オペレーションズ･リサーチ基礎

非線形計画：
制約つき問題の最適性条件

塩浦昭義
東京工業大学 経営工学系
shioura.a.aa@m.titech.ac.jp

期末試験について

- 日時：2023年2月6日（月）13:45～15:15
- 場所： 西9号館3階W933
- 手書きのA4用紙一枚のみ持ち込み可（印刷やコピーは不可）
  - これも採点の対象，試験終了後に回収します
- 教科書，ノート等の持ち込みは不可
- 座席はこちらで指定
- 試験内容：第8回目以降の講義で教えたところ
  - ネットワーク最適化
  - 非線形計画
- 50点満点，20点以下は不合格

制約つき非線形計画最適化問題

例1：長方形の外周最小化問題

最小化 $2x + 2y$

条件 $xy \geqq 1$

$x, y \geqq 0$

非線形の制約条件

例2：線形制約つき関数最大化問題

最大化 $-3x^2 + 5y^3 + 2xy^2 - 4y$

条件 $3x + 5y \leq 12$

$7x + 2y \leq 8$

$x, y \geqq 0$

非線形の目的関数

制約つき問題の一般的な形

最小化 $f(x)$ 条件 $g_i(x) \leqq 0 \ (i = 1, 2, \ldots, m)$

※等式制約を含んでも良い

x は実行可能解 ⇔ 条件 $g_i(x) \leqq 0 \ (i = 1, 2, \ldots, m)$ を満たす

実行可能領域 ＝ 実行可能解すべての集合

制約つき問題の局所的最適解

局所的最適解 x* ⇔ x* の付近だけに注目したとき、x* は最小

制約なし問題「最小化 $f(x)$ 」における局所的最適解 x*
⇔ あるδ >0 が存在して，$\|x - x^*\| \leq \delta$ を満たす
すべての $x \in \mathbb{R}^n$ に対して $f(x) \geq f(x^*)$

制約つき問題「最小化 $f(x)$　条件 $x \in F$」における
局所的最適解（極小解）x*
⇔ あるδ >0 が存在して，$\|x - x^*\| \leq \delta$ を満たす
すべての $x \in F$ に対して $f(x) \geq f(x^*)$

制約つき最適化問題の最適性条件

カルーシュ・キューン・タッカー(KKT)条件

ある $\lambda_i\ (i=1,2,\dots,m)$ が存在して以下の式を満たす

- $\nabla f(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\nabla g_i(x)=0$
- $\lambda_i g_i(x)=0 (i=1,2,\dots,m)$
- $g_i(x)\le 0\ (i=1,2,\dots,m)$ ←x は実行可能解
- $\lambda_i\ge 0\ (i=1,2,\dots,m)$

定義:制約$g_i(x)\le 0$は $x=x^*$ において有効←→ $g_i(x^*)=0$ 成立

定理(制約つき最適化問題の最適性条件(必要条件)):
有効制約の添字集合$\{i_1,\dots,i_k\}$に対し,
$\nabla g_i(x)\ (i\in\{i_1,\dots,i_k\})$が一次独立のとき
x* は局所的最適解 → x* はKKT条件を満たす

