

数理最適化への数式処理の一応用

～ 制約想定が不要な最適性条件の導出 ～

連続最適化および関連分野に関する夏季学校2024

大阪大学 庵 智幸

講演の概要

- **内容：制約想定が不要な代数的最適性条件の導出** [Iori and Ohtsuka 2020]

- **制約想定 (CQ)** : KKT条件が最適性必要条件となるための付加的な条件
- **代数的** : ここでは“方程式で書ける”ぐらいのイメージ
- 代数的な条件の導出には実行可能集合の数式による記述が必須
 - 幾何的対象
 - 代数的対象

- **理論的なツール：代数幾何学**

- 代数（多項式方程式）と幾何（解集合）の対応関係を調べる分野
- 解集合には方程式ではなく“**方程式の無限集合（イデアル）**”が対応
- イデアルを対象とする数式処理で最適性条件を導く

目次

- **講義 1 : 連続最適化問題の最適性条件**

- KKT条件とCQについて
- 既存のCQが不要な最適性条件 (FJ条件, ペナルティ関数法に基づく条件)

- **講義 2 : ペナルティ関数法と射影空間**

- **射影空間** : 線形空間に無限遠点を付加した空間
- ペナルティパラメータの極限計算を射影空間上で厳密に考慮

- **講義 3 : 代数幾何学による最適性条件の導出**

- 射影空間上の幾何学的な操作を代数計算で実現
- いくつかの例題の紹介

連続最適化問題の最適性条件

問題設定

- 制約付き非線形最適化問題 (COP)

$$\text{COP} : \begin{cases} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ \text{s.t. } g(x) = 0 \end{cases} \quad x = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n)^T \in \mathbb{R}^n : \text{決定変数}$$

- $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$: 多項式
- 講義 2 までの内容は f, g がより一般の関数であっても成立
- $\mathcal{X} := \{x \in \mathbb{R}^n \mid g(x) = 0\}$: 許容集合 $s \in \mathbb{R}$: 2乗スラック変数
- 不等式条件 $h(x) \leq 0$ は等式条件 $h(x) + s^2 = 0$ へ帰着 [Bertsekas2005, Fukuda2017]

最適性（必要）条件

- **Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 条件**

$$g(x) = 0, \quad f_x(x) + g_x(x)\lambda = 0$$

- $\hat{x}$ が最適解 $\Rightarrow$ KKT条件を満たす $\lambda \in \mathbb{R}^m$ が存在
- 代数的な最適性条件
- 制約想定（ g と $\hat{x}$ に関する追加の条件）が必要

$$f_x := \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \quad \frac{\partial f}{\partial x_2} \quad \cdots \quad \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^\top : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$
$$g_x := \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_m}{\partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_1}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial g_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times m}$$

- **一次独立制約想定（Linear independence CQ, LICQ）**

$$\text{rank } g_x(\hat{x}) = m$$

- 代数的でチェックが容易 必要十分条件となるCQが存在（Guignard CQ）
- 「KKT条件が最適性条件である」ための**十分条件**

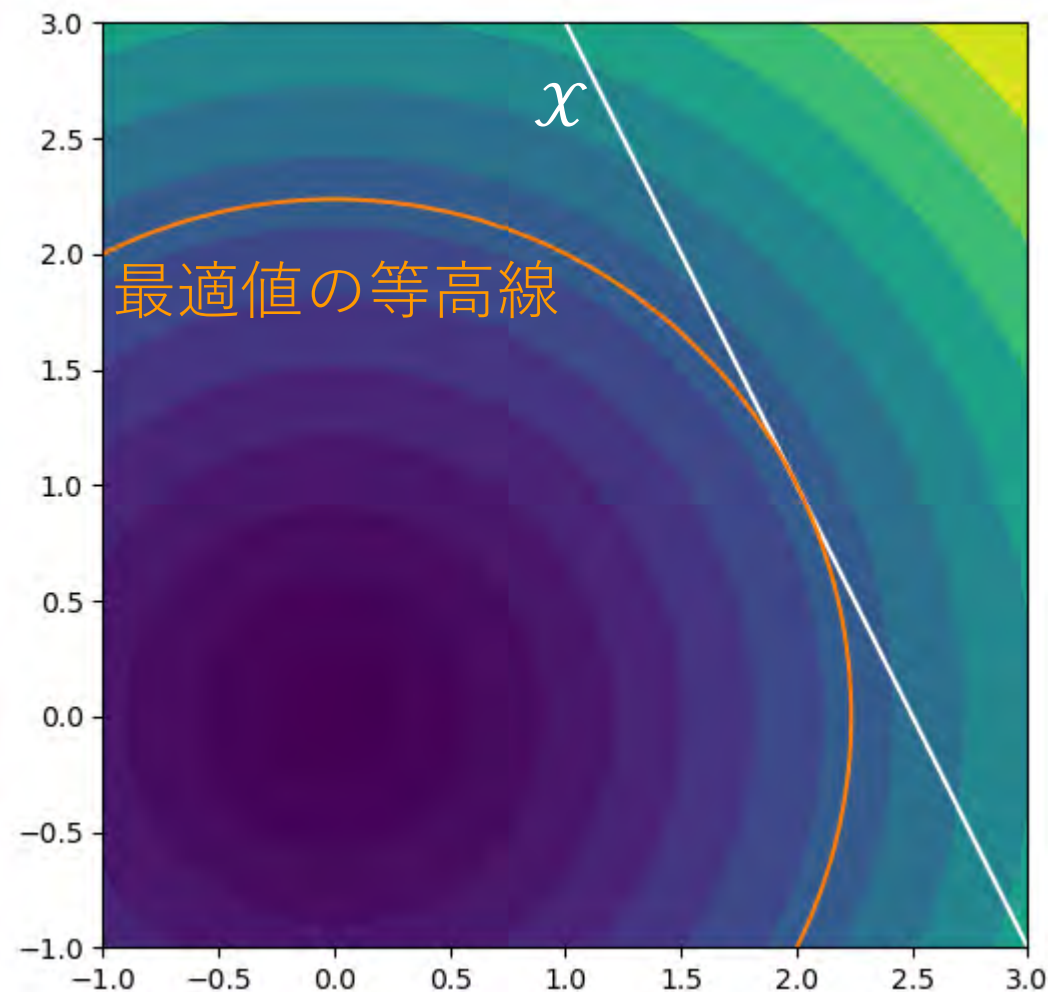
制約想定が成り立つ例

- 最適解はKKT条件を満たす

$$\begin{array}{ll}\min_{x \in \mathbb{R}^2} & \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ \text{s.t.} & 2x_1 + x_2 - 5 = 0\end{array}$$

$$\text{KKT条件: } \begin{cases} 2x_1 + x_2 - 5 = 0 \\ x_1 + 2\lambda = 0 \\ x_2 + \lambda = 0 \end{cases}$$

$$x_1 = 2, \quad x_2 = 1, \quad \lambda = -1$$



制約想定が成り立たない例 1

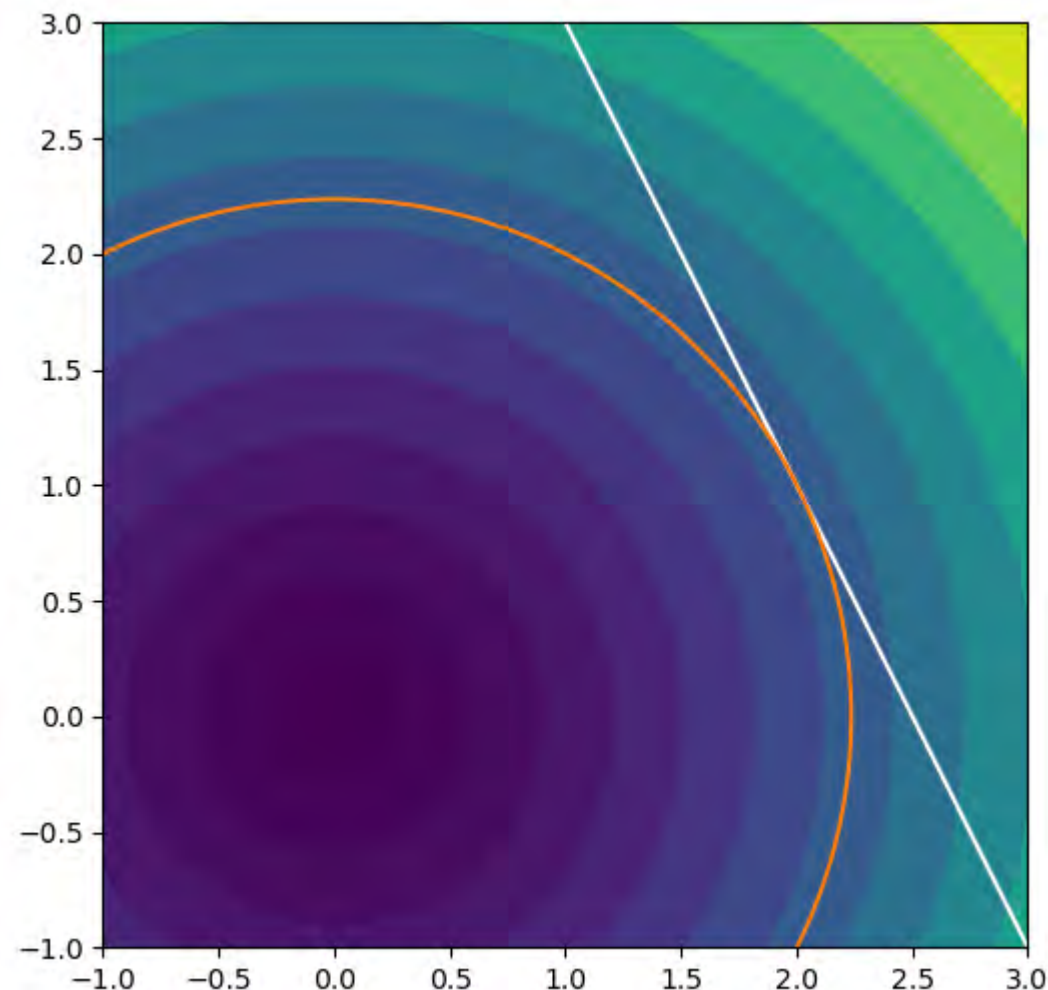
- 任意の実行可能解がKKT条件を満たさない

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^2} \quad & \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ \text{s. t.} \quad & (2x_1 + x_2 - 5)^2 = 0 \end{aligned}$$



$$\text{KKT条件: } \begin{cases} 2x_1 + x_2 - 5 = 0 \\ x_1 + 4\lambda(2x_1 + x_2 - 5) = 0 \\ x_2 + 2\lambda(2x_1 + x_2 - 5) = 0 \end{cases}$$

任意の $(x_1, x_2) \in \mathcal{X}$ について解を持たない



制約想定が成り立たない例 2

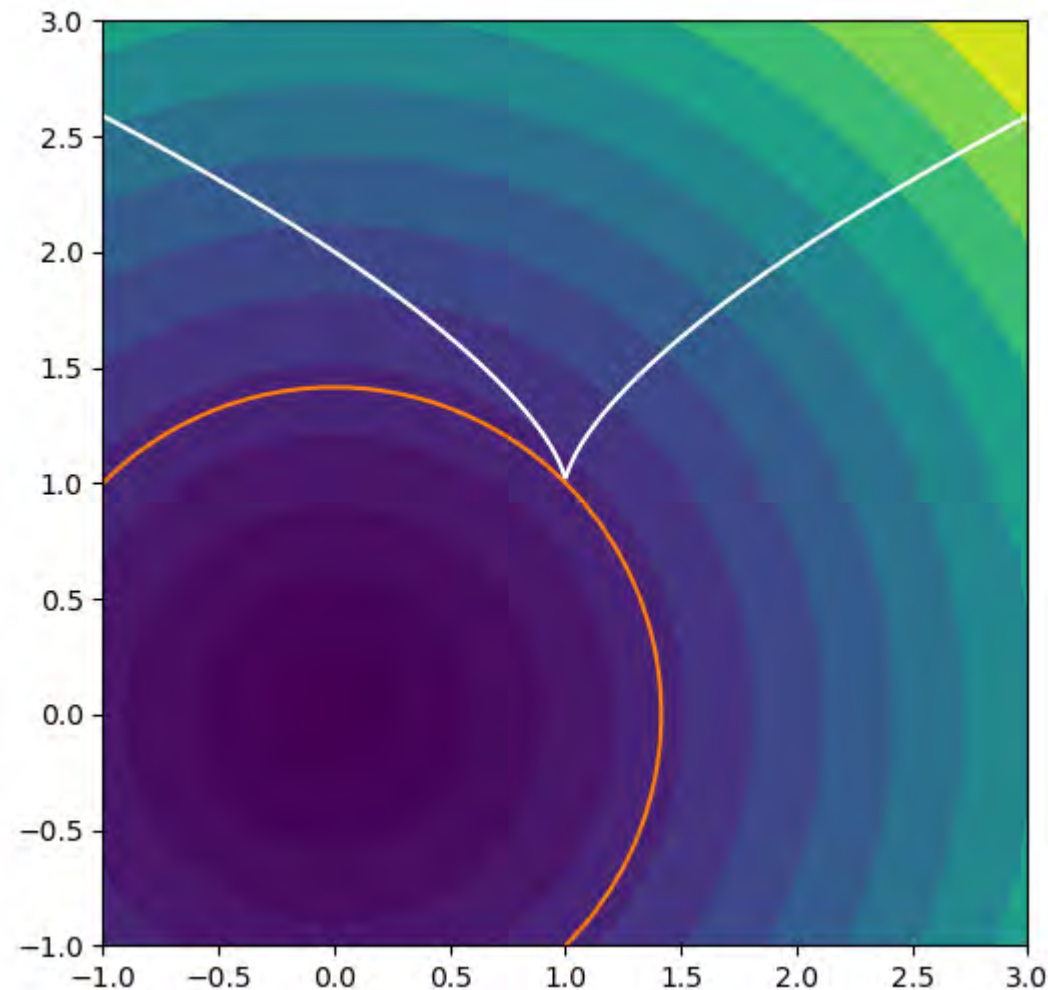
- 最適解はKKT条件を満たさない

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^2} \quad & \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ \text{s.t.} \quad & (x_1 - 1)^2 - (x_2 - 1)^3 = 0 \end{aligned}$$

明らかに $x_1 = x_2 = 1$ が最適解だが...

$$\text{KKT条件: } \begin{cases} (x_1 - 1)^2 - (x_2 - 1)^3 = 0 \\ x_1 + 2\lambda(x_1 - 1) = 0 \\ x_2 + 3\lambda(x_2 - 1)^2 = 0 \end{cases}$$

$x_1 = x_2 = 1$ で実数解を持たない



線形化錐，接錐

- 線型化錐： $g(x)$ の線形近似から定まる錐

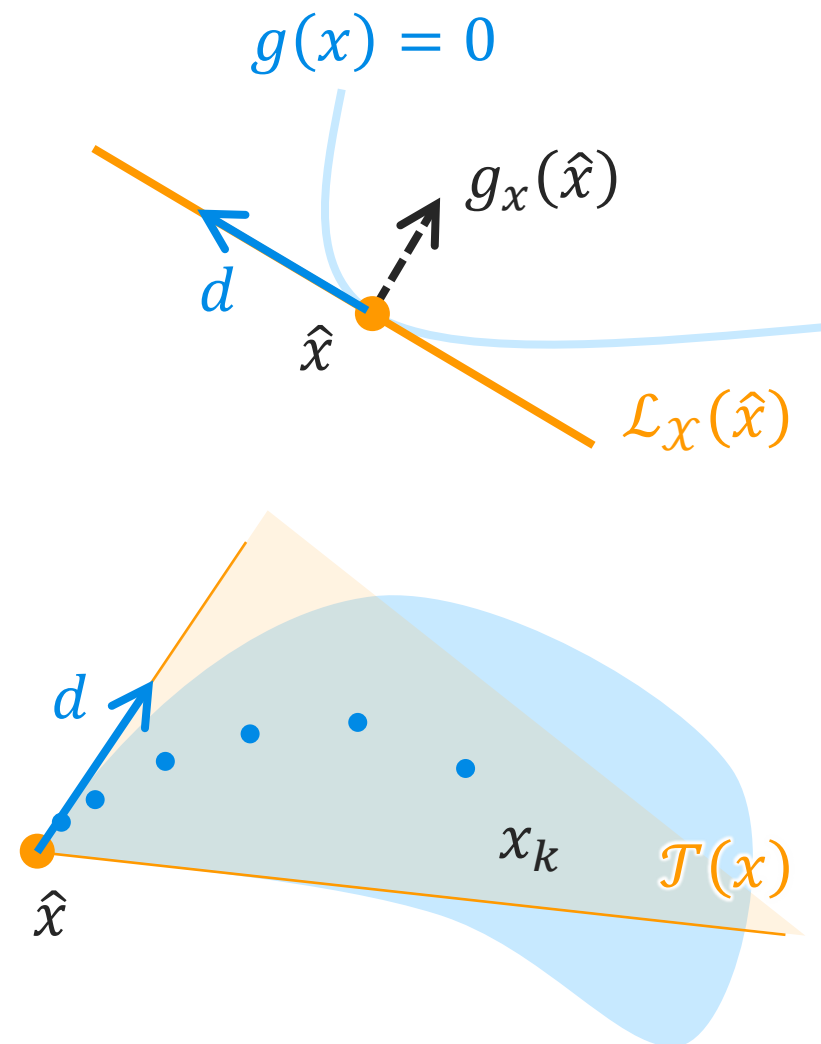
$$\mathcal{L}_{\mathcal{X}}(\hat{x}) := \{d \in \mathbb{R}^n \mid d^\top g_x(\hat{x}) = 0\}$$

- 関数 $g(x)$ に依存 ($\mathcal{X}$ のみから定まらない)
- $\mathcal{X}$ の $\hat{x}$ 周りの代数的な線形化

- 接錐：幾何的に定まる集合の“線形化”

$$\mathcal{T}_{\mathcal{X}}(\hat{x}) := \left\{ d \in \mathbb{R}^n \mid \begin{array}{l} \exists \{x_k\} \subset \mathcal{X}, t_k \downarrow 0 \\ \text{s.t. } x_k \rightarrow \hat{x}, \frac{x_k - \hat{x}}{t_k} \rightarrow d \end{array} \right\}$$

- “どの方向から近づけるか”を表す集合
- $\mathcal{X}$ の $\hat{x}$ 周りの幾何的な線形化



制約想定

- **Guignard 制約想定 (GCQ)** : $\mathcal{L}_x(\hat{x}) \subseteq \text{co } \mathcal{T}_x(\hat{x})$
 - $\text{co } \mathcal{T}_x(\hat{x})$: 接錐 $\mathcal{T}_x(\hat{x})$ の凸包
 - 集合の包含関係で記述される **幾何的な制約想定**
 - 代数的な線形化 ($\mathcal{L}_x(\hat{x})$) と幾何的な線形化 ($\mathcal{T}_x(\hat{x})$) の間に **ギャップが無い**ことを表す条件
 - 「KKT条件が最適性条件である」ための **必要十分条件**[福島 2001]

