

4.3 不等式制約問題

今まで制約式が等式の場合を扱ってきたが、より一般的に等式と不等式を制約に持つ場合を考える。

例 4.4 (射影問題). 平面 $4x_1 + x_2 + 2x_3 = 2$ と単位球の内部 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ との共通部分の点で、点 $(2, 3, 4)$ までの距離が一番近い点を求めよ。

この問題は

$$\text{最小化 } f(x_1, x_2, x_3) := (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2 + (x_3 - 4)^2$$

$$\text{制約 } x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1$$

$$4x_1 + x_2 + 2x_3 = 2$$

と定式化できる。すると制約式に等式と不等式が現れる。

4.3.1 不等式が一つの場合

まず、制約式が円周とその内部を表す不等式一つだけの問題から解説しよう。実行可能領域が一般の場合も同様である。

$$(P) \text{ 最小化 } f(x, y)$$

$$\text{制約 } g(x, y) := x^2 + y^2 - 1 \leq 0$$

¹⁵⁾ $g(x, y) < 0$ を満たし $(\bar{x}, \bar{y})$ に十分近い (x, y) に対して、 $f(x, y) \geq f(\bar{x}, \bar{y})$ が成り立つ。

$(\bar{x}, \bar{y})$ を上の最適化問題の局所最小解とすると¹⁵⁾、次の二つの場合が考えられる；

1. $(\bar{x}, \bar{y})$ が円の内部にある ($g(\bar{x}, \bar{y}) < 0$) ときは、 $\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$ が成り立つ (通常の停留点)。

(解説) 定義より $(\bar{x}, \bar{y})$ が制約無しの最小化問題

$$(P') \text{ 最小化 } f(x, y)$$

¹⁶⁾ $(\bar{x}, \bar{y})$ に十分近い (x, y) に対して、 $f(x, y) \geq f(\bar{x}, \bar{y})$ を示せば良い。

の局所最小解になっていることを示そう¹⁶⁾。いま、 $(\bar{x}, \bar{y})$ の十分近くにある任意の (x, y) を考える。ここで十分近くとは $g(x, y) < 0$ となるくらい近くを考える (図 4.7 左の一番小さい等高線の輪くらい)。すると (x, y) は制約を満たしているので、 $(\bar{x}, \bar{y})$ が (P) の局所最小解であるという仮定より、 $f(x, y) \geq f(\bar{x}, \bar{y})$ が成り立つ¹⁷⁾。したがって、 $(\bar{x}, \bar{y})$ は (P') の局所最小解になっている。よって $\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$ が成り立つ。

2. $(\bar{x}, \bar{y})$ が円周上にある ($g(\bar{x}, \bar{y}) = 0$) ときは、 $\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = \lambda_0 \nabla g(\bar{x}, \bar{y})$, $\lambda_0 \in \mathbb{R}$ が成り立つ (円周に関する停留点)。

¹⁷⁾ このとき、円の内部で関数 f のグラフは窪んでいて、 $(\bar{x}, \bar{y})$ はその窪みの底にある。これより、 $\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$ が成り立つことがわかる。

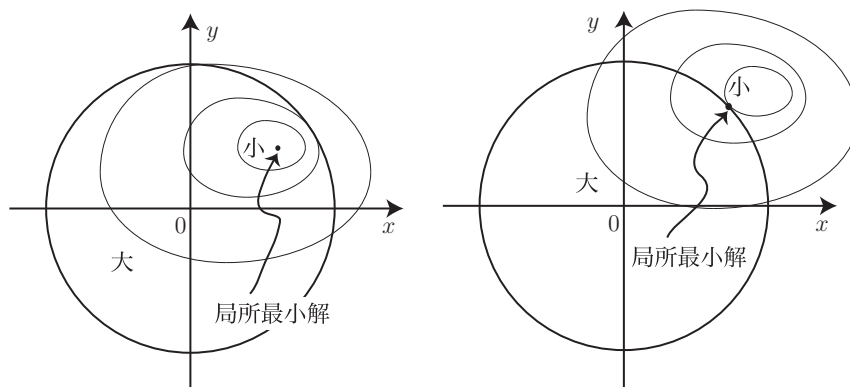


図 4.7 実行可能領域 (円の周上とその内部) 目的関数の等高線の関係: 左図は (P) の局所最小解が円の内部, 右図は円周上にある場合

(解説) (x, y) を円周に制限しても $(\bar{x}, \bar{y})$ は局所最小解である.