※線形計画問題における相補性定理の一般化

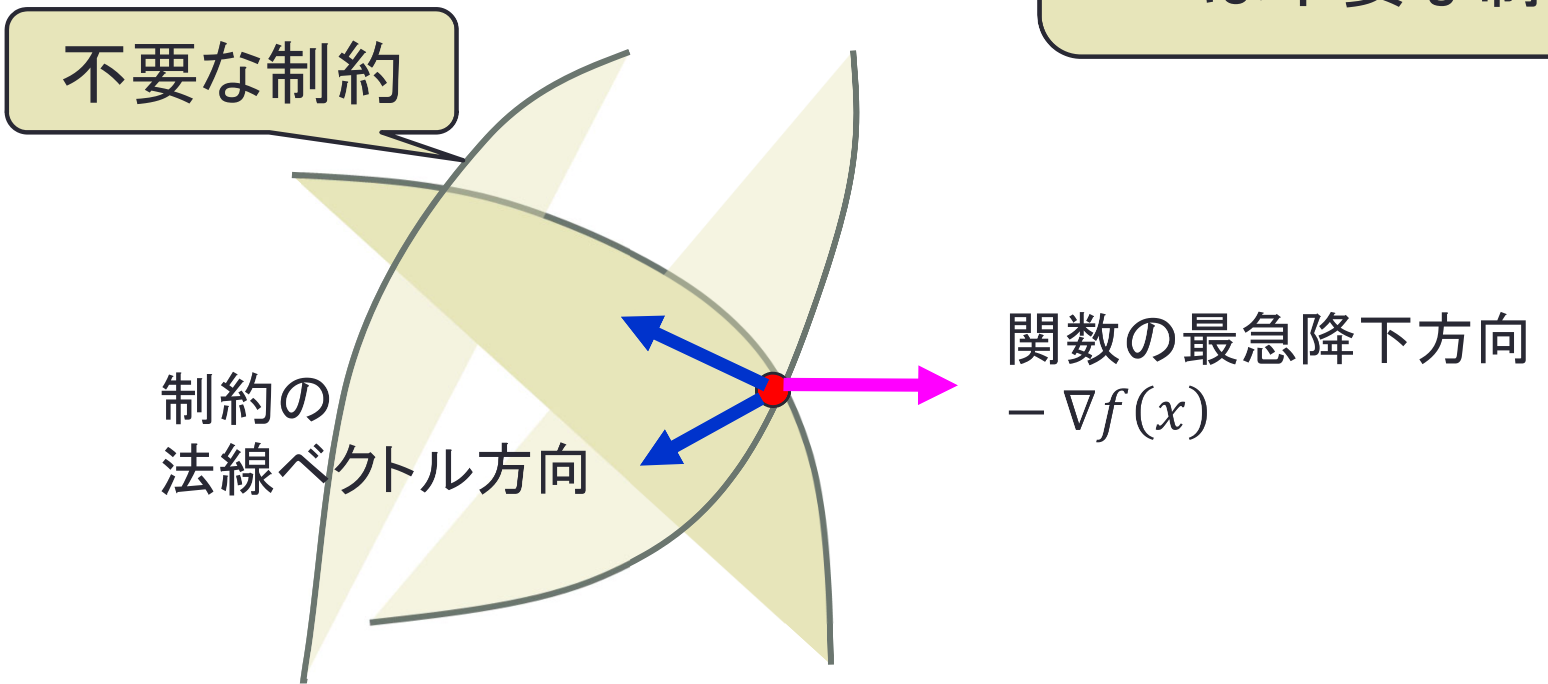
KKT条件の理解

KKT条件

- $\nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x) = 0$
- $\lambda_i g_i(x) = 0 (i = 1,2, \dots, m)$
- $g_i(x) \le 0 \ (i = 1,2, \dots, m)$
- $\lambda_i \ge 0 \ (i = 1,2, \dots, m)$

$-\nabla f(x) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x)$
目的関数の最急降下方向と必要な制約の法線ベクトルがつり合っている

$\lambda_i = 0 \rightarrow g_i(x) \le 0$
は不要な制約



ある種の線形計画問題と双対問題

主問題

最小化　$c_1x_1+\cdots+c_nx_n$

条件　$a_{11}x_1+\cdots+a_{1n}x_n \geqq b_1$

$a_{21}x_1+\cdots+a_{2n}x_n \geqq b_2$

…

$a_{m1}x_1+\cdots+a_{mn}x_n \geqq b_m$

不等式制約
非負条件なし

双対問題

最大化　$b_1y_1+b_2y_2+\cdots+b_my_m$

条件　$a_{11}y_1+a_{21}y_2+\cdots+a_{m1}y_m=c_1$

$a_{12}y_1+a_{22}y_2+\cdots+a_{m2}y_m=c_2$

…

$a_{1n}y_1+a_{2n}y_2+\cdots+a_{mn}y_m=c_n$

$y_1 \geqq 0,\ y_2 \geqq 0,\ \ldots,\ y_m \geqq 0$

等式制約

双対問題の等式条件

$\Leftrightarrow\ \boldsymbol{a}_1y_1+\boldsymbol{a}_2y_2+\cdots+\boldsymbol{a}_my_m=\boldsymbol{c}$

相補性定理

主問題

最小化　$c_1x_1+\cdots+c_nx_n$

条件
$$a_{11}x_1+\cdots+a_{1n}x_n \geqq b_1$$
$$a_{21}x_1+\cdots+a_{2n}x_n \geqq b_2$$
$$\cdots$$
$$a_{m1}x_1+\cdots+a_{mn}x_n \geqq b_m$$