定義から常に
 $\text{co } \mathcal{T}_x(\hat{x}) \subseteq \mathcal{L}_x(\hat{x})$
が成立



$\hat{x}$ が局所最適かつGCQを満たさない
 $\Rightarrow \hat{x}$ はKKT条件を満たさない

制約想定が成り立たない例 2 (再掲)

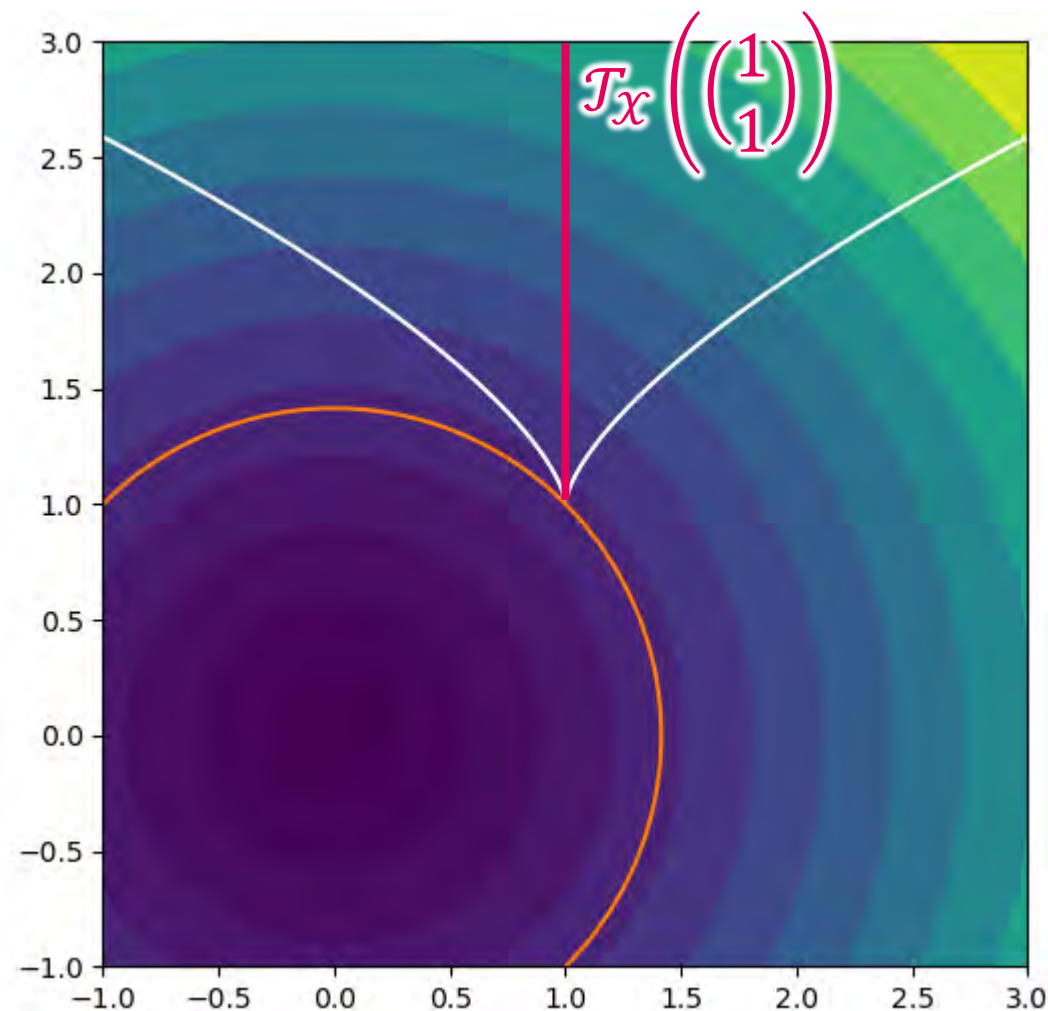
- 最適解はKKT条件を満たさない

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^2} \quad & \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ \text{s.t.} \quad & (x_1 - 1)^2 - (x_2 - 1)^3 = 0 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \mathcal{T}_x \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) &= \{ d \in \mathbb{R}^2 \mid d_1 = 0, d_2 \geq 0 \} \\ &= \text{co } \mathcal{T}(\hat{x}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_x \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) &= \left\{ d \in \mathbb{R}^2 \mid d^\top g_x \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = 0 \right\} \\ &= \mathbb{R}^2 \quad \left(\because g_x \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = 0 \right) \end{aligned}$$



制約想定が成り立たない例 2 (再掲)

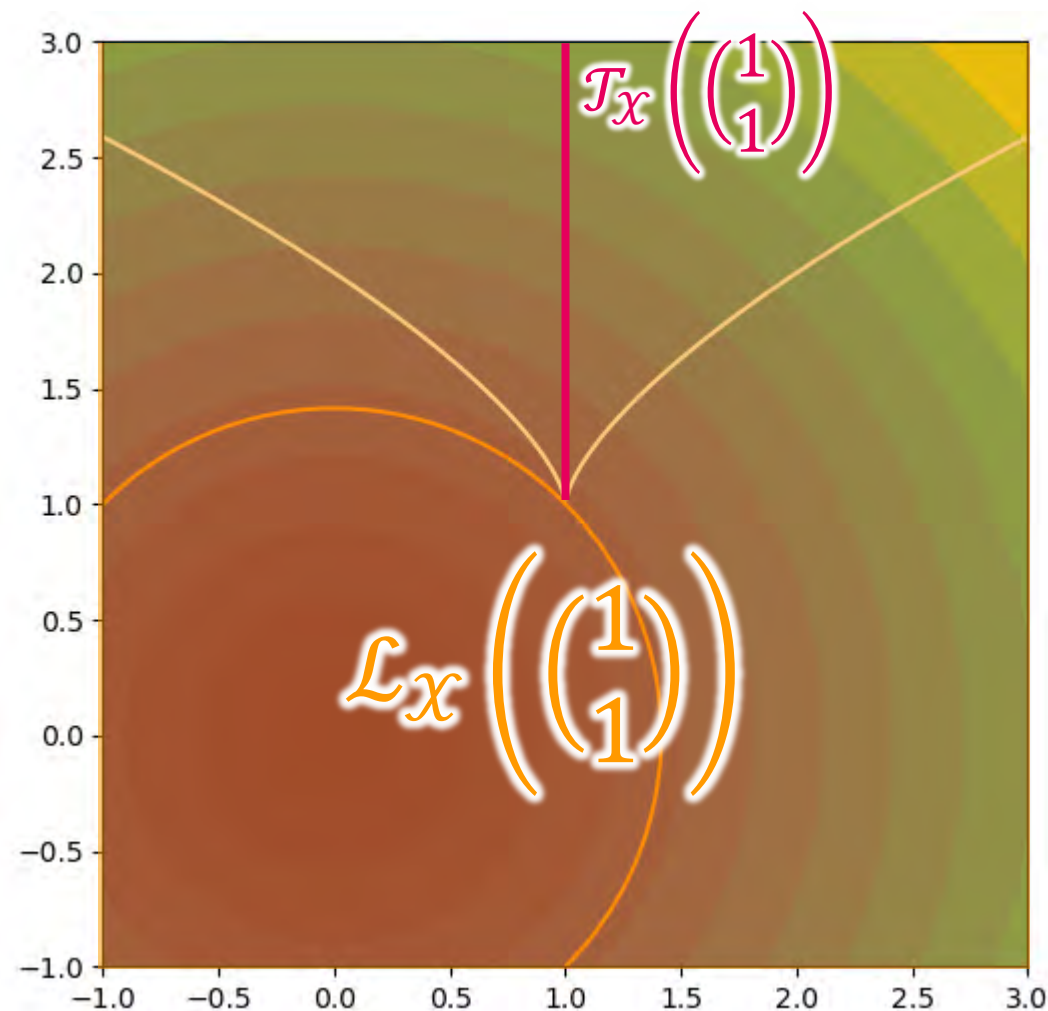
- 最適解はKKT条件を満たさない

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^2} \quad & \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ \text{s.t.} \quad & (x_1 - 1)^2 - (x_2 - 1)^3 = 0 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \mathcal{T}_x \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) &= \{ d \in \mathbb{R}^2 \mid d_1 = 0, d_2 \geq 0 \} \\ &= \text{co } \mathcal{T}(\hat{x}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_x \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) &= \left\{ d \in \mathbb{R}^2 \mid d^\top g_x \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = 0 \right\} \\ &= \mathbb{R}^2 \quad \left(\because g_x \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = 0 \right) \end{aligned}$$



GCQを満たさない！

既存の最適性条件

- **KKT条件**

- **利点**：方程式・不等式で記述（代数的）
- **欠点**：制約想定が必要

- **制約想定のない最適性条件**

- Fritz John (FJ) 条件
- 逐次最適性条件（AGP^[Martinez et al. 2003], AKKT^[Andreani et al. 2011], etc. ）
- ペナルティ関数法に基づく条件

先行研究^[Andreani et al. 2011]にてAKKT条件の提案に際し導出

制約想定が不要な最適性条件 1

- **Fritz John (FJ) 条件**

$$g(x) = 0, \quad \lambda_0 f_x(x) + g_x(x)\lambda = 0, \quad (\lambda_0 \lambda^\top) \neq 0$$

- $\hat{x}$ が最適解 $\Rightarrow$ 非ゼロの $(\lambda_0 \lambda^\top) \in \mathbb{R}^{m+1}$ が存在
- $\lambda_0 \neq 0$ の場合：KKT条件に帰着
- $\lambda_0 = 0$ の場合：コスト関数 f に依存しない式となる（最適性？）

この状況は $g(x)$ を変えることで容易に作れる

- $g_x(x)$ の列ベクトルが線形従属である全ての点
- 等式制約 $g(x) = 0$ を2つの不等式 $g(x) \leq 0, g(x) \geq 0$ に分けた場合
- 任意の実行可能解 $\bar{x}$ について自明な不等式 $-\|x - \bar{x}\|^2 \leq 0$ を加える

最適性条件としての有用性...？

制約想定が不要な最適性条件 2

- ペナルティ関数法に基づく最適性条件

- ペナルティ関数：制約違反にペナルティを課したコスト関数

$$P(x; r) := f(x) + r g^T(x)g(x)$$

- $r \in \mathbb{R}$ ：ペナルティの大きさを調節するパラメータ
- $P(x; r)$ の局所最適解が $r \rightarrow \infty$ でCOPの局所最適解に収束
(適切な修正が必要)

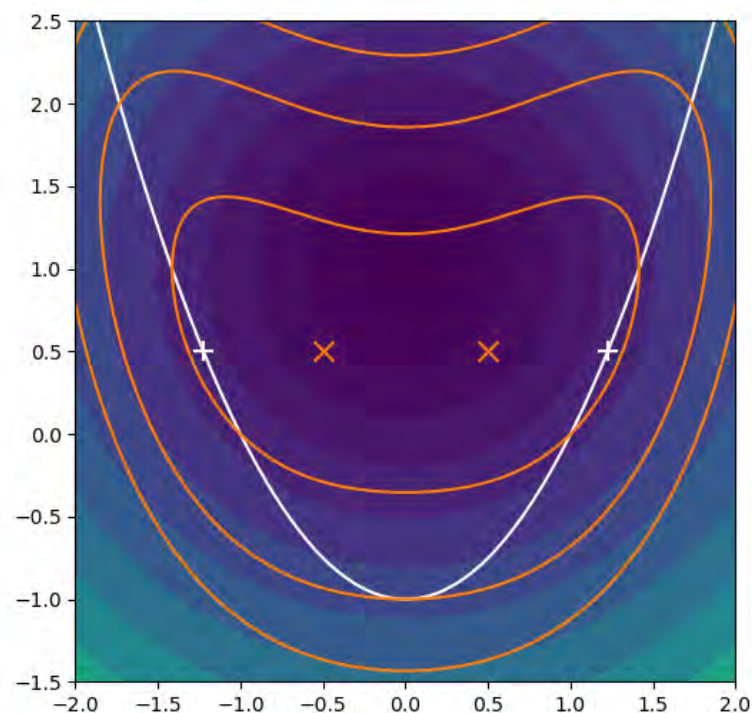


$P(x; r)$ の局所最適解の収束列の存在 → 最適性必要条件

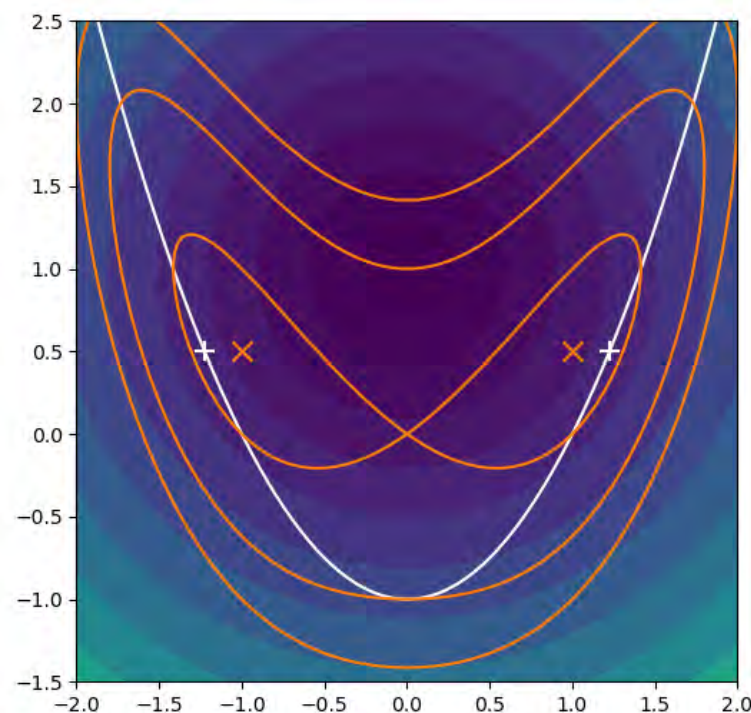
ペナルティ関数法のイメージ

$$f(x) = \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}(x_2 - 1)^2$$
$$g(x) = x_2 - x_1^2 + 1$$

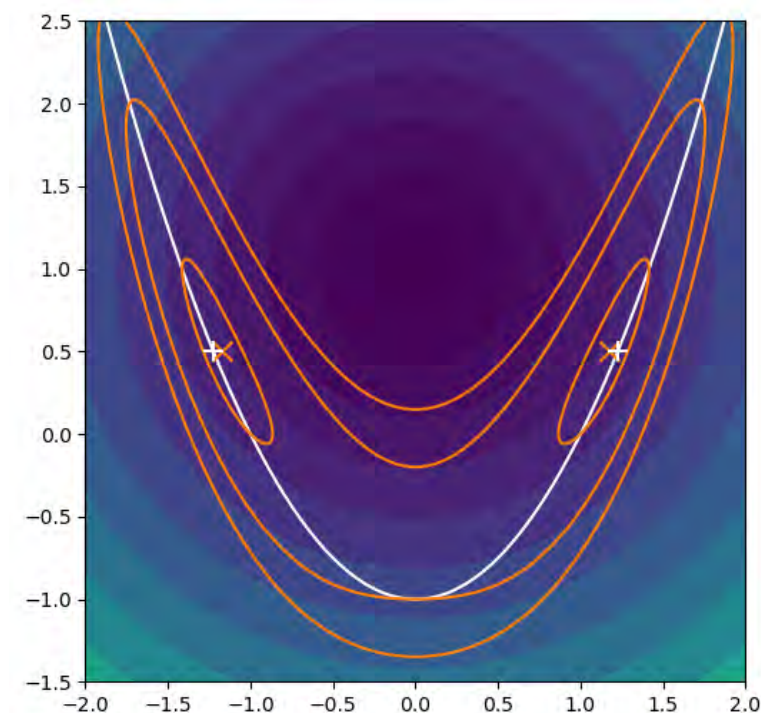
白実線：実行可能集合
オレンジ実線：ペナルティ関数の等高線



$r = 0.2$



$r = 0.5$



$r = 2.0$

ペナルティ関数法の収束性

- 大域最適解への収束性[Bertsekas 2005]

$P(x; r)$ の大域最適解が $r \rightarrow \infty$ で収束するならば、その収束点はCOPの大域最適解

- 収束点が大域最適解であるための**十分条件**（演習問題）

- 局所最適解[Fiacco and McCormick 1968]

$\mathcal{X}^* \subset \mathcal{X}$ をCOPの局所最適値 v^* に対応する局所最適解の集合で、コンパクトなものとする。このとき、 $P(x; r)$ の局所最適解 x_k であって、 $k \rightarrow \infty$ で $\text{dist}(\mathcal{X}^*, x_k) \rightarrow 0$ となるものが存在する。

