6.　勾配法のプログラミング

田中雅博

最適化プログラミング、教科書 pp.79–85

多変数関数の極値を数値的に求める代表的な手法その 1 。

1　1 変数の関数

$f = f(x)$ の最大値を求める問題を考える。
解析的に求めるには、$f'(x) = 0$ になるような x を求める必要がある。

1.1　例 1

$$f(x) = -x^2 - 3x + 6$$

これを解くために、

$$f'(x) = -2x - 3 = 0$$

とすると、$x = -\frac{3}{2}$ を得る。このとき、極値（$f''(x) = -2$ より、極大値）は、

$$f(-\frac{3}{2}) = \frac{33}{4}$$

である。

1.2　例 2

では、

$$f(x) = \sin 4x - x^2 + 2x$$

ではどうだろうか。

$$f'(x) = 4\cos 4x - 2x + 2 = 0$$

を解かなければならないが、きれいな形では出てこない。こういう問題での解を数値的に求める（式を求めるのではなく、解となる x および $f(x)$ の値を求める）のがここのテーマである。

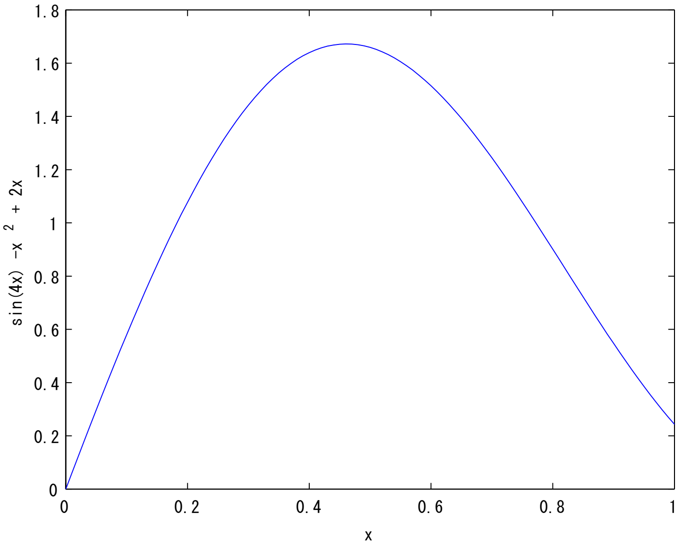

図 1: 関数 $f(x)$ のイメージ

1.3　考え方

関数 $f(x)$ をプロットすると 2 のようになる（ただし、普通は計算する際に、関数の形は見ていない)。

勾配法とは、「関数 $f(x)$ は考えている領域で $f'(x) = 0$ となる x が 1 つしかない」ということがわかっているなら、次のようにして数値的に計算できる。(教科書 p.79)

いま、$0 \leq x \leq 1$ で極値は 1 つしかないから、その範囲では勾配法が適用できる。

procedure search(f(x),f'(x))
【最大化】

1. x の初期値を与え、$h \leftarrow h_0$ とする。
2. 次のように置く。
$$h \leftarrow \mathrm{sgn}(f'(x))|h|, \quad X \leftarrow x, \quad X' \leftarrow x + h$$
sgn(·) は、括弧内の値の符号が正なら 1、負なら -1。つまり、ここでは、$f'(x) > 0$ なら h の値を正、$f'(x) < 0$ なら h の値を負にする。大きさは個々では変えない。

   X は現在の値、X' は h ほど変化させた値。
3. もし $f(x) < f(X')$ であれば（X' の方が良い場合)、次の計算を行う。
   (a) $f(x) \geq f(X')$ となるまで次の計算を繰り返す。
$$h \leftarrow 2h, \quad X \leftarrow X', \quad X' \leftarrow X + h$$
   (b) $x \leftarrow X, h \leftarrow h/2$ と置く。
4. そうでなければ（X' の方が悪い場合)、次の計算を行う。