双対問題

最大化　$b_1y_1+b_2y_2+\cdots+b_my_m$

条件
$$\boldsymbol{a}_1y_1+\boldsymbol{a}_2y_2+\cdots+\boldsymbol{a}_my_m=\boldsymbol{c}$$
$$y_1\geqq 0,\ y_2\geqq 0,\ \ldots,\ y_m\geqq 0$$

相補性条件
$$(a_{i1}x_1+\cdots+a_{in}x_n-b_i)y_i=0$$
$$(i=1,2,\ldots,m)$$

定理：　**x**: 主問題の解と
y: 双対問題の解は最適解
$\Leftrightarrow$
x は主問題の実行可能解
yは双対問題の実行解
相補性条件を満たす

相補性定理の書き換え

主問題

最小化　$c_1x_1+\cdots+c_nx_n$

条件

$$a_{11}x_1+\cdots+a_{1n}x_n \geqq b_1$$

$$a_{21}x_1+\cdots+a_{2n}x_n \geqq b_2$$

$$\cdots$$

$$a_{m1}x_1+\cdots+a_{mn}x_n \geqq b_m$$

双対問題

最大化　$b_1y_1+b_2y_2+\cdots+b_my_m$

条件

$$\boldsymbol{a}_1y_1+\boldsymbol{a}_2y_2+\cdots+\boldsymbol{a}_my_m=\boldsymbol{c}$$

$$y_1 \geqq 0,\ y_2 \geqq 0,\ \ldots,\ y_m \geqq 0$$

相補性条件

$$(a_{i1}x_1+\cdots+a_{in}x_n-b_i)y_i=0 \quad (i=1,2,\ldots,m)$$

定理： **x**: 主問題の解は最適解 ←→双対問題のある解 **y** に対し，以下が成り立つ

- **x** は主問題の実行可能解
- **y**は双対問題の実行可能解
- 相補性条件を満たす

KKT条件との関係

主問題

最小化　$c_1x_1+\cdots+c_nx_n$

条件

$a_{11}x_1+\cdots+a_{1n}x_n \geqq b_1$

$a_{21}x_1+\cdots+a_{2n}x_n \geqq b_2$

…

$a_{m1}x_1+\cdots+a_{mn}x_n \geqq b_m$

双対問題

最大化　$b_1y_1+b_2y_2+\cdots+b_my_m$

条件

$\boldsymbol{a}_1y_1+\boldsymbol{a}_2y_2+\cdots+\boldsymbol{a}_my_m=\boldsymbol{c}$

$y_1 \geqq 0,\ y_2 \geqq 0,\ \ldots,\ y_m \geqq 0$

相補性条件

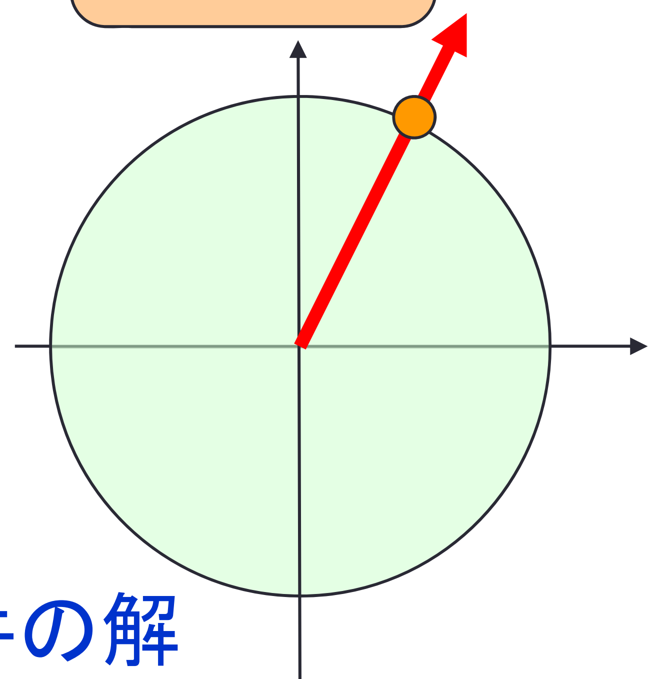
$$(a_{i1}x_1+\cdots+a_{in}x_n-b_i)y_i=0 \quad (i=1,2,\ldots,m)$$