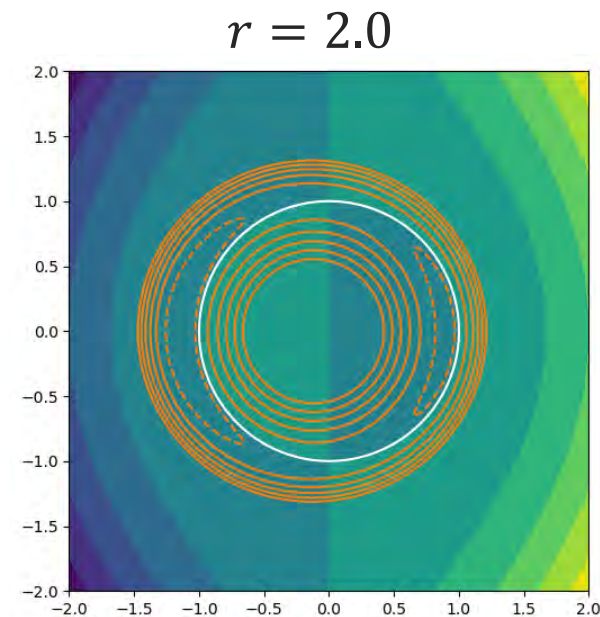
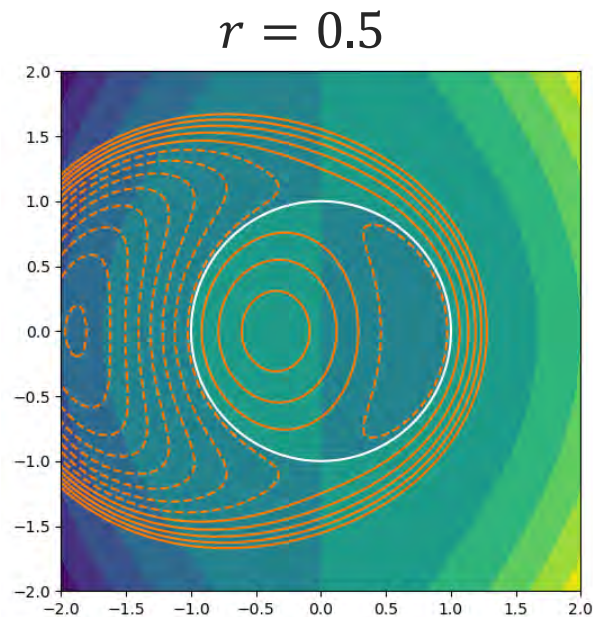
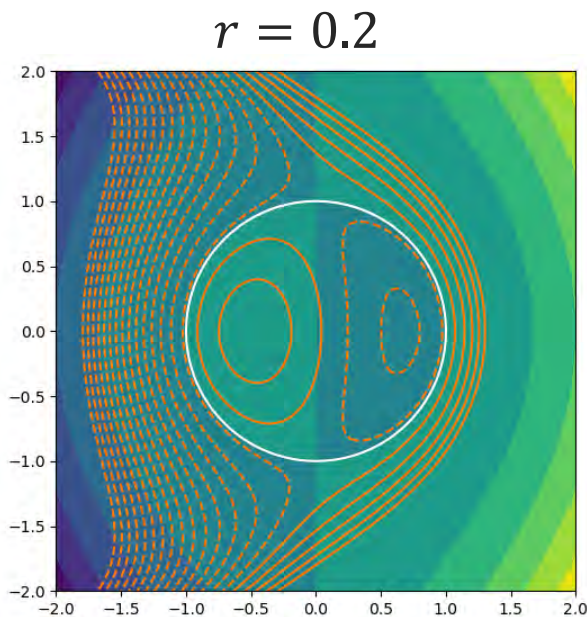
($\mathbb{R}^n$ の部分集合について)
コンパクト $\Leftrightarrow$ 有界かつ閉

$$\text{dist}(\mathcal{X}^*, x_k) := \min_{x \in \mathcal{X}^*} \|x - x_k\|$$

- $\mathcal{X}^* = \{\hat{x}\}$ の場合、点列 $\{x_k\}$ の存在は最適性**必要条件**

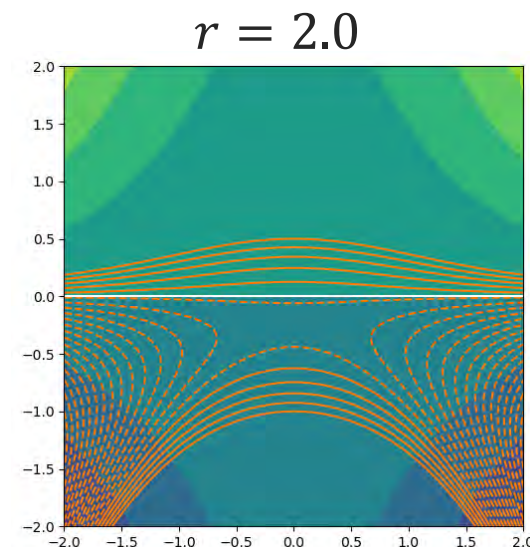
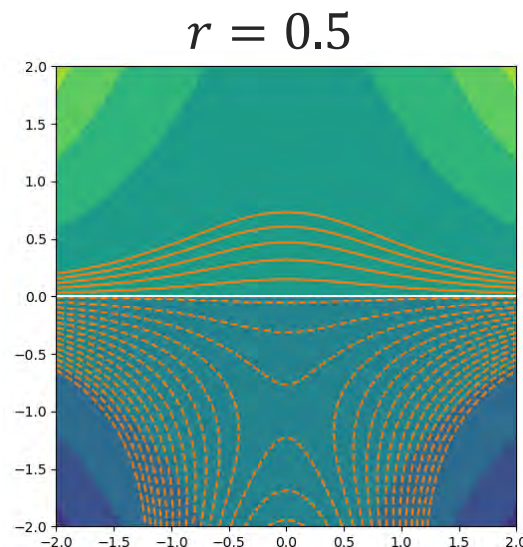
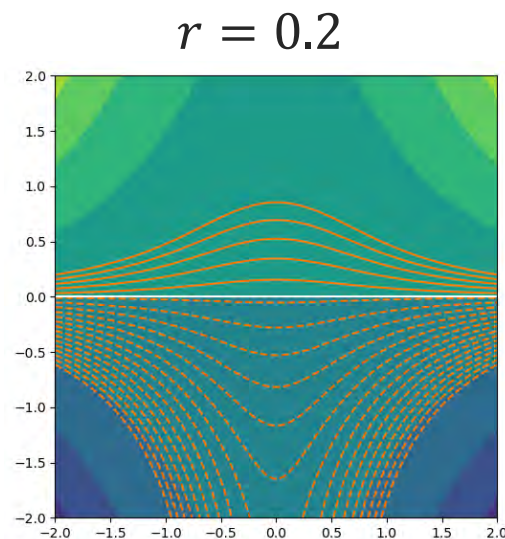
最適性条件とならない例 1

- $\mathcal{X}^*$ が複数の点を含んでいる場合
 - $\mathcal{X}^*$ のある点への収束列 $\{x_k\}$ 存在するが任意の点に対してではない
 - 例) $f(x) = x_1(x_1^2 + x_2^2 - 1)$
 $g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1$ 任意の $x \in \mathcal{X}$ が局所最適解 ($f(x) = 0$)



最適性条件とならない例 2

- x^* がコンパクトでない場合
 - ペナルティ関数 $P(x; r)$ が局所最適解を持たない場合
 - 例) $f(x) = -x_1^2 x_2 + x_2$, $g(x) = x_2$



これらの例外にも対応できる最適性必要条件？

ペナルティ関数法の収束性（再掲）

- 大域最適解への収束性[Bertsekas 2005, Nocedal 2006]

$P(x; r)$ の大域最適解が $r \rightarrow \infty$ で収束すれば
収束点はCOPの大域最適解

- 収束点が大域最適解であるための**十分条件**

- 局所最適解[Fiacco and McCormick 1968]

$\mathcal{X}^* \subset \mathcal{X}$ をCOPの局所最適値 v^* に対応する
局所最適解の集合で、コンパクトなものとする。
このとき、 $P(x; r)$ の局所最適解 x_k であって、
 $k \rightarrow \infty$ で $\text{dist}(\mathcal{X}^*, x_k) \rightarrow 0$ となるものが存在する。

- $\mathcal{X}^* = \{\hat{x}\}$ の場合、点列 $\{x_k\}$ の存在は最適性**必要条件**

ペナルティ関数に基づく条件

- 局所ペナルティ関数

$$P^{\text{loc}}(x; r, \hat{x}) := f(x) + \|x - \hat{x}\|^2 + r g^{\top}(x)g(x)$$

- $\mathcal{X}^* = \{\hat{x}\}$ となるようコスト関数を修正
- 局所最適解 $\hat{x}$ 近傍の最適化問題に対応するペナルティ関数

$$\text{COP}_{\hat{x}}^{\text{loc}}: \begin{cases} \min_{x \in \mathcal{B}_{\varepsilon}(\hat{x})} f(x) + \|x - \hat{x}\|^2 \\ \text{s.t. } g(x) = 0 \end{cases} \quad \mathcal{B}_{\varepsilon}(\hat{x}) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - \hat{x}\| \leq \varepsilon\}$$



$\hat{x}$ は $\text{COP}_{\hat{x}}^{\text{loc}}$ の孤立局所最適解（ペナルティ関数法の収束 = 最適性条件）

ペナルティ関数に基づく条件

- 定理 [Andreani et al. 2011]

$\hat{x}$: COPの局所最適解

$\{r_k\}_{k=1}^{\infty}$: $\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = \infty$ を満たす単調増加列

↓

$\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$: $P^{\text{loc}}(x; r_k, \hat{x})$ の局所最適解の列が存在し, $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \hat{x}$

最適性条件

- 系 (ペナルティ関数法に基づく最適性条件)

$\hat{x}$: COPの局所最適解

$\{r_k\}_{k=1}^{\infty}$: $\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = \infty$ を満たす単調増加列

↓

$\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$: $P_x^{\text{loc}}(x; r_k, \hat{x}) = 0$ を満たす点列が存在し, $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \hat{x}$

停留条件で置き換え

ペナルティ関数法に基づく最適性条件

- 幾何学的解釈

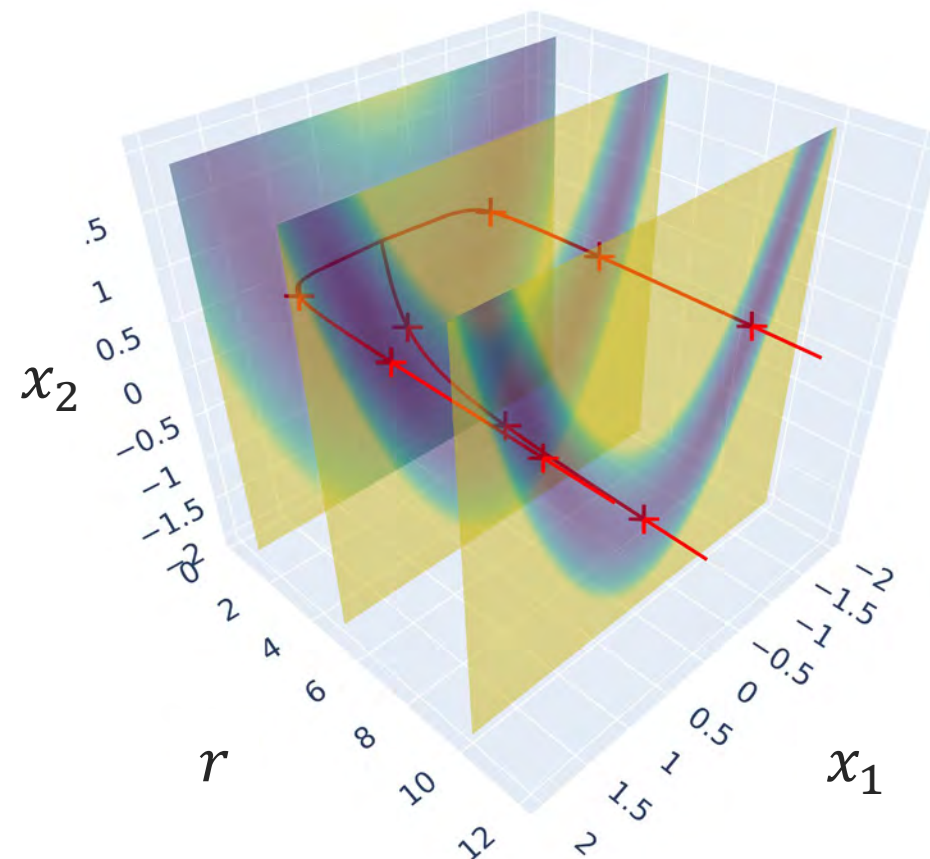
- 停留条件 $P_x^{\text{loc}}(x; r, \hat{x}) = 0$ の解軌跡 $x(r, \hat{x})$ が収束する点 = 最適解候補

- 実用性は低い

- 欠点 1 : 局所最適解 $\hat{x}$ は本来は未知
- 欠点 2 : 極限操作 $r \rightarrow \infty$ は代入 $r = \infty$ では代替できない

$$0 = P_x^{\text{loc}}(x; r, \hat{x})$$

$$\Leftrightarrow (g^\top g_x)(x) = -\frac{f_x(x) + 2(x - \hat{x})}{2r} \rightarrow 0 \quad (r \rightarrow \infty)$$



既存の最適性条件まとめ

• KKT条件

- 利点：方程式・不等式で記述（代数的）
- 欠点：制約想定が必要（ $g(x)$ の表現に依存）

• FJ条件

- 利点：制約想定が不要
- 欠点：条件が弱い

$\lambda_0 = 0$ の場合は
最適解に関する情報
を何も与えない

• ペナルティ関数法に基づく条件

- 利点：制約想定が不要， $g(x)$ の表現に依存しない
- 欠点：点列の収束で記述（他の逐次最適性条件も同様）（幾何学的）

幾何学的条件から
代数的条件を導出？

ペナルティ関数法と射影空間

1コマ目のおさらい

- ペナルティ関数法に基づく最適性条件

- 任意の局所最適解 $\hat{x}$ に対して
停留条件 $P_x^{\text{loc}}(x; r, \hat{x}) = 0$ の解軌跡が
 $r \rightarrow \infty$ で $\hat{x}$ に収束

- 無限遠点の近傍の情報が知りたい

- $r = \infty$ の代入は意味がない
- $\mathbb{R}^n$ 内のある点近傍の情報
→ ヤコビ行列等で調べることが可能



(無限遠と見なせるほど) 遠い太陽が写真の中の一点として表されている

無限遠点を $\mathbb{R}^n$ 内の普通の点と同等にあつかう枠組み → 射影空間

射影空間 ～ 1次元の場合 ～

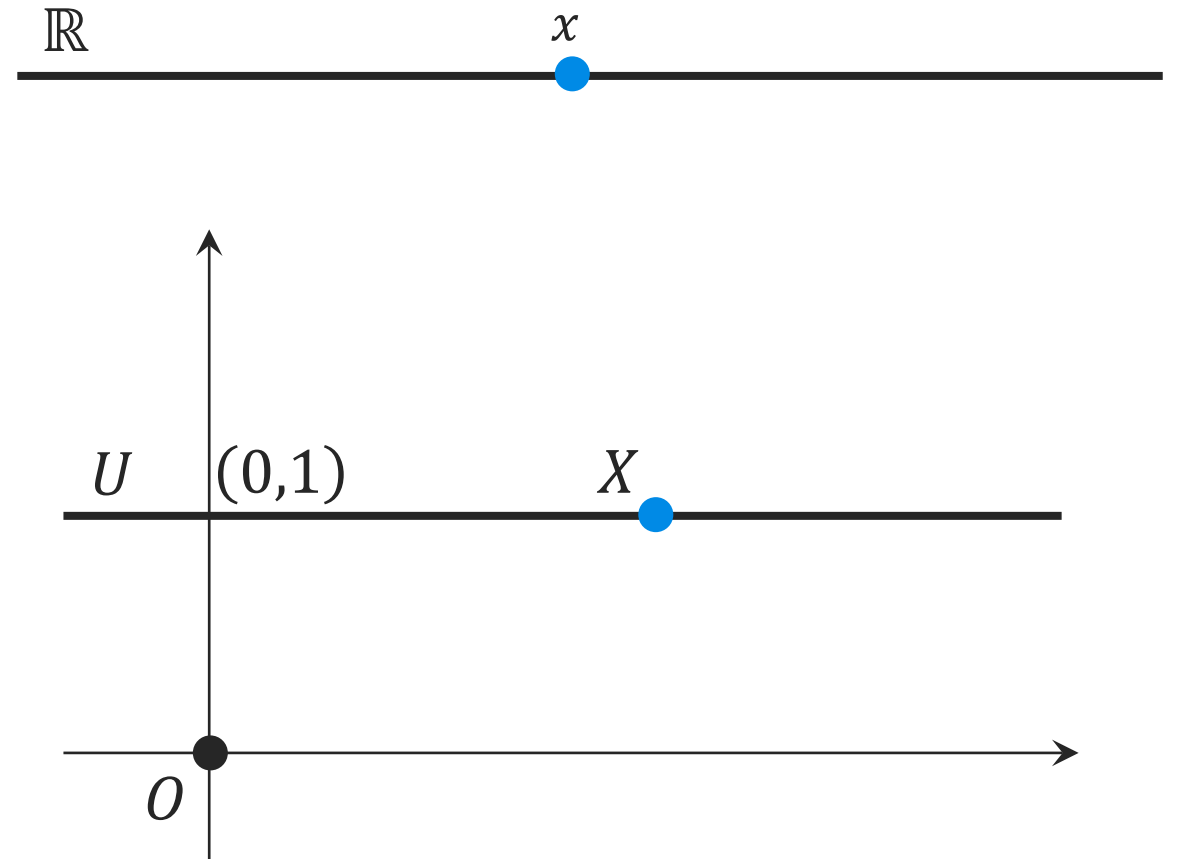
- まずは 1 次元の場合



射影空間 ～ 1次元の場合 ～

- まずは 1 次元の場合

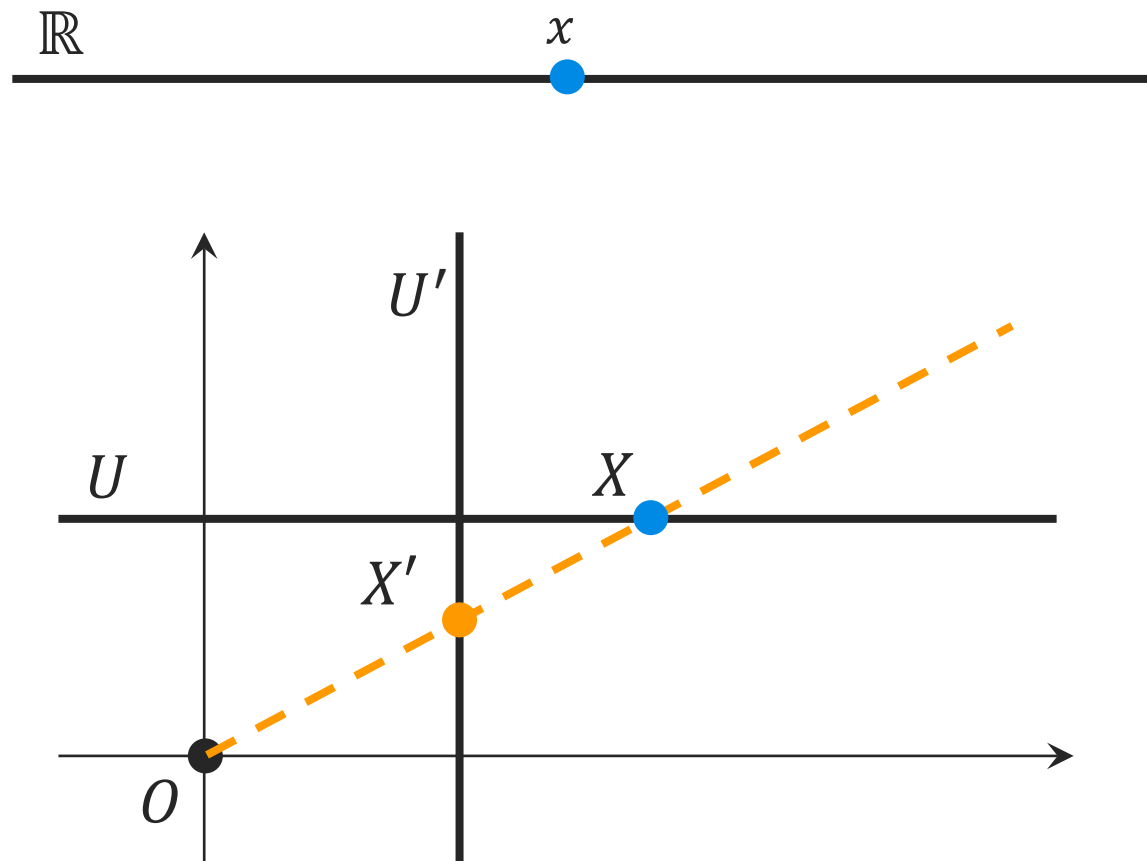
- $\mathbb{R}$ を $U = \{ (x, 1) \in \mathbb{R}^2 \mid x \in \mathbb{R} \}$
と同一視； $\mathbb{R} \ni x \mapsto X = (x, 1) \in U$