二つの場合をまとめて書くと,

$$\begin{cases} \nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = \lambda_0 \nabla g(\bar{x}, \bar{y}) \\ \lambda_0 g(\bar{x}, \bar{y}) = 0 \end{cases}$$

と書ける¹⁸⁾. さらに 2 の場合, 不等式の特性を活かすとラグランジュ乗数 λ_0 の符号を制限することができる.

いま, ベクトル $\nabla g(\bar{x}, \bar{y})$ は g の値が増える方向を向いている. 従って, 実行可能領域が $C = \{(x, y) : g(x, y) \leq 0\}$ (図 4.8 の円の境界と内部) であることを考えると, $\nabla g(\bar{x}, \bar{y})$ は領域 C の外側を向き, 境界に直交した方向になっている. 一方 $\{-\nabla f(\bar{x}, \bar{y})\}$ は目的関数 f の等高線に直交し, 値が減る方向なので, それも領域 C の外側を向いていることになる. 従って,

$$\begin{cases} -\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = \lambda \nabla g(\bar{x}, \bar{y}) \\ \lambda g(\bar{x}, \bar{y}) = 0, \lambda \geq 0 \end{cases}$$

となる.

定理 4.5. 最小化問題

最小化 $f(x)$

制約 $g(x) \leq 0$

に対して, $\bar{x}$ が局所最小解ならば, ある数 λ が存在して,

$$\begin{cases} -\nabla f(\bar{x}) = \lambda \nabla g(\bar{x}) \\ \lambda g(\bar{x}) = 0, \lambda \geq 0 \\ g(\bar{x}) \leq 0 \end{cases}$$

¹⁸⁾ $(\bar{x}, \bar{y})$, λ_0 を方程式の解とする. $g(\bar{x}, \bar{y}) < 0$ のときは第二式より, $\lambda_0 = 0$ となるので, 第一式は $\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$ となる. $g(\bar{x}, \bar{y}) = 0$ のときは λ_0 は任意の実数となる.

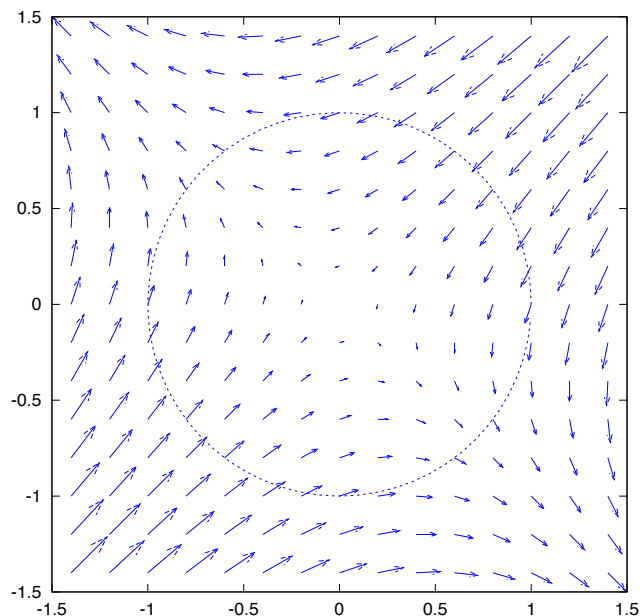


図 4.8 $f(x, y) = x^2 + 6xy + y^2$ としたときの $(-1) \times$ 勾配ベクトル

が成り立つ.

4.3.2 制約式が複数あるとき

$$(P) \text{ 最小化 } f(x, y) := x^2 + 6xy + y^2$$

$$\text{制約 } g_1(x, y) := x^2 + y^2 - 1 \leq 0$$

$$g_2(x, y) := -x - 1/2 \leq 0$$

で, $(\bar{x}, \bar{y})$ を局所最小解とする. $C = \{(x, y) : g_1(x, y) \leq 0, g_2(x, y) \leq 0\}$ とおくと, 以下三つの場合がある.

1. $(\bar{x}, \bar{y})$ が C の内部にあるときは, $\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$.
2. $(\bar{x}, \bar{y})$ が $g_1(\bar{x}, \bar{y}) = 0, g_2(\bar{x}, \bar{y}) < 0$ をみたす場合, $-\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = \lambda_1 \nabla g_1(\bar{x}, \bar{y})$ かつ $\lambda_1 \geq 0$.
3. $(\bar{x}, \bar{y})$ が $g_1(\bar{x}, \bar{y}) = 0, g_2(\bar{x}, \bar{y}) = 0$ をみたす場合, $-\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = \lambda_1 \nabla g_1(\bar{x}, \bar{y}) + \lambda_2 \nabla g_2(\bar{x}, \bar{y})$ かつ $\lambda_1, \lambda_2 \geq 0$.