- $\nabla f(x)+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\nabla g_i(x)=0$
- $\lambda_i g_i(x)=0 (i=1,2,\ldots,m)$
- $g_i(x)\leq 0\ (i=1,2,\ldots,m)$
- $\lambda_i\geq 0\ (i=1,2,\ldots,m)$

KKT条件の例(その1)

例　最小化 $f(x_1, x_2) = -x_1 - 2x_2$

条件　$g(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 6 \leq 0$



$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix} \quad \nabla g(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix}$$

KKT条件

$$\begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} = 0$$

$$\lambda(x_1^2 + x_2^2 - 6) = 0$$

$$x_1^2 + x_2^2 - 6 \leq 0$$

$$\lambda \geq 0$$

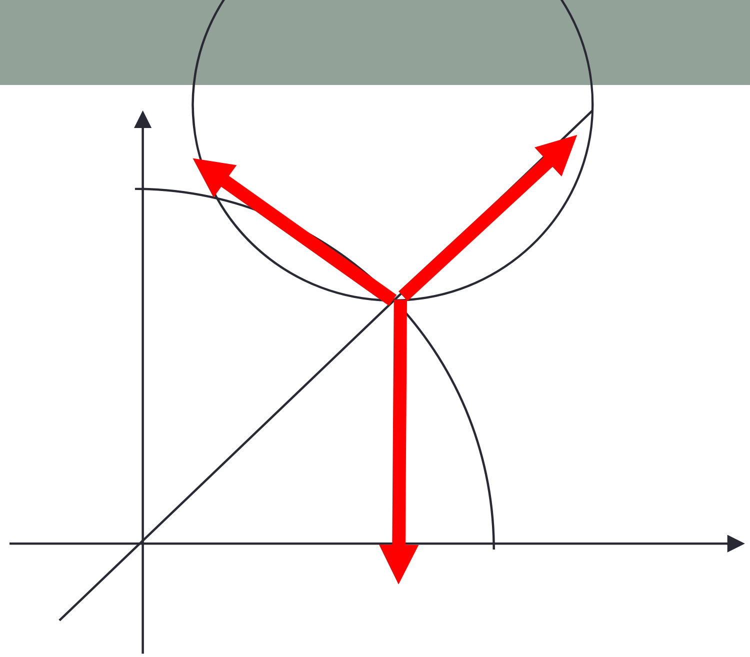
KKT条件の解

$$(x_1, x_2) = \left(\sqrt{\frac{6}{5}}, \sqrt{\frac{24}{5}} \right)$$

$$\lambda = \frac{1}{x_2}$$

最適解

KKT条件の例(その2)



最小化 $(x-1)^2+(y-2)^2$

条件　$x^2+y^2-2 \leq 0$

$-x+y \leq 0$

(福島雅夫「新版数理計画入門」朝倉書店, 2011, p.127の修正版)

KKT条件は $\begin{pmatrix} 2x-2 \\ -2y+4 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 2x \\ 2y \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ①

$\lambda_1(x^2+y^2-2)=0,\ \lambda_2(-x+y)=0$ ②

問題の制約式 $x^2+y^2-2 \leq 0, -x+y \leq 0,\quad \lambda_i \geq 0\ (i=1,2)$

最適解 (x*,y*)=(1,1) において

不等式制約は2つともに等式成立(有効制約)

制約の勾配ベクトルに関する条件は成立($\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$は一次独立)

(x*,y*)=(1,1) を①に代入➔ $\begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

➔ $\lambda_1 = -\frac{1}{4}, \lambda_2 = -1.$ これらは②式を満たす.