射影空間 ～ 1次元の場合 ～

- まずは 1 次元の場合

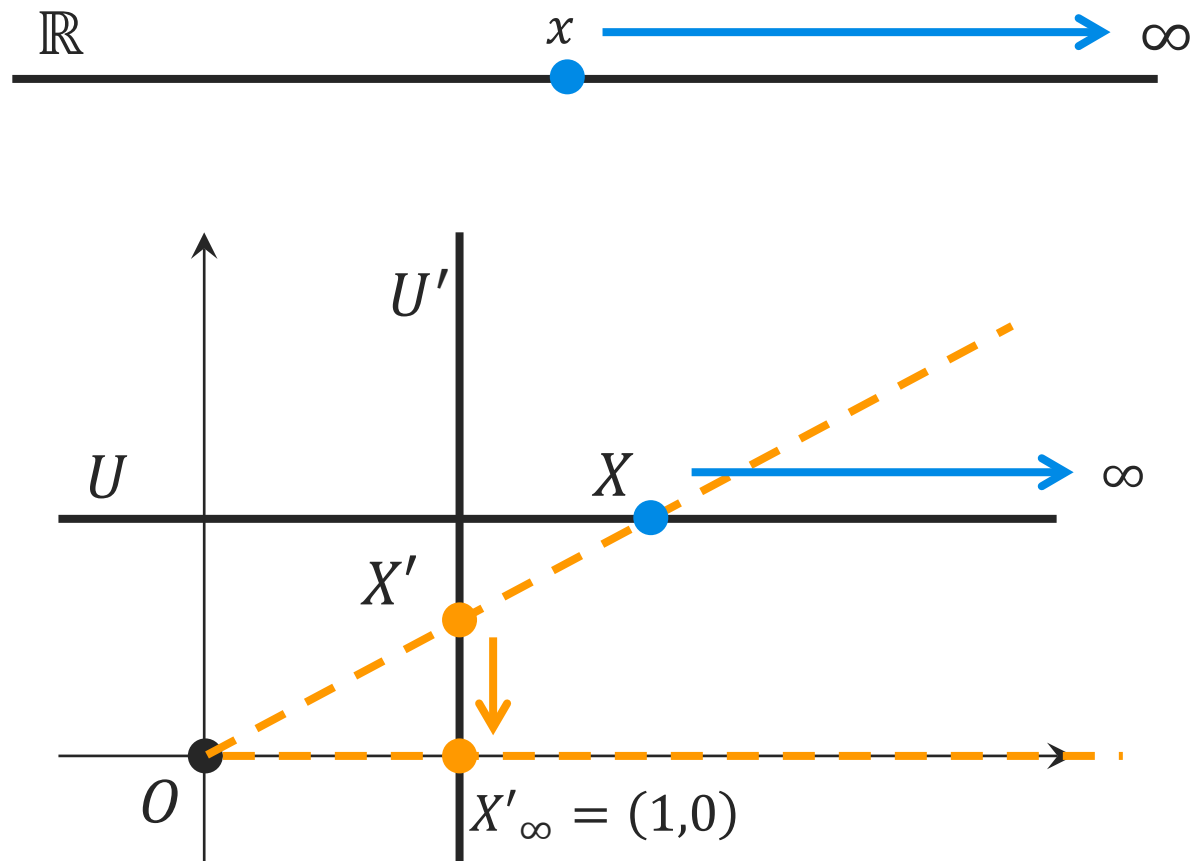
- $\mathbb{R}$ を $U = \{(x, 1) \in \mathbb{R}^2 \mid x \in \mathbb{R}\}$ と同一視； $\mathbb{R} \ni x \mapsto X = (x, 1) \in U$
- $X \in U$ を直線 OX に沿って
 $U' = \{(1, y) \in \mathbb{R}^2 \mid y \in \mathbb{R}\}$ に写し取る (X')



射影空間 ～ 1次元の場合 ～

- まずは 1 次元の場合

- $\mathbb{R}$ を $U = \{ (x, 1) \in \mathbb{R}^2 \mid x \in \mathbb{R} \}$ と同一視； $\mathbb{R} \ni x \mapsto X = (x, 1) \in U$
- $X \in U$ を 直線 OX に沿って $U' = \{ (1, y) \in \mathbb{R}^2 \mid y \in \mathbb{R} \}$ に写し取る (X')
- $X \rightarrow \infty$ のとき $X' \rightarrow X'_\infty = (1, 0)$



射影空間 ～ 1次元の場合 ～

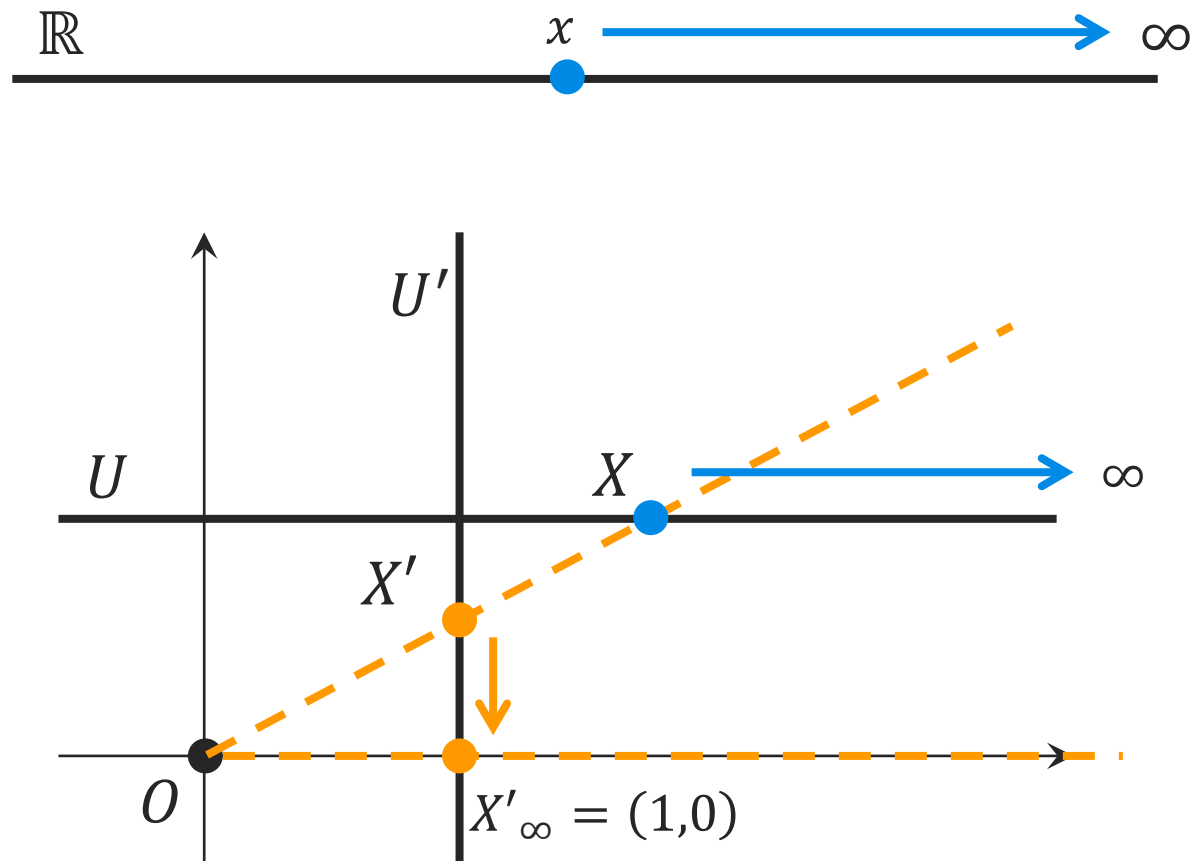
• まずは 1 次元の場合

- $\mathbb{R}$ を $U = \{ (x, 1) \in \mathbb{R}^2 \mid x \in \mathbb{R} \}$ と同一視； $\mathbb{R} \ni x \mapsto X = (x, 1) \in U$

- $X \in U$ を 直線 OX に沿って $U' = \{ (1, y) \in \mathbb{R}^2 \mid y \in \mathbb{R} \}$ に写し取る (X')

- $X \rightarrow \infty$ のとき $X' \rightarrow X'_\infty = (1, 0)$

U の無限遠点が U' の有限な点に写る



1次元射影空間 $\mathbb{P} = U$ と U' の貼り合わせ

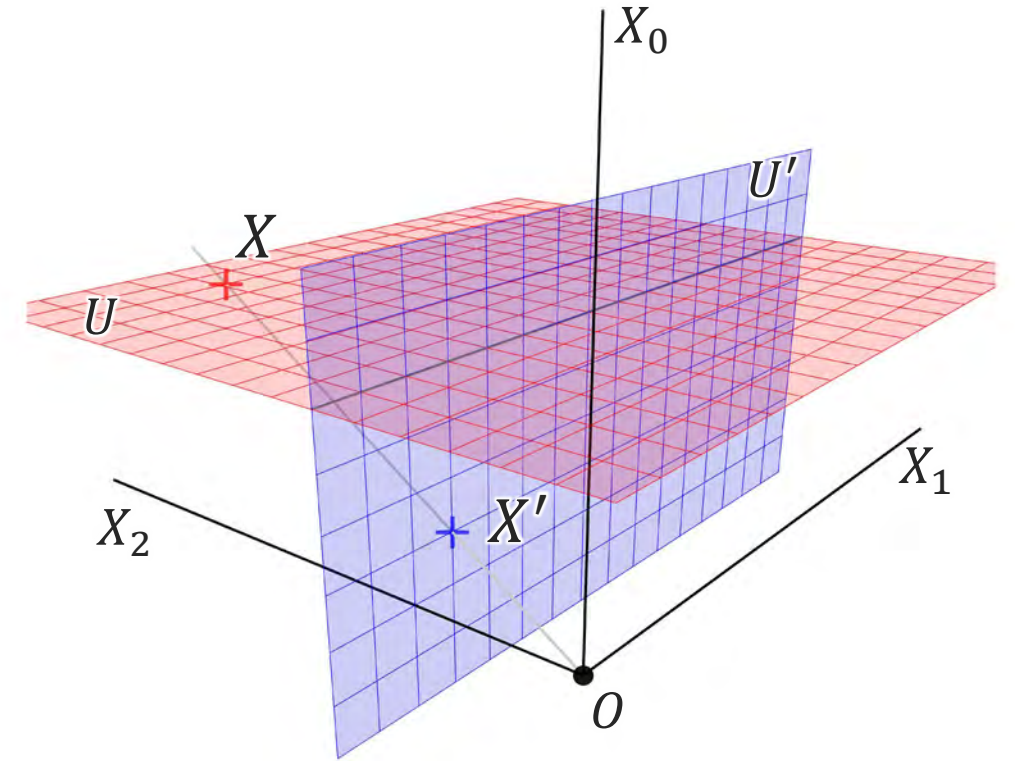
射影空間 ～ 2次元の場合 ～

- $\mathbb{R}^2$ を以下と同一視

$$U = \{ (1, x, y) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, y) \in \mathbb{R}^2 \}$$

$$U' = \{ (z, x, 1) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, z) \in \mathbb{R}^2 \}$$

- 例) $X \in U$ は $X' \in U'$ に写る



射影空間 ～ 2次元の場合 ～

- $\mathbb{R}^2$ を以下と同一視

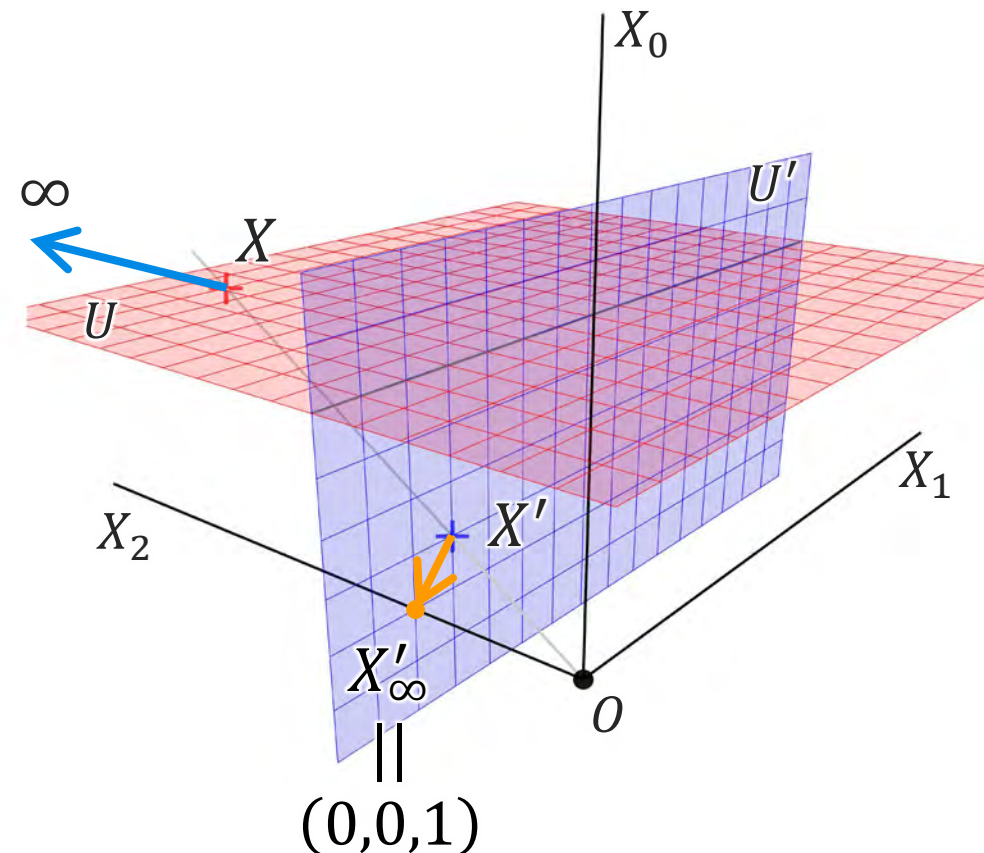
$$U = \{ (1, x, y) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, y) \in \mathbb{R}^2 \}$$

$$U' = \{ (z, x, 1) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, z) \in \mathbb{R}^2 \}$$

- U の無限遠点は U' 上の有限な点に写る

例) $X = (1, X_1, X_2)$ で $X_2 \rightarrow \infty$ のとき

$$X' \rightarrow X'_\infty = (0, 0, 1)$$



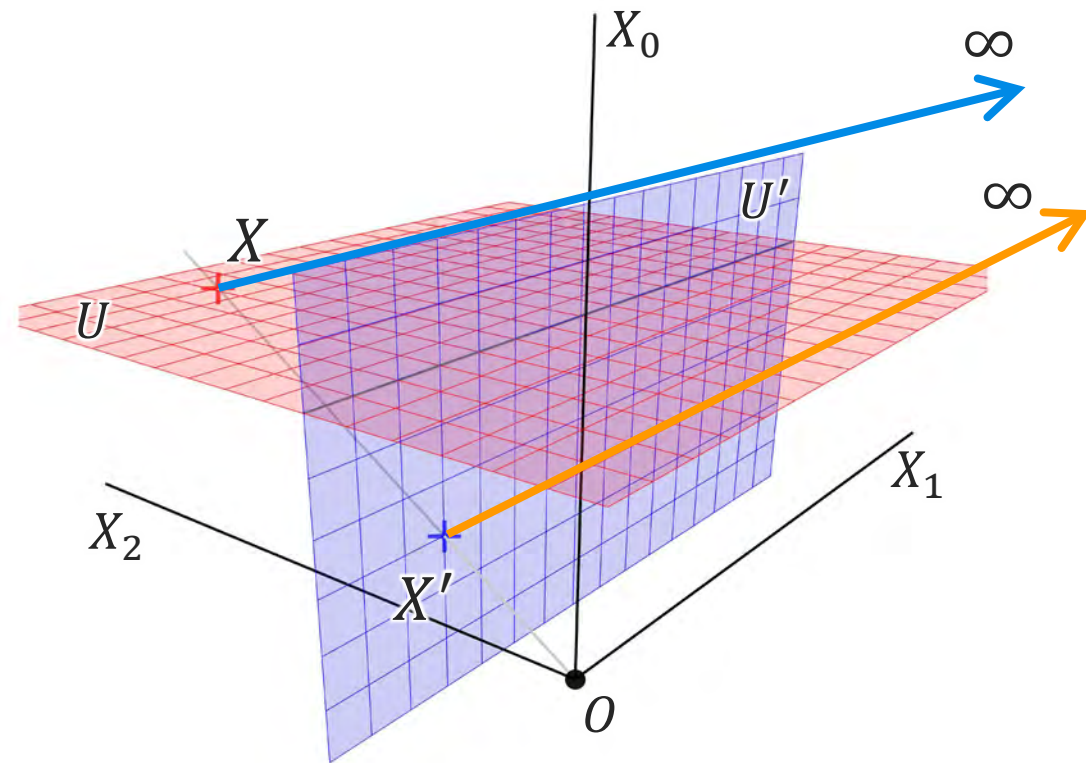
射影空間 ～ 2次元の場合 ～

- $\mathbb{R}^2$ を以下と同一視

$$U = \{ (1, x, y) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, y) \in \mathbb{R}^2 \}$$

$$U' = \{ (z, x, 1) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, z) \in \mathbb{R}^2 \}$$

- U の無限遠点は U' 上の有限な点に写る
- 無限遠の方向により収束先が異なる
 - $X_1 \rightarrow \infty$ のとき U' 上でも無限遠



射影空間 ～ 2次元の場合 ～

- $\mathbb{R}^2$ を以下と同一視

$$U = \{ (1, x, y) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, y) \in \mathbb{R}^2 \}$$

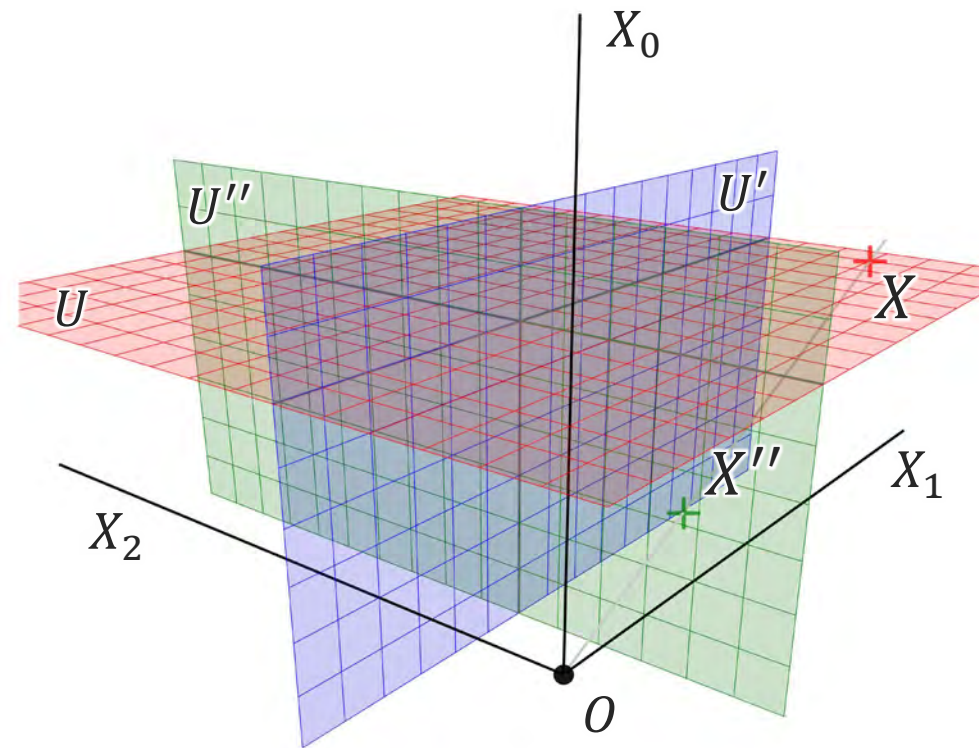
$$U' = \{ (z, x, 1) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, z) \in \mathbb{R}^2 \}$$

