsymbol{\xi} + H^{-1}\mathbf{p})$$

となる. この式は $\boldsymbol{\xi} + H^{-1}\mathbf{p} = \mathbf{0}$ のときに，$f(\mathbf{x})$ が極値をとる.

これは書き直し

$$\boldsymbol{\xi} = -(\nabla^2 f(\mathbf{x}_k))^{-1}\ (\nabla f(\mathbf{x}^j))$$

である. こうしてより良い近似解 (2次形式の最小点)

$$\mathbf{x}^{j+1} = \mathbf{x}^j + \boldsymbol{\xi}$$

が得られる.

これを繰り返して，目的関数の真の極値が得られる.

例

$f(x, y) = x^2 + xy + y^2 + \exp(x^2 + y)$

として，最小値探索の例を挙げておこう.

ここでは勾配およびヘッセ行列を求めるコマンド gradient，hessian を用いる.

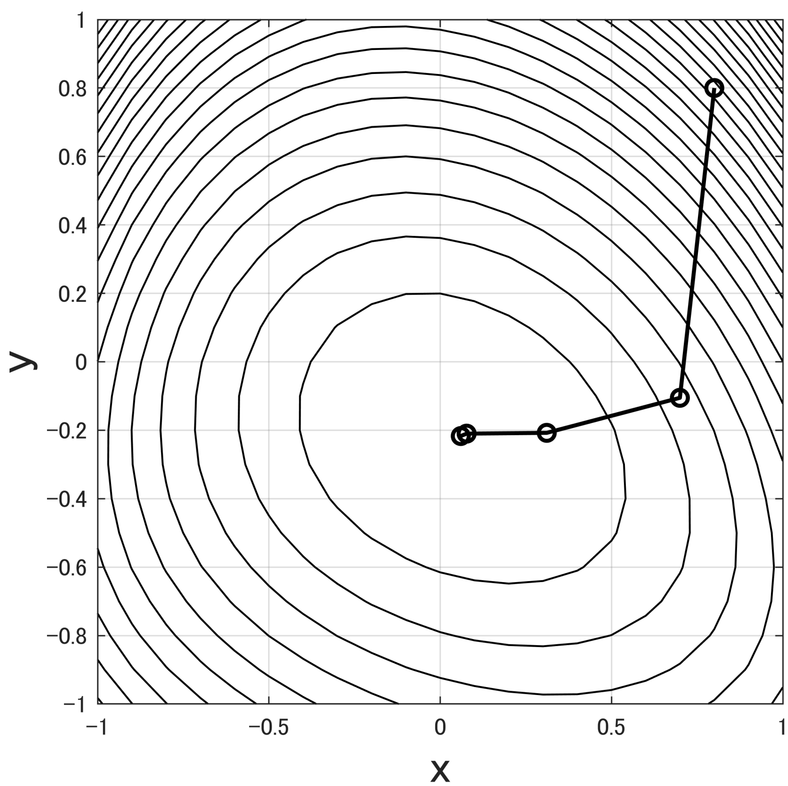
```
ite=zeros(20,3);
syms f(x,y)
f(x,y) = x.^2+x.*y + 2*y.^2+exp(x.^2+y);
gr=gradient(f,[x,y]);
He=hessian(f,[x,y]);
x0=0.8;y0=0.8;Dev=1;
for n=1:20
 if Dev>10^(-7)
 xi0=double(-He(x0,y0)\gr(x0,y0));
```

```
 x=x0+xi0(1);y=y0+xi0(2);
 f0=f(x,y);Dev=sqrt((x-x0).^2+(y-y0).^2);
 ite(n,1)=n;ite(n,2)=double(x0);ite(n,3)=double(y0);
 ite(n,4)=Dev;ite(n,5)=f0;
 x0=double(x);y0=double(y);nmax=n;
 end
end
ite(1:nmax,:)
```

```
ans = 6×5
    1.0000    0.8000    0.8000    0.9108    1.9062
    2.0000    0.6995   -0.1052    0.4019    1.0133
    3.0000    0.3109   -0.2076    0.2338    0.8934
    4.0000    0.0771   -0.2100    0.0184    0.8926
    5.0000    0.0601   -0.2169    0.0001    0.8926
    6.0000    0.0600   -0.2170    0.0000    0.8926
```

計算結果を図に描いてみる.

```
[x,y]=meshgrid(-1:0.1:1);
f= x.^2+x.*y+2*y.^2+exp(x.^2+y);
contour(x,y,f,25,'-k','LineWidth',0.7);hold on;grid on
plot(ite(1:nmax,2),ite(1:nmax,3),'-ko','Linewidth',1.5);grid on
daspect([1 1 1]);xlabel('x','FontSize',18);ylabel('y','FontSize',18);
```



課題

（1）評価関数 $f(x) = x^4 + 2x^2y^2 + y^4 + \exp(x^2 - y^3)$ の最低値とそのときの x, y の値を見つけなさい.

（２）最小値探査のコマンドにはgradient, hessian を用いず，自分で作りなさい.

（３）最低値を見出すコマンドとして，fminunc，fminsearch がある．これを用いて上の問題を計算してみなさい.