等式制約のみの場合のKKT条件

等式制約のみの問題

最小化 $f(x)$　条件 $g_i(x) = 0\ (i\ =\ 1, 2, \ldots, m)$

等式を書き換え → $g_i(x) \leqq 0,\ g_i(x) \geqq 0\ (i = 1, 2, \ldots, m)$

KKT条件は

- $\nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x) = 0$
- $\lambda_i g_i(x) = 0 (i = 1,2, \ldots, m)$
- $g_i(x) \leq 0\ (i = 1,2, \ldots, m)$
- $\lambda_i \geq 0\ (i = 1,2, \ldots, m)$

→

等式だけの条件へ

- $\nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x) = 0$
- $g_i(x) = 0\ (i = 1,2, \ldots, m)$

定理(等式制約のみの場合)

$\nabla g_i(x)\ (i\ = 1,2, \ldots, m)$が一次独立のとき

x* は局所的最適解 ➔ x* はKKT条件を満たす

ラグランジュの未定乗数法

- 等式制約のみの問題に対する解法
- KKT条件（連立方程式）を満たす解を求める

$$\nabla f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(x) = 0$$

$$g_i(x) = 0 \ (i = 1,2, \ldots, m)$$

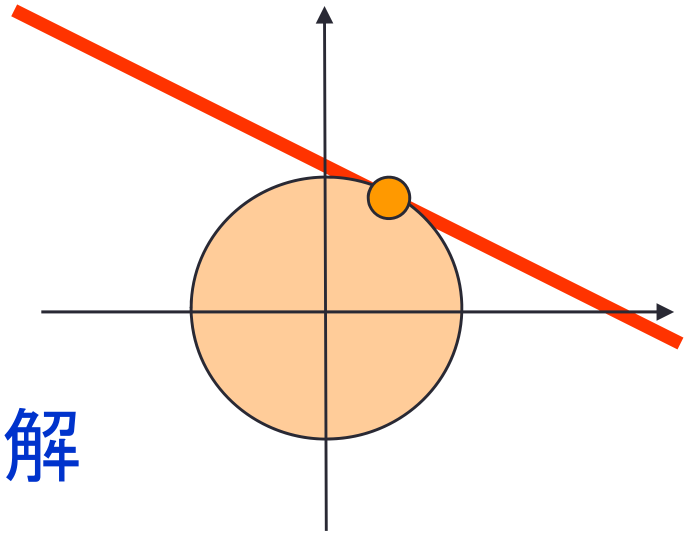
ラグランジュの未定乗数法：例

- 等式制約のみの問題に対する解法
- KKT条件（連立方程式）を満たす解を求める

凸関数

例 最小化 $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$

条件 $g(x_1, x_2) = x_1 + 2x_2 - 3 = 0$



KKT条件

$$\begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = 0$$

$$x_1 + 2x_2 - 3 = 0$$

KKT条件の解

$$(x_1, x_2) = \left(\frac{3}{5}, \frac{6}{5}\right), \lambda = -\frac{6}{5}$$

最適解

制約つき問題の一般的な解法

- ペナルティ関数法
- バリア関数法

後で説明

- 内点法　　KKT条件を満たす解を反復計算により求める
- 逐次2次計画法　　２次関数の問題に繰り返し近似して解く

などなど

■ いずれも，極小解（の近似解）を求めることが目的
■ 目的関数および制約が凸関数のときは最適解（の近似解）が得られる

ペナルティ関数法

制約つき問題を制約なし問題へ変換して解く

最小化　$f(x)$　条件　$g_i(x) \leqq 0$ $(i = 1, \ldots, m)$

ペナルティ関数の導入

$P(x)$: x が制約を満たすとき ＝0

満たさないとき ＞0

なるべく制約を満たしてほしい

（ペナルティ関数）

例えば，$P(x)=\sum_i \max\{g_i(x), 0\}$

最小化　$f(x)+\mu P(x)$　条件　なし

$\mu>0$は定数

ペナルティ問題

最急降下法，ニュートン法などを利用して解ける

ペナルティ関数法

ペナルティ問題

最小化　$f(x)+\mu P(x)$　条件　なし　　$\mu>0$は定数

μが十分大きい

⇒ペナルティ問題の最適解は$P(x)\fallingdotseq 0$を満たす

⇒x はもとの問題の制約をほぼ満たす

⇒x はもとの問題の最適解に近い

ペナルティ関数法の流れ

1. 適当にμの値を定める.
2. ペナルティ問題の最適解x_μを求める.
3. x_μが最適解に近い⇒終了
4. μを大きい値に変更，2に戻る.

