最適化数学 第 5 回

[今回の項目]

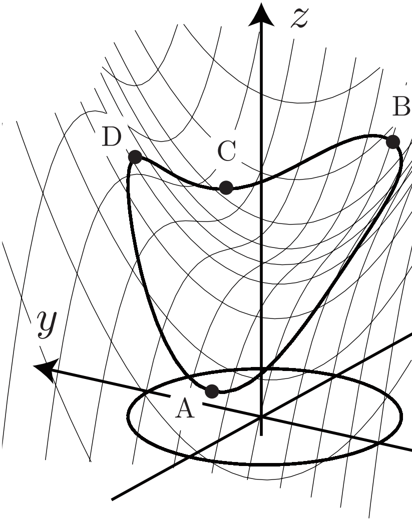
1. 制約つき最適化問題
2. 最適解の種類
3. 曲線上の増減表
4. ラグランジュ乗数法
5. 例題

制約つき最適化問題

2 変数関数を
円周上で最小化する問題を考える：

$$\begin{aligned} \text{最小化又は最大化}\ & x^3 - xy + y^2 + 2 \\ \text{制約}\ & x^2 + y^2 - 1 = 0 \end{aligned}$$

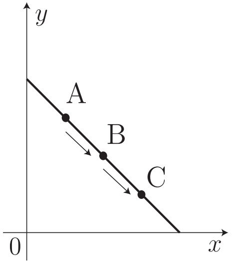
図より，最適解は点 A である．
それでは，このような図がないとき，計算によって最適解を見つけるにはどうしたらよいだろうか？



周長が一定のとき，面積最小の長方形は？

最大化　$f(x, y) := xy$
制　約　$x + y = 4,\ x \geq 0,\ y \geq 0$

(x, y)	A		B		C
$f(x, y)$	3	$\nearrow$	4	$\searrow$	3



ここで $x + y = 4$ より，

$$xy = x(4 - x) = -x^2 + 4x = -(x - 2)^2 + 4$$

と変形できる．点が A: $(1, 3) \to$ B: $(2, 2) \to$ C: $(3, 1)$ と動くとき，$f(x, y) = xy$ の値は，表のように変化する．
よって $x + y = 4$ を満たし，B に近い点の中で，$f(x, y)$ の値が一番大きくなるのは B においてである．したがって，一辺が 2 の正方形のとき面積が最大になる．

制約つき最適化問題の定義

集合 C を数ベクトル空間 $\mathbb{R}^n$ の部分集合として,

$$
\begin{aligned}
&\text{最小化} \quad f(x) \\
&\text{制　約} \quad x \in C
\end{aligned}
$$

を 制約つき最小化問題 と呼ぶ. ここで, 集合 C を 実行可能領域, C の点を 実行可能解 と呼ぶ. ただし,「$x \in C$」とは「x が C に含まれる」ことを意味する.

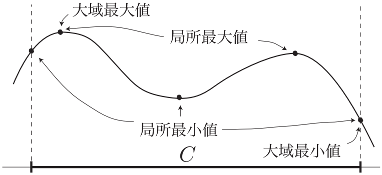
C は, 例えば上述の制約

$$x + y = 4,\ x \geq 0,\ y \geq 0$$

のように式を用いて表される. このような式を 制約式 と呼ぶ. 当然, 制約つき最適化問題においても最小化する関数 $f(x)$ は 目的関数 と呼ばれる.

最適解の種類

(P) 最小化　$f(x)$
制　約　$x \in C$



［定義］

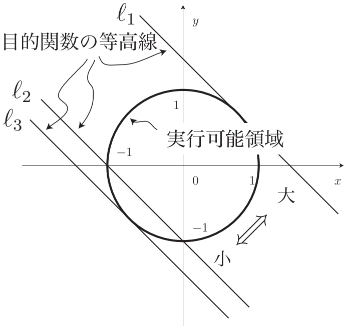
$\bar{x} \in C$ が $\bar{x}$ に 十分近い C 上のすべての x に対して $f(x) \geq f(\bar{x})$ のとき，$\bar{x}$ を 局所最小解，$f(\bar{x})$ を (P) の局所最小値 と呼ぶ．

［定義］

$\bar{x} \in C$ が C 上のすべての x に対して $f(x) \leq f(\bar{x})$ のとき，$\bar{x}$ を 大域最小解，$f(\bar{x})$ を (P) の大域最小値 と呼ぶ．

最小解と最大解を合わせて最適解と呼ぶ．最適値も同様である．

1 次関数を円周上で最適化



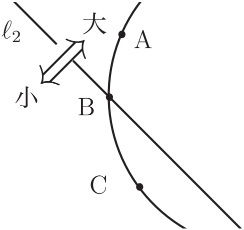
始めに，円周上で 1 次関数を最小化または最大化する問題を考える;

$$
\begin{aligned}
\text{最小化または最大化} \quad & x + y \\
\text{制　約} \quad & x^2 + y^2 = 1.
\end{aligned}
$$