- U の無限遠点は U' 上の有限な点に写る

- 無限遠の方向により収束先が異なる

- $X_1 \rightarrow \infty$ のとき U' 上でも無限遠
→ 平面をもう一枚考える

$$U'' = \{ (z, 1, y) \in \mathbb{R}^3 \mid (y, z) \in \mathbb{R}^2 \}$$



射影空間 ～ 2次元の場合 ～

- $\mathbb{R}^2$ を以下と同一視

$$U = \{ (1, x, y) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, y) \in \mathbb{R}^2 \}$$

$$U' = \{ (z, x, 1) \in \mathbb{R}^3 \mid (x, z) \in \mathbb{R}^2 \}$$

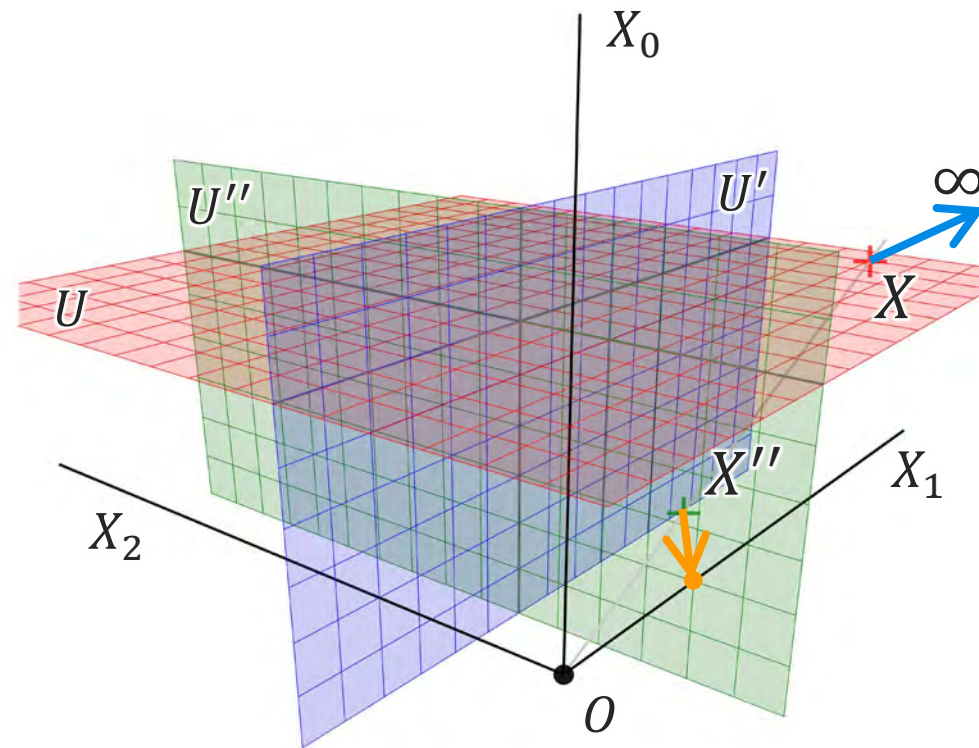
- U の無限遠点は U' 上の有限な点に写る

- 無限遠の方向により収束先が異なる

- $X_1 \rightarrow \infty$ のとき U' 上でも無限遠
→ もう一枚の平面 U'' が必要

$$U'' = \{ (z, 1, y) \in \mathbb{R}^3 \mid (y, z) \in \mathbb{R}^2 \}$$

- $X'' \rightarrow X''_\infty = (0, 1, 0)$: 有限な点



2次元射影空間 $\mathbb{P}^2$
 $= U, U', U''$ の貼り合わせ

射影空間

- 射影空間 $\mathbb{P}^n$ のフォーマルな定義[Cox et al. 2015]

$$\mathbb{P}^n := (\mathbb{R}^{n+1} \setminus \{0\}) / \sim$$

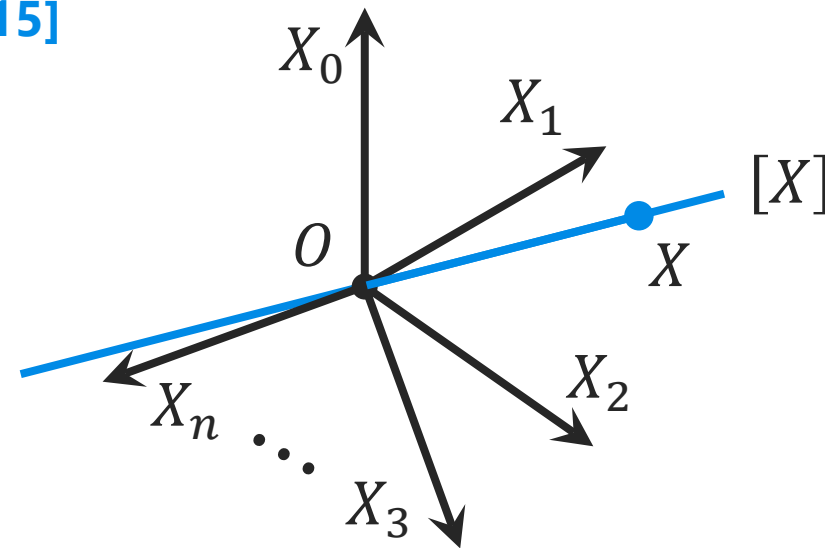
- $\mathbb{R}^{n+1} \setminus \{0\}$ に定まる同値関係“ $\sim$ ”

$$X \sim X' \Leftrightarrow \exists \lambda \neq 0, X = \lambda X'$$

- 同値関係 $\sim$ で $\mathbb{R}^{n+1} \setminus \{0\}$ を割ったもの

- 射影空間の点 : $[X] := \{X' \in \mathbb{R}^{n+1} \mid X \sim X'\}$

- 斉次座標 : $(X_0 : X_1 : \dots : X_n) := [(X_0, X_1, \dots, X_n)] \in \mathbb{P}^n$
 $\in \mathbb{R}^{n+1}$



射影空間と線形空間

- $\mathbb{P}^n$ は $n + 1$ 個の $\mathbb{R}^n$ の貼り合わせ

$$U_0 := \{ (X_0 : \cdots : X_n) \in \mathbb{P}^n \mid X_0 \neq 0 \}$$

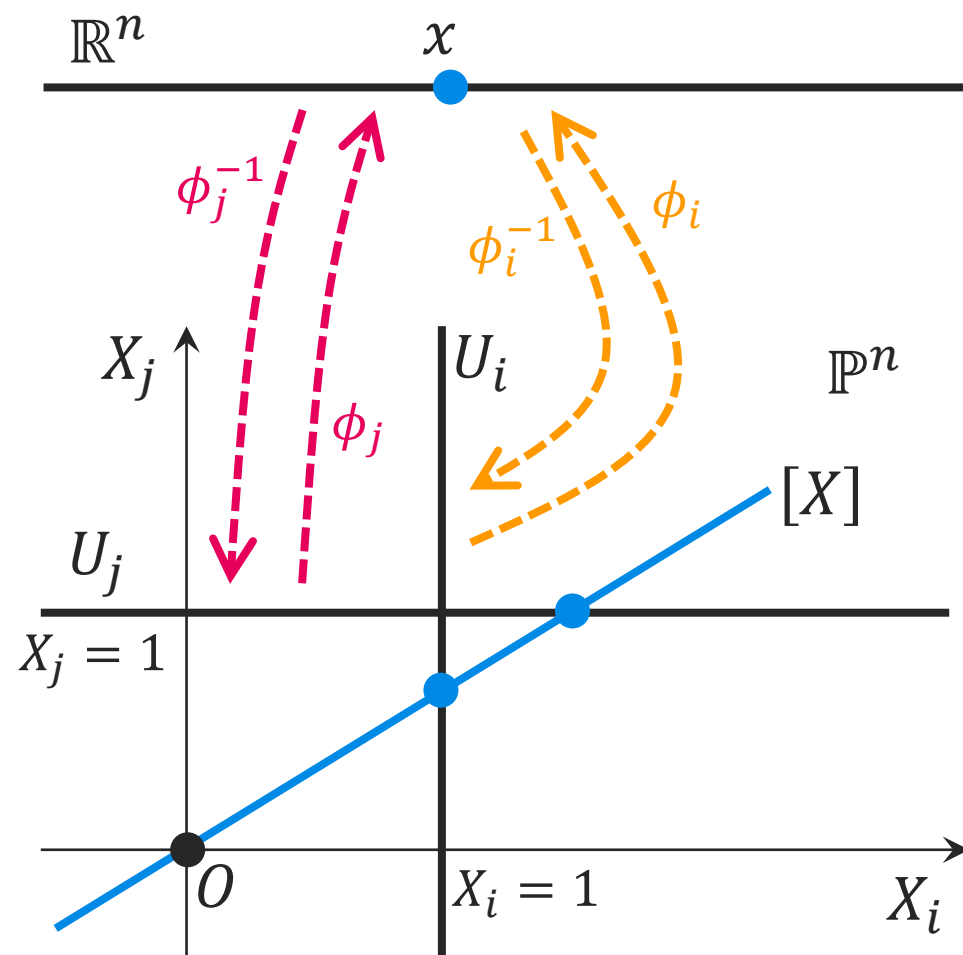
- 同様に部分集合 $U_1, U_2, \dots, U_n$ も定まる
- 各 U_i について以下の全単射 ϕ_i が存在

$$\phi_i: U_i \ni [X] = (X_0 : \cdots : X_i : \cdots : X_n)$$

$$\mapsto \left(\frac{X_0}{X_i}, \dots, \frac{X_{i-1}}{X_i}, \frac{X_{i+1}}{X_i}, \dots, \frac{X_n}{X_i} \right)^\top \in \mathbb{R}^n$$

$$\phi_i^{-1}: \mathbb{R}^n \ni (x_1, \dots, x_n)^\top$$

$$\mapsto (x_1 : \cdots : x_i : 1 : x_{i+1} : \cdots : x_n) \in U_i$$



射影空間と線型空間

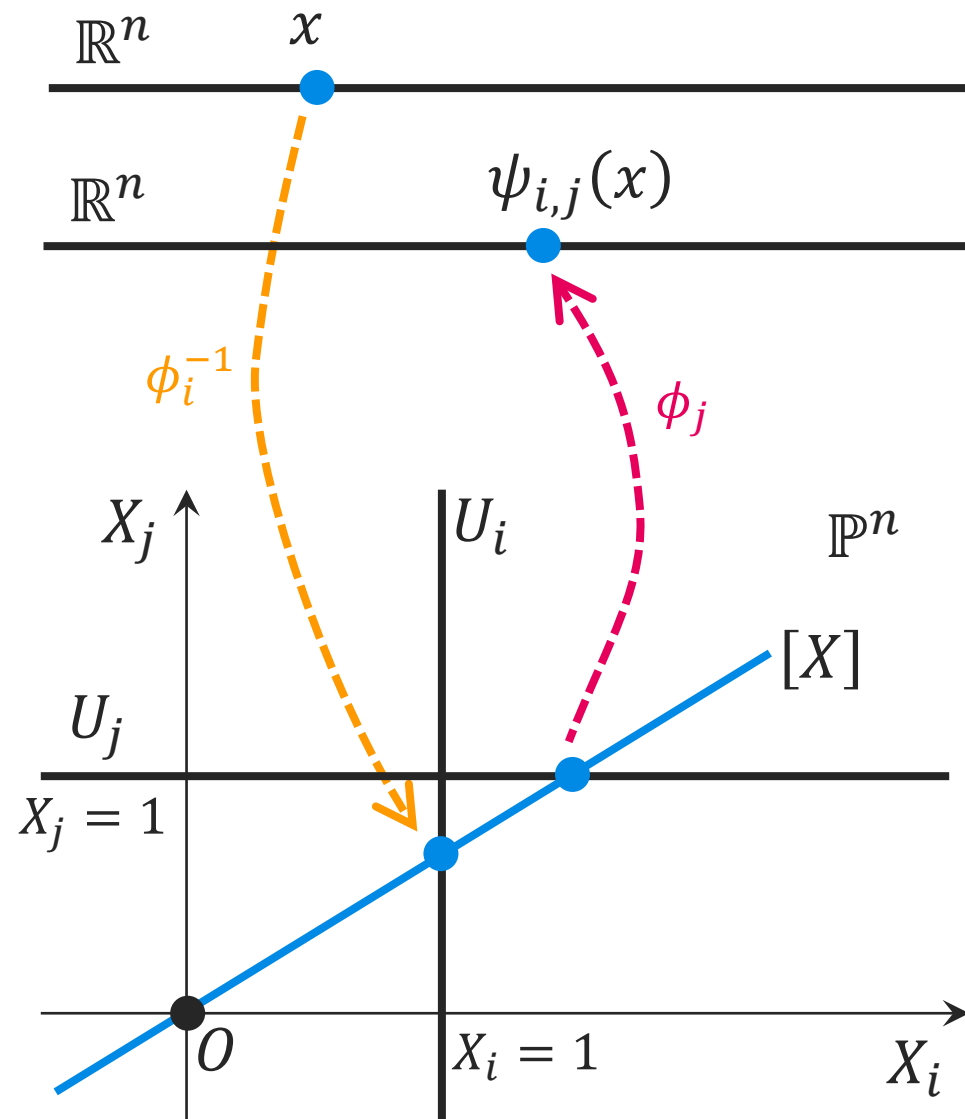
- $\mathbb{R}^n$ 同士を貼り合わせる関数

$$\psi_{i,j} := \phi_j|_{U_i \cap U_j} \circ (\phi_i^{-1}): D \rightarrow R$$

- 定義域: $D = \{\phi_i(X) \mid X \in U_j\} \subset \mathbb{R}^n$

- 値域: $R = \{\phi_j(X) \mid X \in U_i\} \subset \mathbb{R}^n$

- 例) $\psi_{0,n}((x_1, \dots, x_n)^\top)$
 $= \phi_n((1 : x_1 : \dots : x_n))$
 $= \left(\frac{1}{x_n}, \frac{x_1}{x_n}, \dots, \frac{x_{n-1}}{x_n}\right)^\top$



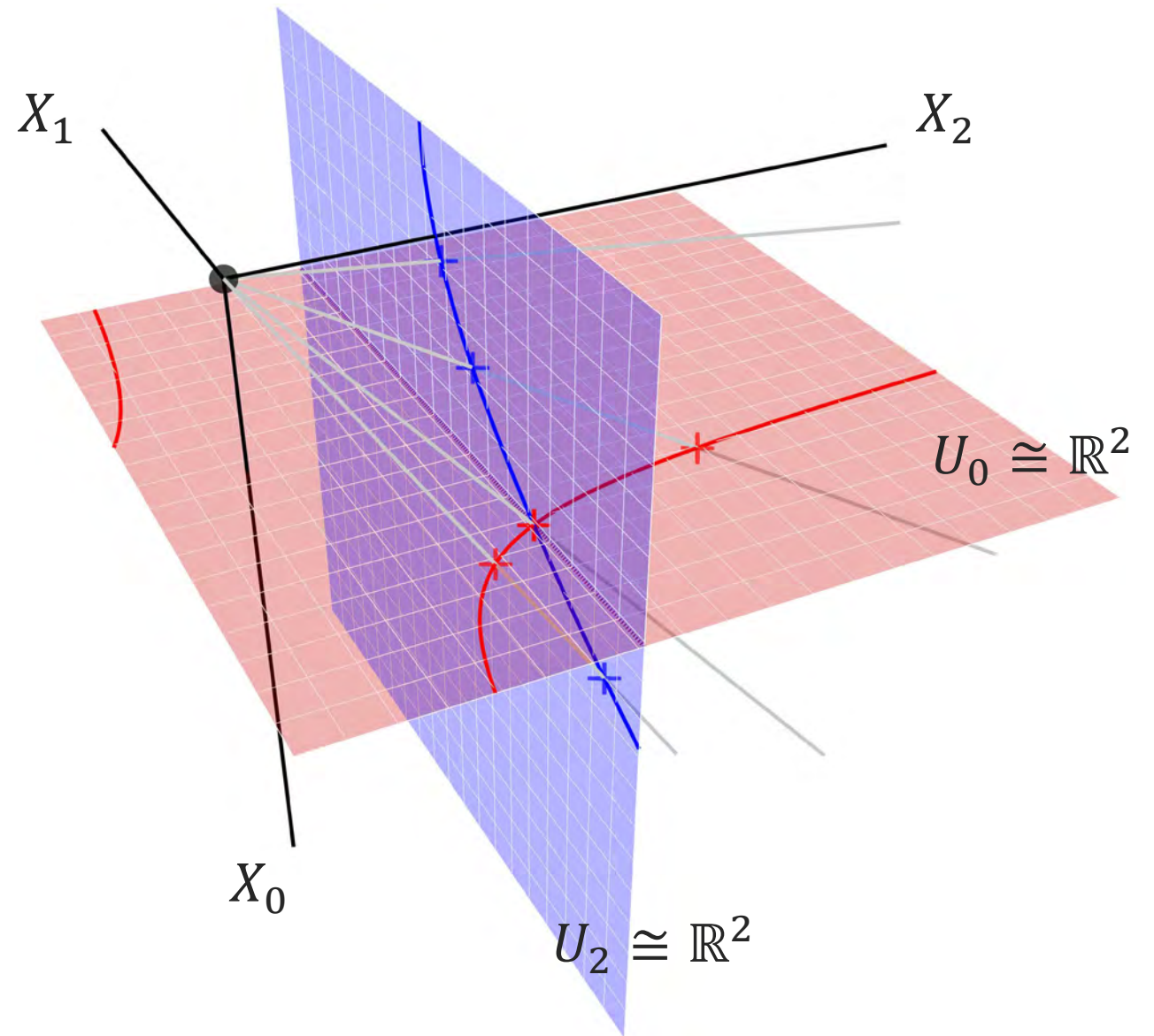
射影空間と線形空間

- 具体例によるイメージ

- U_0 上の軌跡は

$$\psi_{0,2}(X_1, X_2) = \left(\frac{1}{X_2}, \frac{X_1}{X_2} \right)$$

によって U_2 上の軌跡に写る



停留点の軌跡の変換

- r - x 空間から ρ - ξ 空間への変換

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \xi \end{pmatrix} := \psi_{0,n+1} \left(\begin{pmatrix} x \\ r \end{pmatrix} \right) = \left(\frac{1}{r}, \underbrace{\frac{x_1}{r}, \dots, \frac{x_n}{r}}_{\xi} \right)^T$$