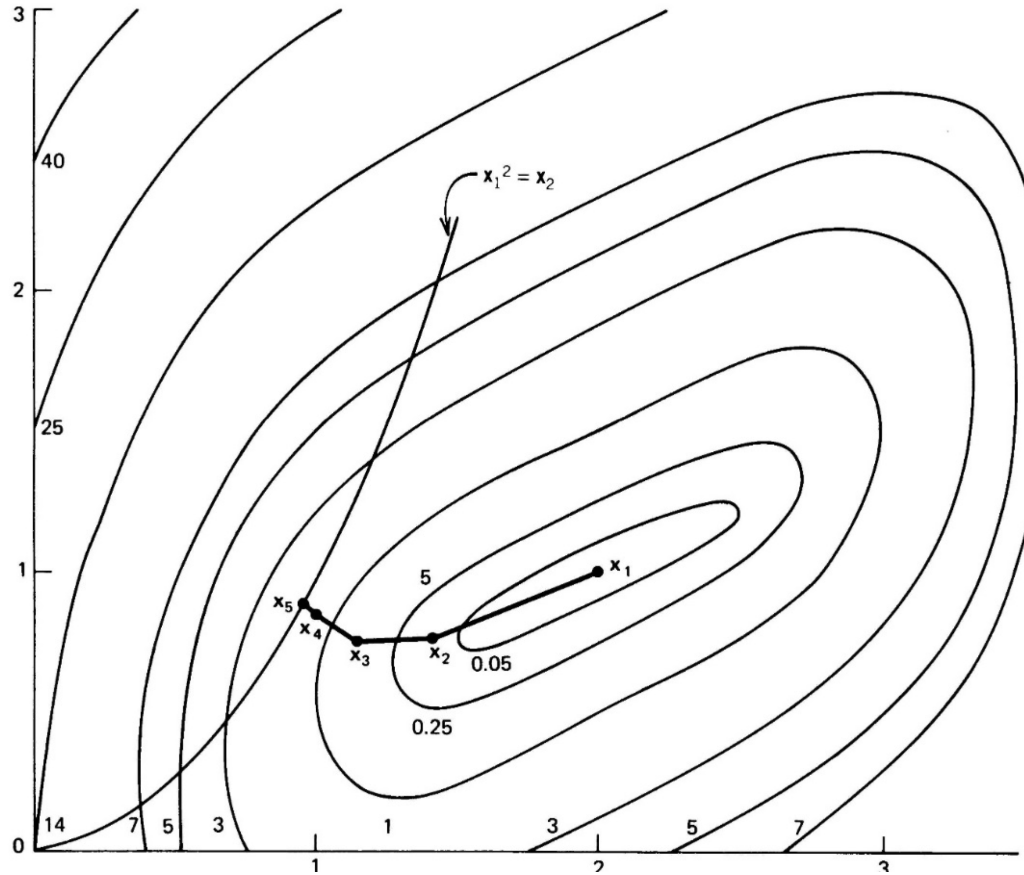
x_μは最初は制約を満たさない ⇒ 徐々に満たすようになる

ペナルティ関数法の実行例

最小化　$(x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$

条件　　$x_1^2-x_2=0$

μ	ペナルティ問題の最適解
0.1	(1.453, 0.7608)
1.0	(1.168, 0.7407)
10.0	(0.9906, 0.8425)
100.0	(0.9507, 0.8875)
1000.0	(0.9461, 0.8934)



Bazaraa, Sherali, Shetty: Nonlinear Programming: Theory and Algorithms, Wiley (1993)

