第2章　制約つき最適化

2.1　はじめに

$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$

$$\left\| \begin{array}{ll} \text{最小化} & f(\mathbf{x}) \quad \text{ただし } \mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \\ \text{制約条件} & g_i(\mathbf{x}) = 0 \quad (i = 1, 2, \cdots, m) \end{array} \right. \tag{2.1}$$

を等式制約つき最適化問題と呼ぶ.

$$\left\| \begin{array}{ll} \text{最小化} & f(\mathbf{x}) \\ \text{制約条件} & g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (i = 1, 2, \cdots, m) \end{array} \right. \tag{2.2}$$

を不等式制約つき最適化問題と呼ぶ.

$$g_i(\mathbf{x}) = 0 \iff g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \text{ かつ } -g_i(\mathbf{x}) \leq 0$$

なので，等式制約つき最適化問題は不等式制約つき最適化問題に含まれる．従って (2.2) を単に制約つき最適化問題とも呼ぶ.

極小解 制約つき最適化問題の許容領域を F とする．点 $\mathbf{x}^*$ に対し，F における $\mathbf{x}^*$ の近傍で $f(\mathbf{x}^*)$ が最小になるとき，$\mathbf{x}^*$ は極小解であるという.

以下 f, g_i は滑らかな関数で，集合 $g_i = 0$ は折れたり尖った点はなく，また互いに接したりせずに普通に交わるとする.

2.2　等式制約つき最適化問題と Lagrange の未定乗数法

例 2.1.

$$\left\| \begin{array}{ll} \text{最小化} & 2x + 3y \\ \text{制約条件} & x^2 + y^2 - 1 = 0 \end{array} \right. \tag{2.3}$$

を考える．極値は直線 $2x+3y=k$ (一定) が円 $x^2+y^2-1=0$ と接する点でとる．この点では $2x+3y=k$ の法線ベクトル $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ と $x^2+y^2-1=0$ の法線ベクトル

$$\nabla(x^2+y^2-1) = \begin{pmatrix} \partial_x(x^2+y^2-1) \\ \partial_y(x^2+y^2-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x \\ 2y \end{pmatrix}$$

が平行になるので，ある定数 λ が存在して，

$$\begin{pmatrix} 2x \\ 2y \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} = 0$$

となる．よって $x=-\lambda,\ y=-\frac{3}{2}\lambda$ となり，これを条件式に代入して

$$\lambda^2 + \frac{9}{4}\lambda^2 = 1$$

より，$\lambda = \pm\frac{2}{\sqrt{13}},\ x=\mp\frac{2}{\sqrt{13}},\ y=\mp\frac{3}{\sqrt{13}}$ を得る．

例 2.2. 上の例を少し一般化して

$$\left\|\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x,y) \\ \text{制約条件} & x^2+y^2-1=0 \end{array}\right. \tag{2.4}$$

を考える．極値は曲線 $f(x,y)=k$ (一定) が円 $x^2+y^2-1=0$ と接する点でとる．この点では $f(x,y)=k$ の法線 $\nabla f(x,y)$ と条件式 $x^2+y^2-1=0$ の法線ベクトル $\nabla(x^2+y^2-1)$ が平行になるので，ある定数 λ が存在して，

$$\nabla f(x,y) + \lambda\nabla(x^2+y^2-1) = 0$$

となる．これと条件式 $x^2+y^2-1=0$ を連立して極値 (停留点) を求める方法を Laglange の未定乗数法という．また

$$L(x,y) = f(x,y) + \lambda(x^2+y^2-1)$$

を Lagrange 関数という．($\nabla L=0$ とすると上の式が得られる．)

一般の等式制約つき最適化問題 (2.1) については以下のようになる．

定理 2.1. $\lambda = (\lambda_1, \cdots, \lambda_m)$ とし，ラグランジュ関数を

$$L(\mathbf{x},\lambda) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(\mathbf{x})$$

と定める．$\mathbf{x}^*$ が極小解ならばある $(\lambda_1, \cdots, \lambda_m)$ が存在して

$$\begin{aligned} \nabla L(\mathbf{x}^*, \lambda) =& \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) = 0 \\ g_i(\mathbf{x}^*) =& 0 \quad (i = 1, 2, \cdots, m) \end{aligned}$$

が成り立つ．

例題

1.

$$\left\| \begin{array}{ll} \text{最小化} & x + 2y \\ \text{制約条件} & x^2 + y^2 - 4 = 0 \end{array} \right.$$

2.

$$\left\| \begin{array}{ll} \text{最大化} & \sqrt{xy} \\ \text{制約条件} & 300 - 10x - 20y = 0 \end{array} \right.$$

3.

$$\left\| \begin{array}{ll} \text{最大化} & \text{直方体の体積} \\ \text{制約条件} & \text{半径 1 の球に内接する} \end{array} \right.$$

4. 2 次形式 $(x, y) \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ の $x^2 + y^2 = 1$ の下での最小値は最小の固有値に属する固有ベクトルで与えられることを示せ (この事実は n 変数でも成り立つ) .

5. (直線への距離の 2 乗の最小化) 直線 $ax + by + c = 0$ ($a^2 + b^2 = 1$ とする) と n 点 (x_i, y_i) に関して，直線と (x_i, y_i) の距離の 2 乗の和

$$f(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + by_i + c)^2$$

が最小になるときの a, b, c を求めよ．

2.3　不等式制約つき最適化問題と KKT 条件

不等式制約つき最適化問題 (2.2) を考える．基本的には，m 個ある不等式からあらゆる組み合わせについて等式が成り立つと仮定してラグランジュの方法で解いてみて，その中で不等式条件をすべて満たし，最大・最小になるものを選ぶ．

もっと細かく考察することにより，次のような判定条件が得られる．

定理 2.2. $\mathbf{x}^*$ が極小解ならばある $(\lambda_1, \cdots, \lambda_m)$ が存在して

$$
\begin{array}{rcll}
\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) & = & 0 & \\
\lambda_i g_i(\mathbf{x}^*) & = & 0 & (i = 1, 2, \cdots, m) \\
g_i(\mathbf{x}^*) & \leq & 0 & (i = 1, 2, \cdots, m) \\
\lambda_i & \geq & 0 & (i = 1, 2, \cdots, m)
\end{array}
$$

が成り立つ．極大の場合は最後の λ_i に関する不等式が逆になる．

これを Karush-Kuhn-Tucker 条件（KKT 条件）という．証明は省略する．

例題

1.

$$
\left\|
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & cx + dy \\
\text{制約条件} & \dfrac{x^2}{3} + \dfrac{y^2}{2} \leq 1
\end{array}
\right.
$$

ただし $(c, d) \neq (0, 0)$ とする．

2.

$$
\left\|
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & cx + dy \\
\text{制約条件} & \dfrac{x^2}{3} + \dfrac{y^2}{2} \leq 1 \\
 & \dfrac{x^2}{3} + \dfrac{(y-1)^2}{2} \leq 1
\end{array}
\right.
$$

ただし $(c, d) \neq (0, 0)$ とする．

3.

$$
\left\|
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & (x-1)^2 + (y-2)^2 \\
\text{制約条件} & x^2 + y^2 - 2 \leq 0 \\
 & -x + y \leq 0 \\
 & -y \leq 0
\end{array}
\right.
$$

の解が KKT 条件を満たすことを確かめよ．