(a) $f(X) \leq f(X')$ となるまで、次の計算を繰り返す。

$$h \leftarrow \frac{h}{2}, \quad X' \leftarrow X' - h$$

(b) $x \leftarrow X', h \leftarrow 2h$ と置く。

5. ステップ 2 に戻り、これを $|f'(x)| \leq \epsilon$ となるまで繰り返す。

6. 得られた x を返す。

これの MATLAB プログラムを示そう。関数 $f(x)$ を `rei6(x)`、その導関数 $f'(x)$ を `rei6d(x)` とする。

```
function f= rei6( x )
f = sin(x * 4) - x.^2 + 2 * x;
end

function df = rei6d( x )
df = 4 * cos(x * 4) - 2 * x + 2;
end

function x = search(x0)
epsilon = 0.0001;
h0 = 0.1;
h = h0;
x = x0;
%Step 2
while abs(rei6d(x)) > epsilon
    h = sign(rei6d(x)) * abs(h); %MATLAB の符号関数は sign
    X = x;
    Xprime = x + h;
    if rei6(X) < rei6(Xprime)
        while rei6(X) < rei6(Xprime)
            h = 2 * h;
            X = Xprime; %(X’ のこと)
            Xprime = X + h;
        end
        x = X;
        h = h / 2;
    else
        while rei6(X) > rei6(Xprime)
            h = h / 2;
            Xprime = Xprime - h;
        end
        x = Xprime;
        h = 2*h;
```

```
    end
end
end
```

計算する。

```
>> search(0.3)

ans =

    0.4609
```

最大値（極大値）は、

```
>> rei6(search(0.3))

ans =

    1.6724
```

と求まる。
この関数をもっと広い範囲で見てみよう。すると、

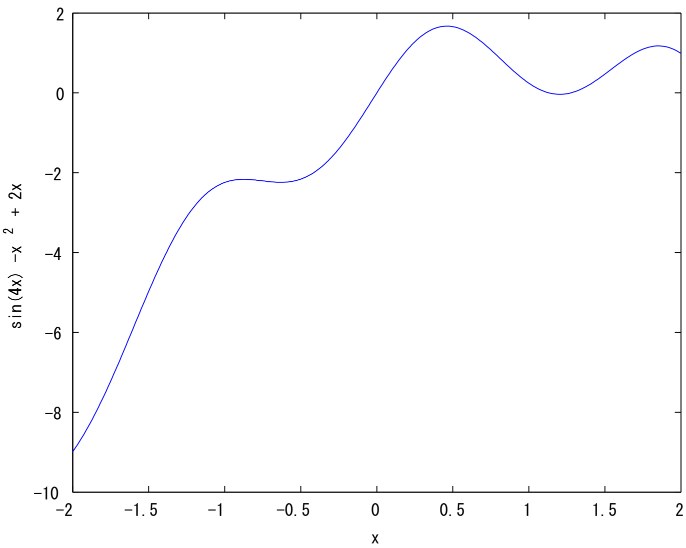

図 2: 関数 $f(x)$ のイメージ

これを見るとわかるように、極値はいくつかあり、それに従って、初期値によっては違うところに収束することが考えられる。アルゴリズムの特性上、必ずしもその初期点に対応する極大点に収束するとは限らず、別の極大点にいくこともある。

課題

1. $x = -2, -1.9, \cdots, 2$ の、0.1 刻みの値からそれぞれスタートして得られる極大値を求め、わかりやすく結果を示せ。
2. 1 の計算において、`epsilon`, `h0` の値を変えると、結果がどのように変わるか（あるいは変わらないか）。細かい数値を表示して終わりではなく、数値も示しながら、性質を述べよ。

提出物 MSWord で以下の内容を作成しプリントし、提出せよ。

- 学籍番号、氏名、課題出題日
- MATLAB プログラムリスト
- 描いた図形を張り込む
- 考え方、コメント
- 感想