(解説) 不等式一つの場合と同様に考えると, 目的関数 f の減少する方向 $-\nabla f(\bar{x}, \bar{y})$ は領域 C の外側を向いている. これは $-\nabla f(\bar{x}, \bar{y})$ が二つのベクトル $\nabla g_1(\bar{x}, \bar{y})$ と $\nabla g_2(\bar{x}, \bar{y})$ に挟まれた方向にあるということである.

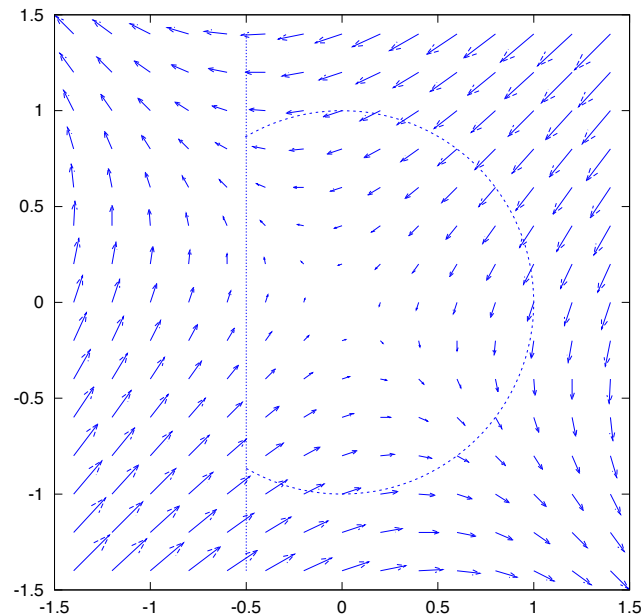


図 4.9 $x^2 + 6xy + y^2$ の $(-1) \times$ 勾配ベクトル 制約 $x^2 + y^2 - 1 \leq 0, -x - 1/2 \leq 0$

三つの場合をまとめて書くと,

$$\begin{cases} -\nabla f(\bar{x}, \bar{y}) = \lambda_1 \nabla g(\bar{x}, \bar{y}) + \lambda_2 \nabla g(\bar{x}, \bar{y}) \\ \lambda_i g_i(\bar{x}, \bar{y}) = 0, \lambda_i \geq 0 \quad (i = 1, 2) \end{cases}$$

となる.

一般には次のような定理を得る.

定理 4.6. 最小化問題

$$\begin{aligned} &\text{最小化 } f(x) \\ &\text{制約 } g_1(x) \leq 0, \dots, g_m(x) \leq 0 \\ &\quad h_1(x) = 0, \dots, h_l(x) = 0 \end{aligned}$$

に対して, $\bar{x}$ が局所最小解であり $\{\nabla g_i(\bar{x}), \nabla h_j(\bar{x})\}$ が一次独立であるとする. すると, ある数 λ_i, μ_i が存在して,

$$\begin{cases} -\nabla f(\bar{x}) = \lambda_1 \nabla g_1(\bar{x}) + \dots + \lambda_m \nabla g_m(\bar{x}) + \mu_1 \nabla h_1(\bar{x}) + \dots + \mu_l \nabla h_l(\bar{x}) \\ \lambda_i g_i(\bar{x}) = 0, \lambda_i \geq 0, \mu_j : \text{任意} \\ g_i(\bar{x}) \leq 0, h_j(\bar{x}) = 0 \end{cases}$$

が成り立つ. この条件式を **KKT 条件**¹⁹⁾ と呼ぶ.

¹⁹⁾ Karush-Kuhn-Tucker 条件の略

補足. λ_i に関する条件を, ベクトル $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)$, $g(x) = (g_1(x), \dots, g_m(x))$ と内積を用いると,

$$\langle \lambda, g(\bar{x}) \rangle = 0, \lambda \geq 0, g(\bar{x}) \leq 0$$

と書ける. これを特に相補性条件と呼ぶ.

4.3.3 例題

次の最小化問題を解く.

$$\text{最小化 } f(x, y) = x^2 + 6xy + y^2$$

$$\text{制約 } g(x, y) = x^2 + y^2 - 1 \leq 0$$

まず, KKT 条件を書くと,

$$(*) \begin{cases} - \begin{bmatrix} 2x + 6y \\ 6x + 2y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 2x \\ 2y \end{bmatrix} \\ \lambda(x^2 + y^2 - 1) = 0, \lambda \geq 0 \\ x^2 + y^2 - 1 \leq 0 \end{cases}$$

となる. 以下場合分けで解く.