- $\lim_{r \rightarrow \infty} x(r) = x_\infty \in \mathbb{R}^n$ のとき

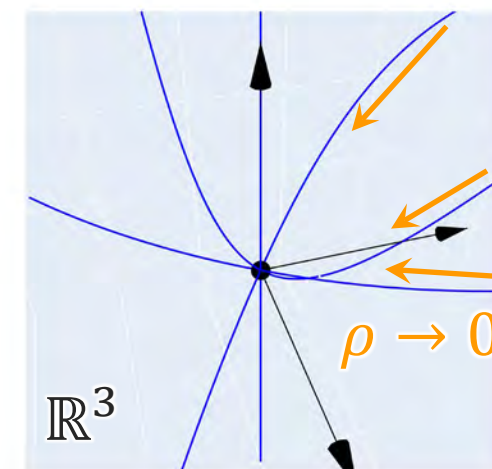
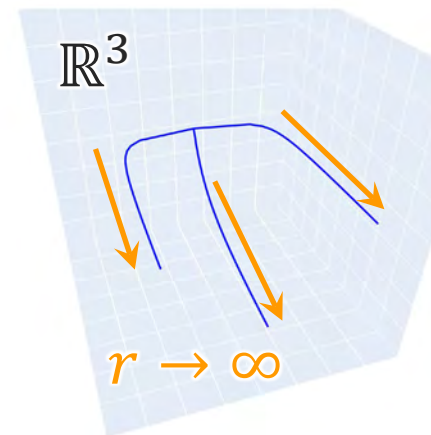
$$\begin{pmatrix} \rho \\ \xi \end{pmatrix} \rightarrow 0 \quad (r \rightarrow \infty) \quad (\text{原点へ収束})$$

- 収束点 x_∞ の情報は？

$$x_\infty = \lim_{r \rightarrow \infty} x(r) = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\xi(r)}{\rho(r)} = \lim_{\rho \rightarrow 0} \frac{\xi(\rho)}{\rho}$$

x_∞ は“勾配”として現れる！

簡単のため $P_x^{\text{loc}}(x; r, \hat{x}) = 0$
ではなく $P_x(x; r) = 0$ を考える



特異点

- “勾配”の計算

- $\mathcal{F}(\rho, \xi) = 0$: ρ - ξ 空間の軌道が満たす方程式
- 陰関数定理より $\mathcal{F}_\xi$ が正則であれば

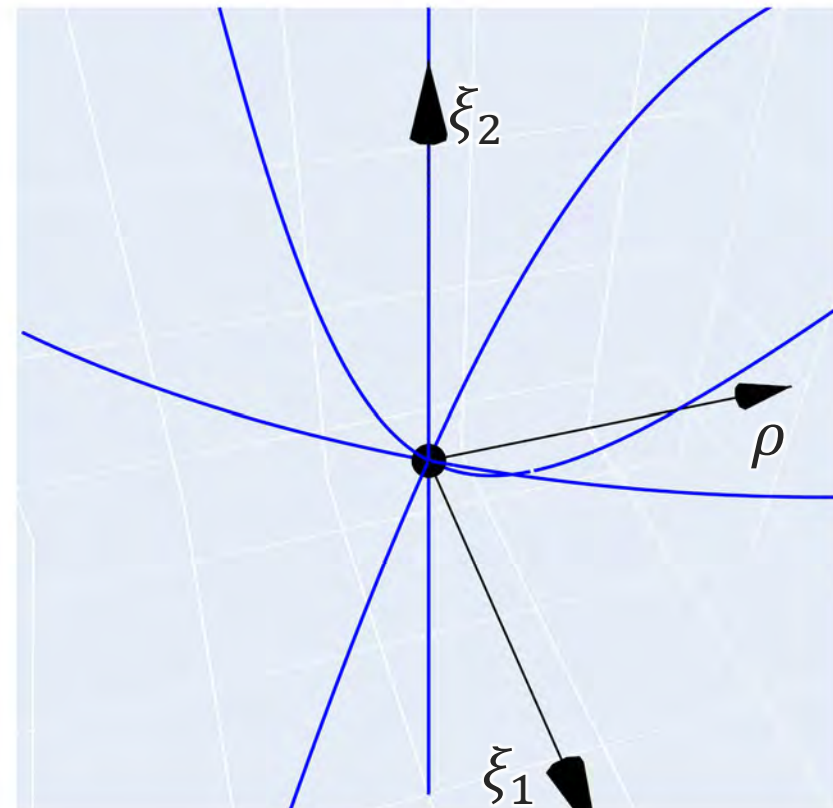
$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \frac{\xi(\rho)}{\rho} = \frac{d\xi}{d\rho} = (\mathcal{F}_\xi)^{-1} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \rho}$$

- 局所最適解が複数存在

- 複数の軌道が原点で**交差**



原点は $\mathcal{F}(\rho, \xi) = 0$ の
解集合の**特異点** ($\mathcal{F}_\xi$ が退化)



特異点

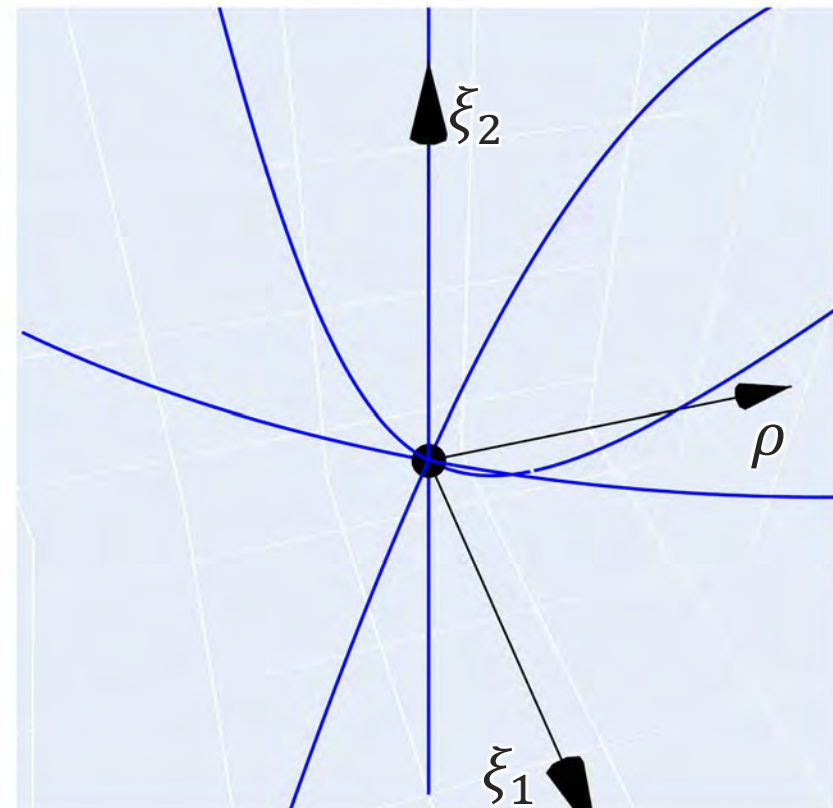
- 具体例

$$\mathcal{F}(\rho, \xi) = \begin{bmatrix} \rho^3 \xi_1 - 4\xi_1(\rho\xi_2 - \xi_1^2 + \rho^2) \\ \rho^2 \xi_2 - \rho^3 + 2(\rho\xi_2 - \xi_1^2 + \rho^2) \end{bmatrix}$$

原点でのヤコビアンを計算

$$\mathcal{F}_\xi(\rho, \xi) \Big|_{\rho=0, \xi=0} = \mathbf{0}_{2 \times 2}$$

特異行列

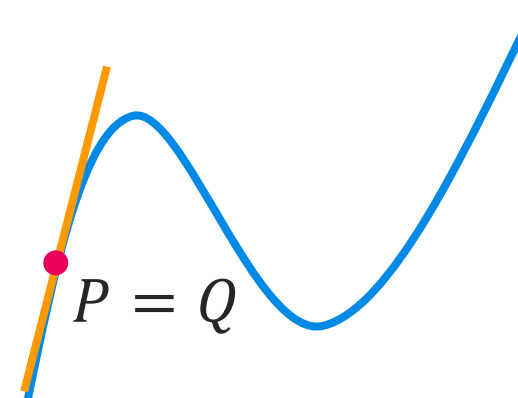
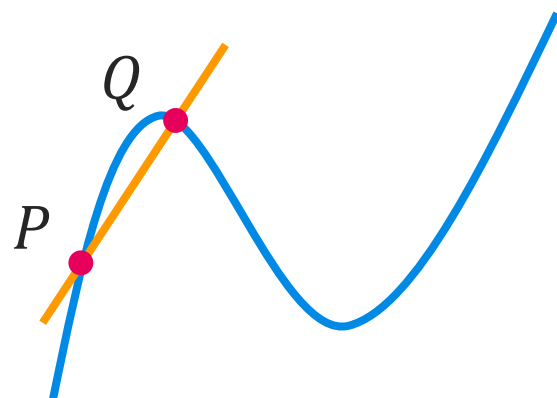
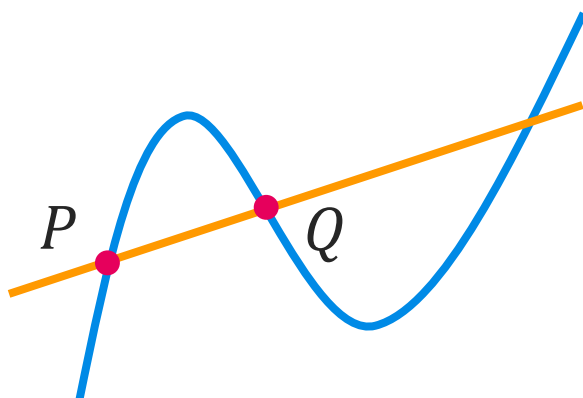
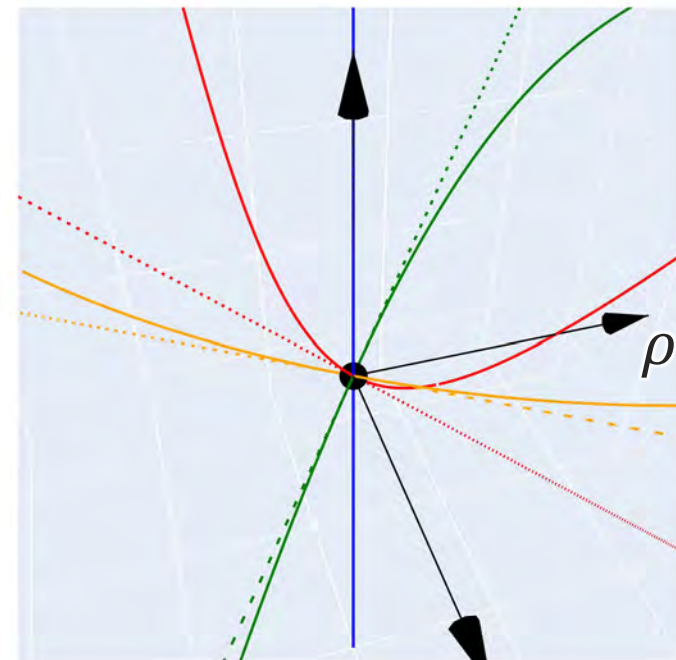


代数幾何学における“接線”

- 接線の幾何学的定義

- 割線： 曲線と2点以上で交わる線

- 接線： P, Q ：曲線と割線の交点
点 Q が曲線上を動いて P に収束するとき
割線 PQ が収束する先を**接線**と呼ぶ



代数幾何学における“接錐”

- $C_0(V)$: 集合 $V \ni 0$ の（原点における）接錐

- 原点における全ての接線の和集合

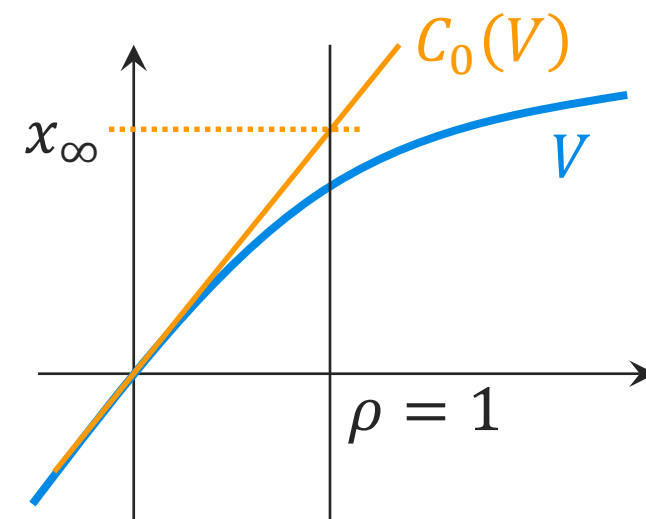
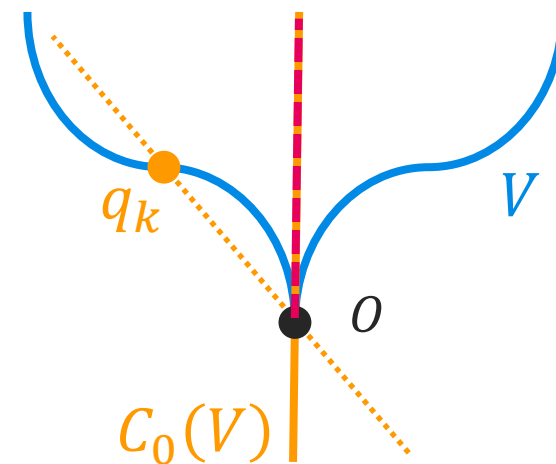
点列 $\{q_k\}_{k=1}^{\infty} \subset V \setminus 0$ で $\lim_{k \rightarrow \infty} q_k = 0$ なるものが存在し、
2点 $0, q_k$ を通る割線 L_k が直線 L に収束するとき、
 L を V の**原点における接線**と呼ぶ

- 凸解析の接錐とは異なる

- 「局所最適解＝傾き」となる直線が必ず存在

- $x_{\infty} = \lim_{\rho \rightarrow 0} \xi(\rho)/\rho$ は $(1, x_{\infty}^T) \in C_0(V)$ を満たす
- 接錐 $C_0(V)$ の定義方程式は最適性条件

凸解析の接錐



代数幾何学による最適性条件の導出

2 コマ目のおさらい

- 局所最適解 $\in \{x \in \mathbb{R}^n \mid (1, x) \in C_0(V)\}$
 - $V \subset \mathbb{R}^{n+1}$: 方程式 $\mathcal{F}(\rho, \xi) = 0$ の解軌跡
 - $C_0(V) \subset \mathbb{R}^{n+1}$: V の原点における接錐 = 接線全体の和集合
 - 局所最適解は接線の傾き ($\rho = 1$ のときの ξ の値) に対応
 - 解集合が $C_0(V)$ となる多項式 $\mathcal{G}$ が存在 $\rightarrow \mathcal{G}(1, x_\infty) = 0$ は最適性条件
- 代数幾何学
 - 代数方程式とその解集合の関係性を調べる数学の一分野
 - $\mathcal{F}$ から $\mathcal{G}$ を計算するアルゴリズムが存在

射影空間上の方程式

- ρ - ξ 空間上の方程式 $\mathcal{F} = 0$ を求める

- 材料: x - r 空間上の方程式 $F(x, r) = P_x(x; r) = 0$
- x - r 空間と ρ - ξ 空間は $\mathbb{P}^{n+1}$ を通して関連

簡単のため $P_x^{\text{loc}}(x; r, \hat{x}) = 0$
ではなく $P_x(x; r) = 0$ を考える

$$F(x, r) = 0$$

変換

$\mathbb{P}^{n+1}$ 上の方程式

変換

$$\mathcal{F}(\rho, \xi) = 0$$

- $\mathbb{P}^n$ 上の方程式を定める関数

- 一般の $\mathbb{R}^{n+1}$ 上の関数は方程式を定めない

ある整数 $d > 0$ が存在し

$$H(\lambda x) = \lambda^d H(x) \quad (\lambda \neq 0, x \in \mathbb{R}^{n+1})$$

を満たす関数 $H: \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$ を **斉次関数** と呼ぶ

斉次関数 H に対して

$$H = 0$$

は $\mathbb{P}^n$ 上の方程式として
意味を持つ (演習問題)

射影空間上の方程式

- **斉次多項式**： $\sum_{|\alpha|=d} c_{\alpha} x^{\alpha}$ (例： $x + y + z$, $xy + yz$, $x^3 + y^2z + xyz$, etc.)