バリア関数法

制約つき問題を制約なし問題へ変換して解く

最小化　 $f(x)$　条件　 $g_i(x) \leqq 0 \ (i = 1, \ldots, m)$

バリア関数の導入

$B(x)$: 制約を満たすx に対して定義される

制約を必ず満たしてほしい

$g_i(x) \to 0$ のとき $B(x) \to \infty$

（バリア関数）

例えば，$B(x) = -\sum_i 1/g_i(x)$

最小化　 $f(x)+\mu B(x)$　条件　なし

$\mu > 0$ は定数

バリア問題

最適解は，もとの問題の制約を必ず満たす

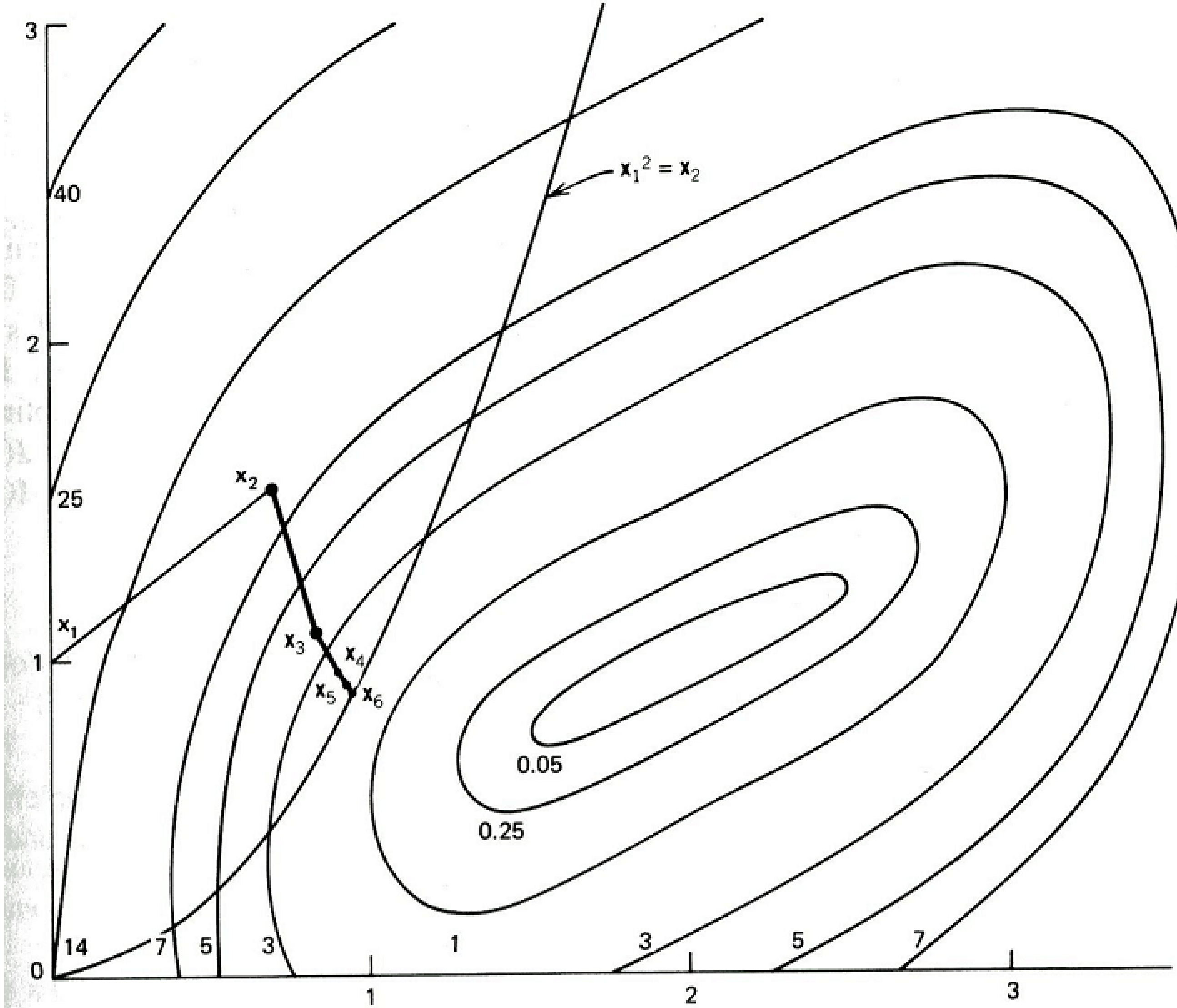
バリア関数法の実行例

最小化　$(x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$

条件　　$x_1^2-x_2 \leqq 0$

Bazaraa, Sherali, Shetty: Nonlinear Programming: Theory and Algorithms, Wiley (1993)

μ	バリア問題の最適解
10.0	(0.7079, 1.5315)
1.0	(0.8282, 1.1098)
0.1	(0.8989, 0.9638)
0.01	(0.9294, 0.9162)
0.001	(0.9403, 0.9011)
0.0001	(0.94389, 0.89635)



演習問題（提出の必要なし）

下記の問題に対するKKT条件を書き,
それを使って最適解をすべて求めよ.
いずれの問題ともに, KKT条件は最適解の必要十分条件である.