$x^2 + y^2 - 1 < 0$ の場合, $(*)$ を満たすものは $\lambda = 0$, $(x, y) = (0, 0)$ となる.

$x^2 + y^2 - 1 = 0$ の場合を考える. まず,

$$- \begin{bmatrix} 2x + 6y \\ 6x + 2y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 2x \\ 2y \end{bmatrix}, \quad x^2 + y^2 - 1 = 0$$

を見たす点(等式の場合と同じ)を探すと, $(\lambda, x, y) = (2, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \mp \frac{1}{\sqrt{2}}), (-4, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}})$ となる. よって, $\lambda \geq 0$ となるのは, 前者である.

よって KKT 条件を見たす点は, $(x, y) = (0, 0), (\pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \mp \frac{1}{\sqrt{2}})$ となるので, それぞれにおける目的関数 f の値を調べると, 最小値は $f(\pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \mp \frac{1}{\sqrt{2}}) = -2$ となる.

例 4.5. 最適化問題

$$\text{最小化 } f(x_1, x_2, x_3) := (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2 + (x_3 - 4)^2$$

$$\text{制約 } x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1$$

$$4x_1 + x_2 + 2x_3 = 2$$

の KKT 条件を求めよ.

解答. KKT 条件を求めると,

$$\left\{ \begin{array}{l} -\begin{bmatrix} 2x_1 - 4 \\ 2x_2 - 6 \\ 2x_3 - 8 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \\ 2x_3 \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \\ \lambda(x_1^2 + x_2^2 + x_3 - 1) = 0, \lambda \geq 0, \mu : \text{任意} \\ x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1 \leq 0, 4x_1 + x_2 + 2x_3 - 2 = 0 \end{array} \right.$$

□

問題 4.2.

1. 以下の最小化問題の最小値を求めよ

(a)

$$\text{最小化 } f(x, y) = xy$$

$$\text{制約 } g(x, y) = x^2 + y^2 - 1 \leq 0$$

(b)

$$\text{最小化 } f(x, y) = x^2 + xy + y^2$$

$$\text{制約 } g(x, y) = x^2 + y^2 - 1 \leq 0$$

2. 以下の最小化問題の KKT 条件を求めよ（解は求めなくてよい）。

$$\text{最小化 } x_1 - x_2 + 2x_3$$

$$\text{制約 } x_1^2 + x_2^2 + 2x_3^2 - 1 \leq 0$$

$$2x_1 + 2x_2 + x_3 - 1 = 0$$

3. 原点を中心とする半径 $\sqrt{3}$ の球と平面 $x + 2y + 2z = 3$ の交点の中で、 x 座標が最小となるものを求めよ。

4.4 凸計画

目的関数も制約式もすべて凸関数である問題を凸計画と呼ぶ。凸計画は有用な性質を持っている。

定理 4.7.

(P) 最小化 $f(x)$

制約 $g_i(x) \leq 0, i = 1, \dots, m$

で, f, g_i が凸関数であるとする. $\bar{x}$ が KKT 条件を満たせば $\bar{x}$ は (P) の大域最小解である.

Proof. f は凸関数なので,

$$f(x) - f(\bar{x}) \geq \nabla f(\bar{x}) \cdot (x - \bar{x})$$

が成り立つ. また, $\bar{x}$ は KKT 条件を満たすので, ある $\lambda_i \geq 0$ が存在して,

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

が成り立つので,

$$f(x) - f(\bar{x}) \geq - \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla g_i(\bar{x}) \cdot (x - \bar{x})$$

を得る. ここで右辺が 0 以上になることを示す. まず, g_i も凸関数なので

$$g_i(x) - g_i(\bar{x}) \geq \nabla g_i(\bar{x}) \cdot (x - \bar{x})$$

が成り立つ. いま x を実行可能解とすると $g_i(x) \leq 0$ となる. $g_i(\bar{x}) = 0$ のときは,

$$0 \geq g_i(x) = g_i(x) - g_i(\bar{x}) \geq \nabla g_i(\bar{x}) \cdot (x - \bar{x})$$

なので, $-\lambda_i \nabla g_i(\bar{x}) \cdot (x - \bar{x}) \geq 0$ となる. また, $g_i(\bar{x}) < 0$ のときは, $\lambda_i = 0$ なので, $-\lambda_i \nabla g_i(\bar{x}) \cdot (x - \bar{x}) = 0$ となる. したがって, 任意の実行可能界 x に対して, $f(x) - f(\bar{x}) \geq 0$ である. $\square$