- **斉次化**： $\mathbb{R}^n \cong U_0$ 上の方程式から $\mathbb{P}^n$ 上の方程式を作る操作

- 全次数 d の多項式 $f(x)$ ($x \in \mathbb{R}^n$) に対し, その斉次化を以下で定義

$$f^{\text{hom}}(X) := X_0^d f\left(\frac{X_1}{X_0}, \dots, \frac{X_n}{X_0}\right) \quad (X = (X_0 : \dots : X_n) \in \mathbb{P}^n)$$

- **非斉次化**： $\mathbb{P}^n$ 上の方程式から $\mathbb{R}^n \cong U_n$ 上の方程式を作る操作

- 斉次多項式 $g(X) = 0$ ($X \in \mathbb{P}^n$) に対し, その非斉次化を以下で定義

$$g^{\text{dehom}}(x) := g(x_1, x_2, \dots, x_n, 1) \quad (x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n)$$

射影空間と線形空間

• r - x 空間から ρ - ξ 空間への方程式の変換

$$0 = F(x, r)$$

斉次化

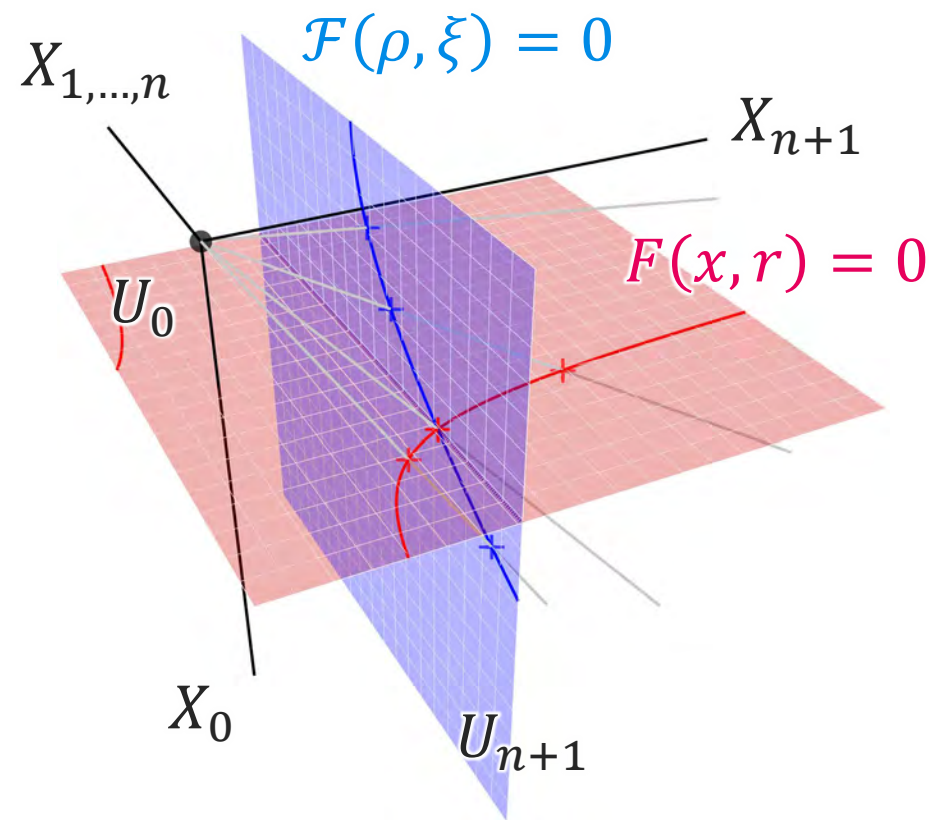
$$\begin{aligned} 0 &= F^{\text{hom}}(X_0, \dots, X_{n+1}) \\ &:= D(X_0)F\left(\frac{X_1}{X_0}, \dots, \frac{X_{n+1}}{X_0}\right) \end{aligned}$$

非斉次化

$$\begin{aligned} 0 = \mathcal{F}(\rho, \xi) &:= (F^{\text{hom}})^{\text{dehom}}(\rho, \xi) \\ &= F^{\text{hom}}(X_0, \dots, X_n, 1) \end{aligned}$$

$$D(X_0) := \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$$

d_i : 多項式 F_i の全次数



代数幾何学のイメージ

- 代数学

- 代数方程式

$$x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0$$

$$(x_1^2 + 1)(x_1^2 + x_2^2 - 1) = 0$$

$$x_1(x_1^2 + x_2^2 - 1) = 0$$

同じ集合を解に持つ多項式は複数存在

- イデアル

V 上で消える多項式の無限集合

$$I := \{f(x_1, x_2)(x_1^2 + x_2^2 - 1) \mid f(x_1, x_2): \text{多項式}\}$$

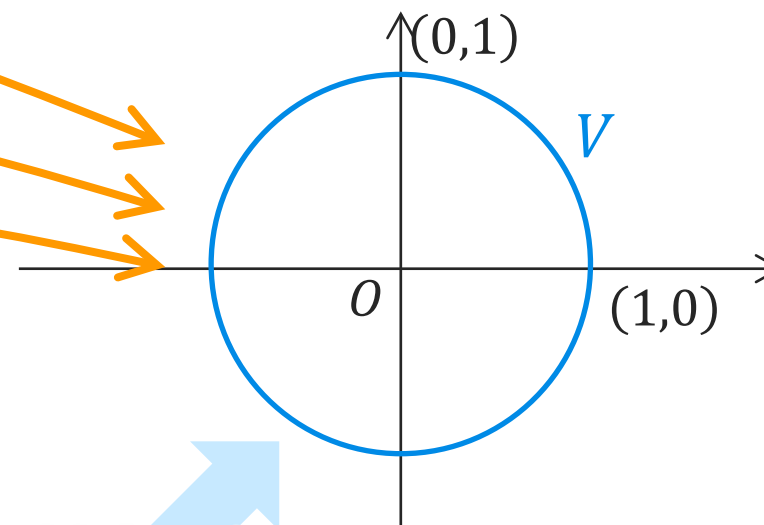
- 幾何学

- 集合・図形

解集合

解集合

解集合
(の一部)



対応関係

代数幾何学の基礎

- **多項式** : $f(x) = f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x^{\alpha}$
 $x = (x_1, \dots, x_n)$: 不定元
 $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$: 次数ベクトル
 - 単項式 : $x^{\alpha} = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$
- **多項式環** : $\mathbb{R}[x] = \mathbb{R}[x_1, \dots, x_n] := n$ 変数多項式 $f(x)$ 全ての集合
- **$\mathbb{R}[x]$ 上のイデアル** : $I := \{a_1 f_1 + \cdots a_s f_s \in \mathbb{R}[x] \mid a_1, \dots, a_s \in \mathbb{R}[x]\}$
 - 生成元 : $f_1, \dots, f_s \in \mathbb{R}[x]$ ($I = \langle f_1, \dots, f_s \rangle$ と書く)
 - $\mathbb{R}[x]$ 上の任意のイデアルは有限生成 (Hilbertの定理)
- **代数的集合** : $V(f_1, \dots, f_s) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid f_1(x) = \cdots = f_s(x) = 0\}$
 - 代数多様体 (Algebraic variety) とも (“manifold” ではない)

代数幾何学の基礎

- **イデアルと代数的集合の関係**

- イデアル $\rightarrow$ 代数的集合 : $\mathbf{V}(I) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) = 0 \text{ for all } f \in I\}$
- 代数的集合 $\rightarrow$ イデアル : $\mathbf{I}(V) := \{f \in \mathbb{R}[x] \mid f(x) = 0 \text{ for all } x \in V\}$
- 写像 $\mathbf{V}, \mathbf{I}$ は包含関係を逆転

$$\begin{aligned} I_1 \subseteq I_2 &\Rightarrow \mathbf{V}(I_1) \supseteq \mathbf{V}(I_2) \\ V_1 \subseteq V_2 &\Rightarrow \mathbf{I}(V_1) \supseteq \mathbf{I}(V_2) \end{aligned}$$

方程式の数が多い（少ない）
 $\updownarrow$
解集合は小さい（大きい）

- **計算機代数（数式処理，記号計算等とも）**

- 代数的対象（イデアルや代数的集合等）を計算するアルゴリズムを与える

- 多項式の演算

環：加算・乗算で閉じる集合

- 加算・乗算： $f, g \in \mathbb{R}[x] \Rightarrow f + g \in \mathbb{R}[x], f \cdot g \in \mathbb{R}[x]$

- 多項式同士の除算

- 単項式の除算 商

$$x^3y^4 = xy^4 \cdot x^2$$

- 多項式の除算

$$x^2y + xy = xy \cdot (x + y) + xy - xy^2$$

$$x^2y + xy = y \cdot (x + y) + x^2y - y^2$$

商？

余り？

項の順番によって
結果が変化

項順序

• 単項式の項順序

- 重要な性質：最小元（= 1）が存在
- 項順序の例

- 辞書式順序（Lex）： $x^3 >_{\text{lex}} x^2z^2 >_{\text{lex}} xy^2z >_{\text{lex}} xz^2$

- 逆辞書式順序（Revlex）： $x^3 >_{\text{revlex}} xy^2z >_{\text{revlex}} xz^2 >_{\text{revlex}} x^2z^2$

- 次数付き逆辞書式順序（Grevlex）： $xy^2z >_{\text{grevlex}} x^2z^2 >_{\text{grevlex}} x^3 >_{\text{grevlex}} xz^2$

Lex: Lexicographic Order

Revlex: Reverse Lex

Grevlex: Graded Revlex

• 割り算アルゴリズム

- 先頭項同士で割り算を実行
- 先頭項の順序が単調減少

$$x^2y >_{\text{lex}} xy^2 >_{\text{lex}} xy >_{\text{lex}} y^3$$

$$x^2y + xy = xy \cdot (x + y) - xy^2 + xy \quad (xy^2 >_{\text{lex}} x)$$

$$= (xy - y^2) \cdot (x + y) + xy + y^3 \quad (xy >_{\text{lex}} x)$$

$$= (xy - y^2 + y) \cdot (x + y) + y^3 - y^2 \quad (x >_{\text{lex}} y^3)$$

• 単項式の項順序

- 重要な性質：最小元（= 1）が存在  割り算アルゴリズムの終了を保証

- 項順序の例

- 辞書式順序（Lex）： $x^3 >_{\text{lex}} x^2z^2 >_{\text{lex}} xy^2z >_{\text{lex}} xz^2$
 - 逆辞書式順序（Revlex）： $x^3 >_{\text{revlex}} xy^2z >_{\text{revlex}} xz^2 >_{\text{revlex}} x^2z^2$
 - 次数付き逆辞書式順序（Grevlex）： $xy^2z >_{\text{grevlex}} x^2z^2 >_{\text{grevlex}} x^3 >_{\text{grevlex}} xz^2$
- Lex: Lexicographic Order
Revlex: Reverse Lex
Grevlex: Graded Revlex

• 割り算アルゴリズム

- 先頭項同士で割り算を実行

- 先頭項の順序が**単調減少**

$$x^2y >_{\text{lex}} xy^2 >_{\text{lex}} xy >_{\text{lex}} y^3$$

$$\begin{aligned} x^2y + xy &= xy \cdot (x + y) - xy^2 + xy \quad (xy^2 >_{\text{lex}} x) \\ &= (xy - y^2) \cdot (x + y) + xy + y^3 \quad (xy >_{\text{lex}} x) \\ &= (xy - y^2 + y) \cdot (x + y) + y^3 - y^2 \quad (x >_{\text{lex}} y^3) \end{aligned}$$

- 複数の多項式による除法

除算の順番によって商も剰余も変化

$$\begin{aligned}x^2y + xy^2 + y^2 &= (x + y) \cdot (xy - 1) + 1 \cdot (y^2 - 1) + x + y + 1 \\&= (x + 1) \cdot (y^2 - 1) + x \cdot (xy - 1) + 2x + 1\end{aligned}$$

- Gröbner 基底 : $I = \langle g_1, \dots, g_t \rangle$

- 性質の良い生成元の集合 (項順序ごとに定まる)
- Gröbner 基底による剰余は ($g_1, \dots, g_t$ の順番に依らず) 一意
- $\langle \{ \text{LT}(f) \mid f \in I \} \rangle = \langle \text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_t) \rangle$

$\text{LT}(f)$: 多項式 f の先頭項

接錐の定義式の計算に重要な性質

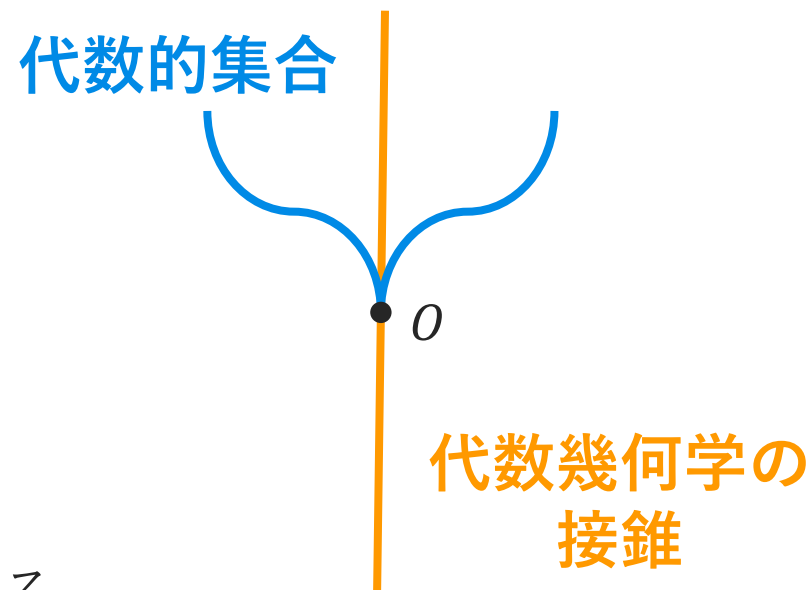
接錐の代数的定義

- 接錐のイデアルを用いた表現

$$C_0(V) = \mathbf{V}(\{f^{\min} \mid f \in \mathbf{I}(V)\})$$

- $f^{\min}$: 多項式 f から最低次の項のみ抜き出したもの
例) $f = x^2 + yz + xyz + xz^3 \rightarrow f^{\min} = x^2 + yz$
- イメージ : 高次項は原点近傍では低次項に比べて 0
→ 原点近傍の振る舞いは最低次の項によって決まる
- $V = \mathbf{V}(I)$ となるイデアル $I \subset \mathbf{I}(V)$ でも $C_0(V) \subset \mathbf{V}(\{f^{\min} \mid f \in I\})$ が成立

イデアル $\langle f^{\min} \mid f \in I \rangle$ の生成元 (有限個) を計算すれば良い



接錐の定義式の計算

- **イデアル $\langle f^{\min} \mid f \in I \rangle$ の生成元の計算**

- 定義からは計算できない (I は無限集合)

※ $f^{\min}$ は一般に複数の項を含むので
正確な議論ではないことに注意

- イメージ：もし $\text{LT}(f) = f^{\min}$ なる項順序があれば

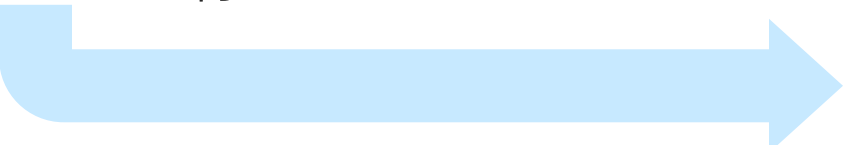
$$\langle f^{\min} \mid f \in I \rangle = \langle \text{LT}(f) \mid f \in I \rangle = \langle \text{LT}(g_1), \dots, \text{LT}(g_t) \rangle$$

より，Gröbner の計算で接錐の定義式が求まる

- **問題：全次数の小さい順で項順序は定義できない**

- **最小元が存在しない**（いくらでも高次の項が存在）

→ 割り算アルゴリズムが停止しない



**斉次化による
計算アルゴリズム**

斉次化と項順序

- 斉次化により定まる項順序

- 斉次化： $\sum_{|\alpha| \leq d} c_\alpha x^\alpha \rightarrow \sum_{|\alpha| \leq d} c_\alpha h^{(d-|\alpha|)} x^\alpha$ (d 次斉次多項式)
- $\mathbb{R}[x]$ の項順序 $>$ から以下のように $\mathbb{R}[h, x]$ の項順序 $>'$ を定める

$$h^\alpha x^\beta >' h^\gamma x^\delta \Leftrightarrow \alpha > \gamma \text{ or } (\alpha = \gamma \text{ and } \beta > \delta)$$

$$\begin{array}{ll} h \in \mathbb{R}, & \alpha, \gamma \in \mathbb{N} \\ x \in \mathbb{R}^n, & \beta, \delta \in \mathbb{N}^n \end{array}$$

まずは h の次数の大きい順 h の次数が等しい場合のみ
 $>$ で比較

- 斉次多項式 $\rightarrow h$ の次数：大 $\Leftrightarrow x$ の全次数：小

x の全次数が小さい項が先頭項となる

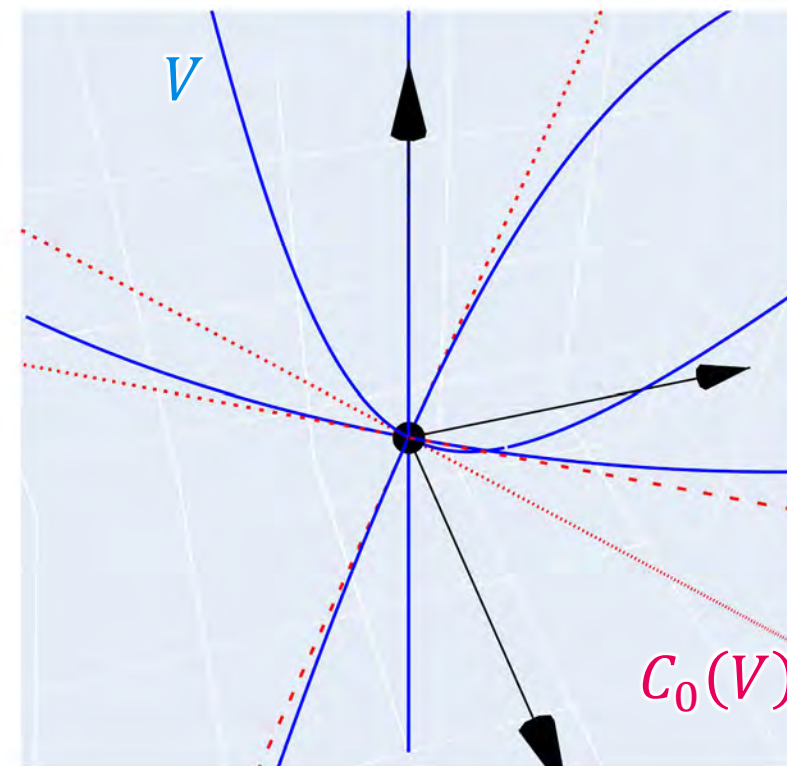
変数 h に関する
消去順序

接錐の計算アルゴリズム

- **Tangent Cone アルゴリズム** [Cox et al. 2015, Kreuzer and Robbiano 2005]

- 入力：イデアル $I \subset \mathbf{I}(V) \subset \mathbb{R}[x]$
- 出力： $C_0(V) \subset \mathbf{V}(J)$ を満たすイデアル $J \subset \mathbb{R}[x]$
- アルゴリズム

1. $f_1, \dots, f_s$ から $F_i = f_i^{\text{hom}} \in \mathbb{R}[X]$ を得る
2. X_0 に関する消去順序で
グレブナー基底 $G_1, \dots, G_t$ を計算
3. $g_i = G_i^{\text{dehom}} \in \mathbb{R}[x]$ を計算
4. イデアル $J = \langle g_1^{\min}, \dots, g_t^{\min} \rangle$ を返す



制約想定の不要な最適性条件の導出

- ペナルティ関数法に基づく最適性条件（再掲）

$\hat{x}$: COPの局所最適解

$\{r_k\}_{k=1}^{\infty}$: $\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = \infty$ を満たす単調増加列

↓

$\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$: $P_x^{\text{loc}}(x; r_k, \hat{x}) = 0$ を満たす点列が存在し, $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \hat{x}$