(1) 最小化 $x^2 - y^2$
条件 $x^2 + 4y^2 = 1$

(2) 最小化 $\sum_{i=1}^{n} x_i$
条件 $\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 1$

(3) 最小化 $x^2 + 2y^2$
条件 $x \geq 2$
$x - y \geq 0$
$x + y \geq 0$

解答例

(1) 最小化 $x^2 - y^2$
条件 $x^2 + 4y^2 = 1$

KKT条件は $\begin{pmatrix} 2x \\ -2y \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 2x \\ 8y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$x^2 + 4y^2 = 1$$

第1式より $2x(1+\lambda) = 0$ が得られる.

$x = 0$ のときの解は $(x, y) = \left(0, \pm\frac{1}{2}\right)$, 目的関数-1/4

$\lambda = -1$ のときの解は $(x, y) = (\pm 1, 0)$, 目的関数 1

よって最適解は $(x, y) = \left(0, \pm\frac{1}{2}\right)$

解答例

(2) 最小化 $\sum_{i=1}^{n} x_i$

条件 $\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 1$

KKT条件は $\begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + 2\lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 1$

これらの式より，$x_i = -\frac{1}{2}\lambda$ が成り立つ.

この条件の下で実行可能かつ目的関数値が最小なのは

$\lambda = 2/\sqrt{n}$ のとき.

よって最適解は$x_i = -\frac{1}{\sqrt{n}}$ $(i = 1,2, \dots, n)$

解答例

(3) 最小化 $x^2 + 2y^2$
条件 $x \geq 2$
$x - y \geq 0$
$x + y \geq 0$

$\Rightarrow$

最小化 $x^2 + 1/4y^2$
条件 $-x + 2 \leq 0$
$-x + y \leq 0$
$-x - y \leq 0$

KKT条件は $\begin{pmatrix} 2x \\ \frac{1}{2}y \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} + \lambda_3 \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ①

$(-x + 2)\lambda_1 = 0, (-x + y)\lambda_2 = 0, (-x - y)\lambda_3 = 0$ ②

$-x + 2 \leq 0, -x + y \leq 0, -x - y \leq 0, \lambda_i \geq 0\ (i = 1,2,3)$

以下では，$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ の符号の組合せを$(+, 0, +), (0, +, 0)$ のように表す.

・$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (+, +, +)$ または $(0, +, +)$ のとき:

②より$-x + y = -x - y = 0$ ➔ $x = y = 0$ これは実行可能解ではない.

・$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (0,0,0)$ のとき:①より$x = \frac{1}{2}, y = 2$. これは実行可能解ではない.

・$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (0, +, 0)$ のとき:①，②より $\begin{pmatrix} 2x \\ \frac{1}{2}y \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, x = y$

これらの条件および $\lambda_2 > 0$ を満たす解は存在しない.

・$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (0,0, +)$ のとき:①，②より $\begin{pmatrix} 2x \\ \frac{1}{2}y \end{pmatrix} + \lambda_3 \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, x = -y$

これらの条件および $\lambda_3 > 0$ を満たす解は存在しない.

解答例

(3) 最小化 $x^2 + 2y^2$
条件 $x \geq 2$
$x - y \geq 0$
$x + y \geq 0$

$\Rightarrow$

最小化 $x^2 + 1/4y^2$
条件 $-x + 2 \leq 0$
$-x + y \leq 0$
$-x - y \leq 0$

KKT条件は $\begin{pmatrix} 2x \\ \frac{1}{2}y \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} + \lambda_3 \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ①

$(-x + 2)\lambda_1 = 0, (-x + y)\lambda_2 = 0, (-x - y)\lambda_3 = 0$ ②

$-x + 2 \leq 0, -x + y \leq 0, -x - y \leq 0, \lambda_i \geq 0\ (i = 1,2,3)$

以下では，$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ の符号の組合せを$(+, 0, +), (0, +, 0)$ のように表す．

・$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (+, 0,0)$ のとき：①，②より $\begin{pmatrix} 2x \\ \frac{1}{2}y \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, x = 2$

➔ $x = 2, y = 0$ これは実行可能解，目的関数値 4

・$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (+, +, 0)$ のとき：②より $x = 2, x = y$ ➔ $x = y = 2$
これは実行可能解，目的関数値 12

・$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (+, 0+)$ のとき：②より $x = 2, x = -y$ ➔ $x = 2, y = -2$
これは実行可能解，目的関数値 12

以上より，最適解は(2,0) ただひとつ