- $\hat{x}$ は未知 $\rightarrow$ 補助変数 $y \in \mathbb{R}^n$ で置換



停留条件 : $F(x, y, r) = P_x^{\text{loc}}(x; r, y) = 0$

制約想定の不要な最適性条件の導出

x - y - r 空間の方程式

$$F(x, y, r) = P_x^{\text{loc}}(x; r, y) = 0$$

斉次化・非斉次化

ρ - ξ - η 空間の方程式

$$\mathcal{F}(\rho, \xi, \eta) = 0$$

Tangent Cone
アルゴリズム

接錐の定義式

$$\mathcal{G}(\rho, \xi, \eta) = 0$$

$$\begin{aligned}\rho &= 1, \\ \xi &= x_\infty \rho, \\ \eta &= y_\infty \rho\end{aligned}$$

$$\mathcal{G}(1, x_\infty, y_\infty) = 0$$

$y_k = y_\infty = \hat{x}$ であれば
最適性条件より $x_\infty = y_\infty$

**制約想定が不要で
代数的な最適性条件
 $G(x) := \mathcal{G}(1, x, x) = 0$**

数値例 1

- 簡単な例で提案法を試してみる

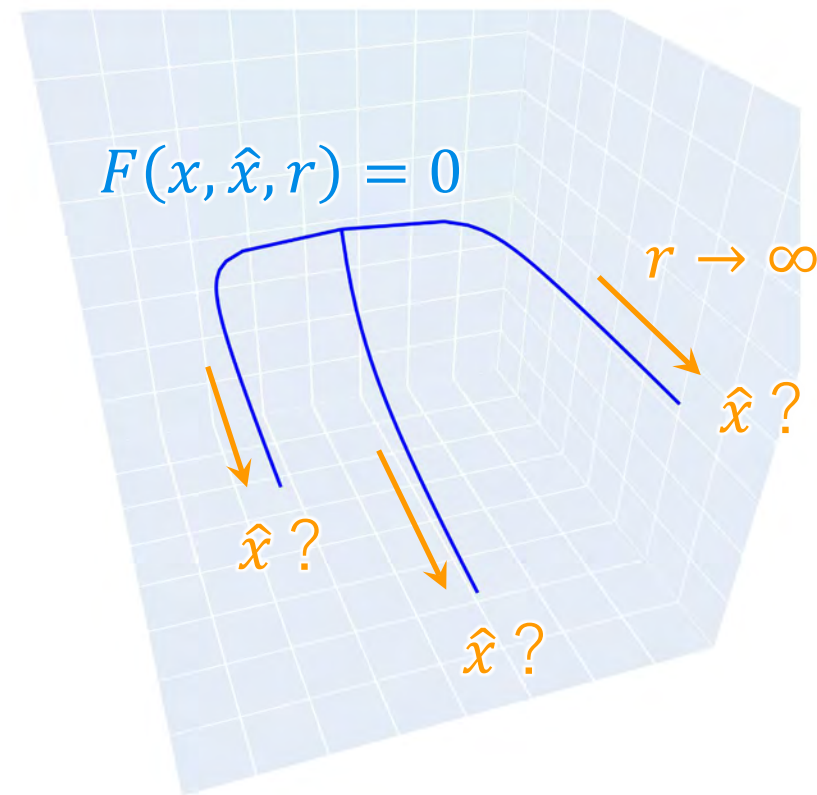
$$\begin{aligned} \min_x & \frac{1}{2} (x_1^2 + (x_2 - 1)^2) \\ \text{s.t. } & x_2 = x_1^2 - 1 \end{aligned}$$

局所ペナルティ関数

$$\begin{aligned} P^{\text{loc}}(x; r, y) = & \frac{1}{2} (x_1^2 + (x_2 - 1)^2) \\ & + r(x_2 - x_1^2 + 1)^2 + \|x - y\|^2 \end{aligned}$$

停留条件

$$F(x, y, r) := P_x^{\text{loc}}(x; r, y) = \begin{bmatrix} x_1 - 4rx_1(x_2 - x_1^2 + 1) + (x_1 - y_1) \\ x_2 - 1 + 2r(x_2 - x_1^2 + 1) + (x_2 - y_2) \end{bmatrix}$$



数値例 1

斉次化・非斉次化

$$\mathcal{F}(\rho, \xi, \eta) = \begin{bmatrix} \rho^3 \xi_1 - 4\xi_1(\rho\xi_2 - \xi_1^2 + \rho^2) + \rho^3(\xi_1 - \eta_1) \\ \rho^2 \xi_2 - \rho^3 + 2(\rho\xi_2 - \xi_1^2 + \rho^2) + \rho^2(\xi_2 - \eta_2) \end{bmatrix}$$

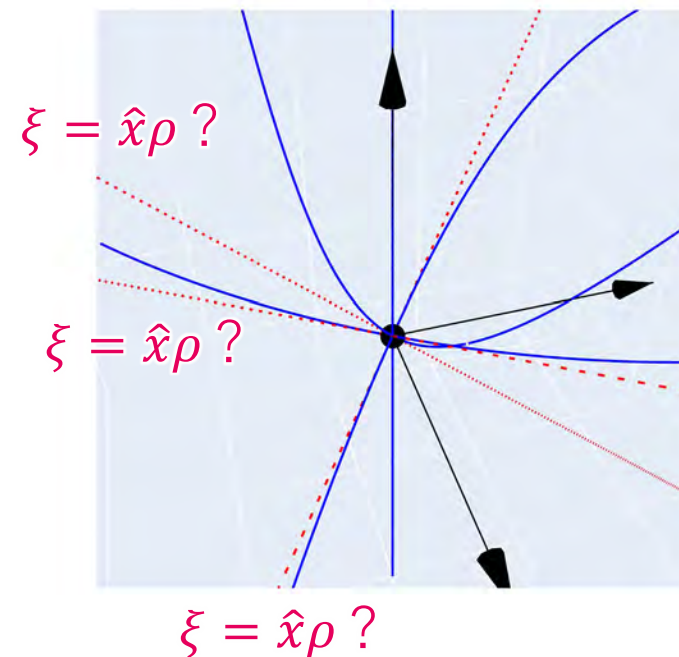
接錐の定義式の計算

$$\mathcal{G}(\rho, \xi, \eta) = [\rho, \xi, \eta \text{ の } \{5\text{次}, 2\text{次}, 4\text{次}\} \text{ 斉次多項式}]$$

$\rho = 1, \xi = \eta = x$ の代入

$$G(x_1, x_2) = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -2x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_2 + 1 \\ 6x_1^2 - 6x_2 - 6 \\ 2x_1x_2 - x_1 \end{bmatrix} \quad \longrightarrow \quad (x_1, x_2) = \left(-\frac{1}{2}\sqrt{6}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}\sqrt{6}, \frac{1}{2}\right), (0, -1)$$

$$\mathcal{F}(\rho, \xi, \hat{x}\rho) = 0$$



数値例 1

斉次化・非斉次化

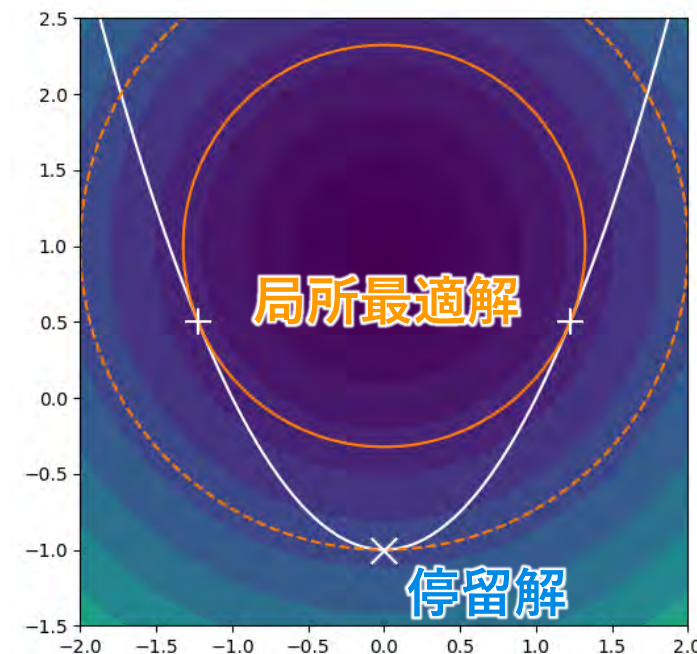
$$\mathcal{F}(\rho, \xi, \eta) = \begin{bmatrix} \rho^3 \xi_1 - 4\xi_1(\rho\xi_2 - \xi_1^2 + \rho^2) + \rho^3(\xi_1 - \eta_1) \\ \rho^2 \xi_2 - \rho^3 + 2(\rho\xi_2 - \xi_1^2 + \rho^2) + \rho^2(\xi_2 - \eta_2) \end{bmatrix}$$

接錐の定義式の計算

$$\mathcal{G}(\rho, \xi, \eta) = [\rho, \xi, \eta \text{ の}\{5\text{次}, 2\text{次}, 4\text{次}\}\text{斉次多項式}]$$

$\rho = 1, \xi = \eta = x$ の代入

$$G(x_1, x_2) = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -2x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_2 + 1 \\ 6x_1^2 - 6x_2 - 6 \\ 2x_1x_2 - x_1 \end{bmatrix} \quad \longrightarrow \quad (x_1, x_2) = \left(-\frac{1}{2}\sqrt{6}, \frac{1}{2} \right), \left(\frac{1}{2}\sqrt{6}, \frac{1}{2} \right), (0, -1)$$



数値例 2

- 補助変数 y の役割

$$f(x) = x_1(x_1^2 + x_2^2 - 1)$$

$$g(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1$$

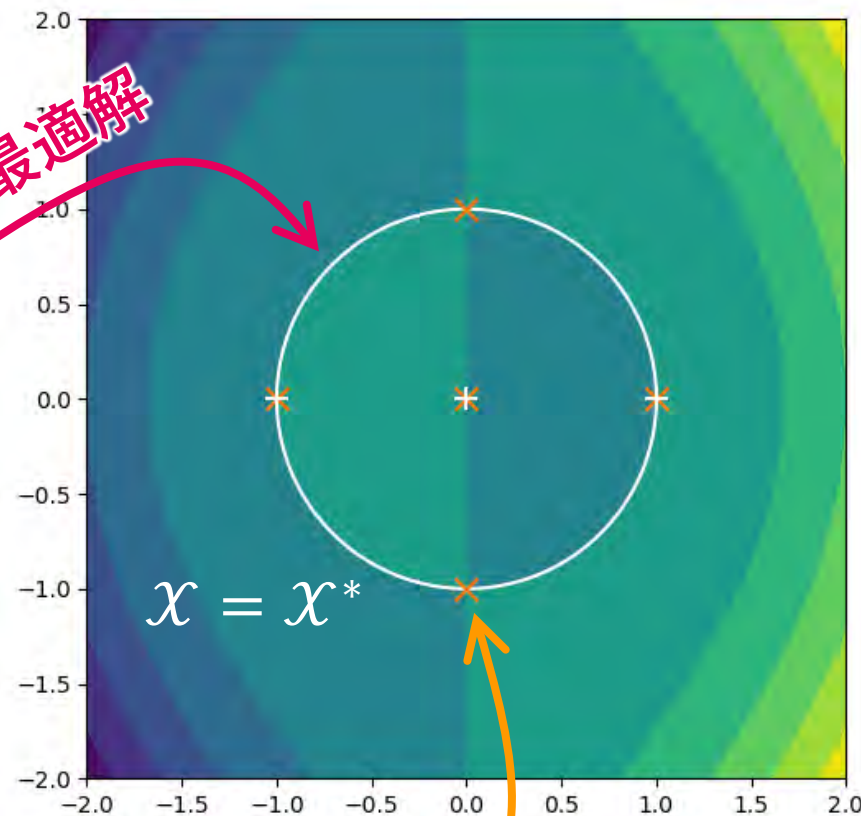
- 提案法により求めた条件式

$$G(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} x_1^3 + x_1x_2^2 - x_1 \\ x_2^3 + x_1^2x_2 - x_2 \end{bmatrix}$$

- $P^{\text{loc}}(x; r, y)$ ではなく $P(x; r)$ を用いた場合

$$G'(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} x_1^3 + x_1x_2^2 - x_1 \\ x_2^3 + x_1^2x_2 - x_2 \\ x_2^3 - x_2 \\ x_1x_2 \end{bmatrix}$$

全ての局所最適解



一部の局所最適解のみ

数値例 2

- CQが成り立つ場合

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^2} \quad & \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ \text{s.t.} \quad & 2x_1 + x_2 - 5 = 0 \end{aligned}$$

- 提案法により求めた条件式

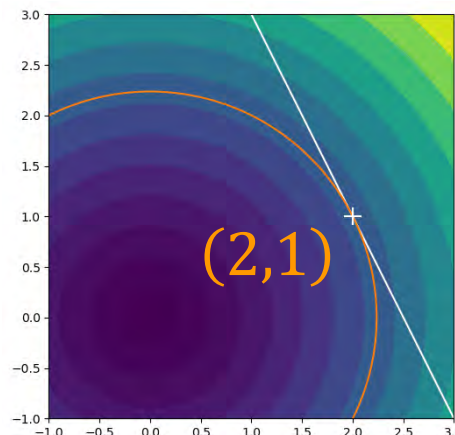
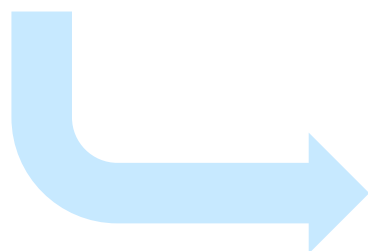
$$G(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} x_1 - 2 \\ x_2 - 1 \end{bmatrix}$$

- CQが成り立たない場合

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^2} \quad & \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ \text{s.t.} \quad & (2x_1 + x_2 - 5)^2 = 0 \end{aligned}$$

- 提案法により求めた条件式

$$G(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} (x_2 - 1)^3 \\ x_1 - 2x_2 \end{bmatrix}$$

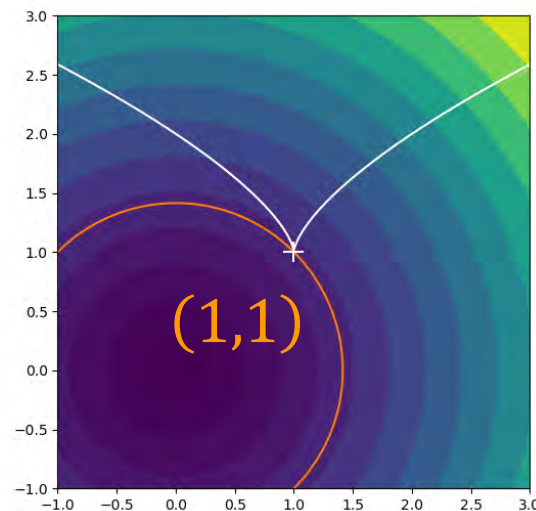


数値例 3

- CQが成り立たない例

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^2} \quad & \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) \\ \text{s.t.} \quad & (x_1 - 1)^2 - (x_2 - 1)^3 = 0 \end{aligned}$$

高次多項式だが
実根は1つ



- 提案法により求めた条件式

$$G(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} x_2^5 - 5x_2^4 + \frac{2}{3}x_1^2x_2 + 10x_2^3 - 2x_1x_2 - 11x_2^2 + \frac{25}{3}x_2 - 2 \\ x_1^3 + x_2^3 - 2x_1^2 + \frac{2}{9}x_1x_2 - \frac{11}{3}x_2^2 + \frac{7}{3}x_1 + \frac{37}{3}x_2 - 2 \\ x_1x_2^2 - \frac{4}{3}x_1x_2 + x_1 - \frac{2}{3}x_2 \end{bmatrix}$$

- 制約想定が不要かつ代数的な最適性条件の導出

- ペナルティ関数に基づく最適性条件が基礎
- ペナルティパラメータの極限操作を射影空間上で厳密に考慮
- 代数幾何学に基づく数式処理で代数的な条件を導出
- 実行可能集合 $\mathcal{X}$ とその表式 $g(x)$ のギャップを代数幾何学で埋める

- 雑談

- 最適化で多項式というと実代数幾何に基づいたSOS最適化やQE（限量記号消去法）というイメージだが、幾何と代数を結びつけるという意味では普通の代数幾何も有効
- D加群の理論に基づく数式処理では多項式よりも広い範囲の非線形関数を（間接的に）取り扱える → ホロノミック勾配法[Nakayama et al. 2011], 逐次ベイズ推定の効率化[Iori and Ohtsuka 2023]

- **[Andreani et al. 2011]** R. Andreani, G. Haeser, and J. M. Martinez, "On sequential optimality conditions for smooth constrained optimization," *Optimization*, vol. 60, no. 5, pp. 627-641, 2011. [Bertsekas 2005] D. Bertsekas, *Nonlinear Programming*, Athetna Scientific, 2016.
- **[Cox et al. 2015]** D. A. Cox, J. Little, and D. O'Shea, *Ideals, Varieties, and Algorithms*, Springer, 4th edition, 2015.
- **[Fukuda and Fukushima 2017]** E. H. Fukuda and M. Fukushima, "A note on the squared slack variables technique for nonlinear optimization," *JORSJ*, vol. 0, no. 3, pp. 262-272, 2017.
- **[Fiacco and MacCormick 1990]** A. V. Fiacco and G. P. MacCormick, *Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques*, Wiley, 1968.
- **[Iori and Ohtsuka 2020]** T. Iori and T. Ohtsuka, "Limit operation in projective space for constructing necessary optimality condition of polynomial optimization problem," *JORSJ*, vol. 63, no. 4, pp. 114-133, 2020.
- **[Iori and Ohtsuka 2023]** T. Iori and T. Ohtsuka, "Nonlinear Bayesian filtering via holonomic gradient method with quasi moment generating function," *AJC*, vol. 25, no. 4, pp. 2655-2670, 2023.
- **[Kreuzer and Robbiano 2005]** M. Kreuzer and L. Robbiano, *Computational Commutative Algebra 2*, Springer-Verlag, 2000.
- **[Martinez and Svaiter 2003]** J. M. Martinez and B. F. Svaiter, "A practical optimality condition without constraint qualifications for nonlinear programming," *JOTA*, vol. 118, pp. 117-133, 2003.
- **[Nakayama et al. 2011]** H. Nakayama, K. Nishiyama, M. Noro, K. Ohara, T. Sei, N. Takayama, and A. Takemura, "Holonomic gradient descent and its application to the Fisher-Bingham integral," *Advances in Applied Mathematics*, vol. 47, no. 3, pp. 639-658, 2011.
- **[福島 2001]** 福島雅夫, 「非線形最適化の基礎」, 朝倉書店, 2001.

SageMathの利用方法

- ① **CoCalc**（クラウドサービス）を使う

- 「CoCalc」で検索
- アカウント作成
- ダウンロードしたファイルをアップロード

- ② **Anaconda** の仮想環境としてインストール

- Anaconda or Miniconda をインストール
- "conda config --add channels conda-forge"
- "conda config --set channel_priority strict"
- 仮想環境の作成: "conda create -n sage sage python=3.XX" (XX = 10, 11)
- Jupyter カーネルにSageMathを登録
"jupyter kernelspec install --user \$(sage -sh -c 'ls -d \$SAGE_VENV/share/jupyter/kernels/sagemath') --name sagemath-dev"

「Install from conda-forge」

<https://doc.sagemath.org/html/en/installation/conda.html>

「Setting up SageMath as a Jupyter kernel in an existing Jupyter notebook or JupyterLab installation」

<https://doc.sagemath.org/html/en/installation/launching.html#setting-up-sagemath-as-a-jupyter-kernel-in-an-existing-jupyter-notebook-or-jupyterlab-installation>