直線 ℓ_2 は，$f(x, y) := x + y = -1$ を満たす直線であり，f の等高線になっている．また，直線 ℓ_1，ℓ_3 もある値に対する f の等高線である．ここで，等高線上での $f(x, y)$ の値は ℓ_3，ℓ_2，ℓ_1 の順で大きくなる．以下で，f の等高線と局所最適解の関係について勉強しよう．

円と ℓ_2 の位置関係

まず，f の等高線 ℓ_2 と円との交点の近くを詳しく調べる．



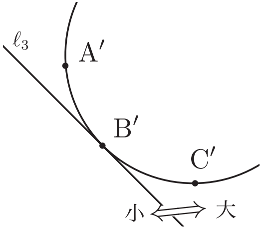
図で点が $\mathrm{A} \to \mathrm{B} \to \mathrm{C}$ と動くとき，関数 f の値は

ℓ_2 と円の交点の近く

(x, y)	A		B		C
$f(x, y)$	大	$\searrow$	小	$\searrow$	もっと小

と変化するのが読み取れるだろう．よって，等高線 ℓ_2 と円の交点は局所最適解にはならない．

円と ℓ_3 の位置関係



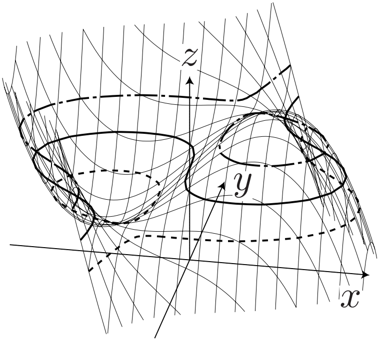
一方，上図より，等高線 ℓ_3 と円の接点付近では

ℓ_3 と円の接点の近く

(x,y)	A′		B′		C′
$f(x,y)$	大	$\searrow$	小	$\nearrow$	大

と変化する．ここで，ℓ_3 は円の接線で，接点は $(-1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2})$ である．表より接点に近い円周上の点の中では，接点 $(-1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2})$ で $f(x,y)$ の値が一番小さくなる．したがって，$(-1/\sqrt{2},-1/\sqrt{2})$ が局所最小解である．

一般の関数の等高線



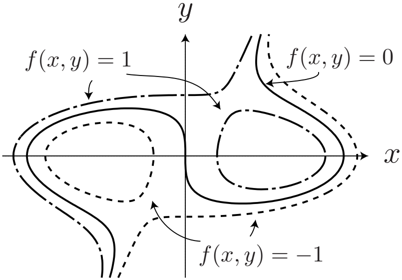
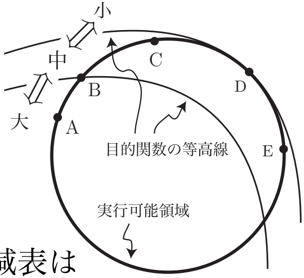


Figure: $f(x,y) = -x^3 - 3xy^2 + y^3 + 3x$ のグラフと等高線

一般の関数を円周上で最適化

目的関数の等高線が図のようになっていると仮定する．このとき，A，B，C，D，E のどの点が局所最小解または局所最大解だろうか？



図で点を A $\rightarrow$ B $\rightarrow$ C と動かすと，増減表は

(x, y)	A		B		C
$f(x, y)$	大	↘	中	↘	小

となる．したがって，点 B は局所最適解ではない．一方，点を C $\rightarrow$ D $\rightarrow$ E と動かすと，増減表は

(x, y)	C		D		E
$f(x, y)$	小	↘	もっと小	↗	小

となるので，点 D は局所最小解になる．

一般の関数を一般の曲線上で最適化

上記の考察より,

局所最適解で目的関数の等高線と実行可能領域は接する

ということがわかる．これより以下の定理を得る.

［定理］（ラグランジュ乗数法)

$$\begin{aligned} \text{最小化または最大化} \quad & f(x) \\ \text{制　約} \quad & g(x) = 0 \end{aligned}$$

に対して, $\bar{x}$ を局所最適解とする. $\nabla g(\bar{x}) \neq \mathbf{0}$ ならば, ある数 λ が存在して,

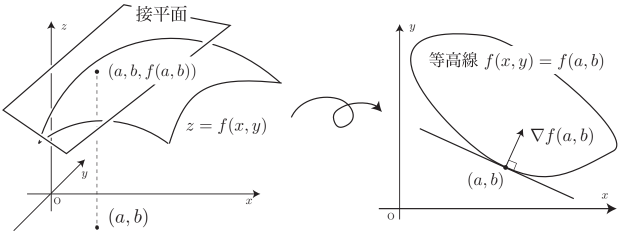
$$\nabla f(\bar{x}) = \lambda \nabla g(\bar{x}), \quad g(\bar{x}) = 0$$

が成り立つ.

勾配ベクトルと等高線は直交している

曲面 $z = f(x, y)$ の (a, b) における接平面：

$$z = f(a, b) + f_x(a, b)(x - a) + f_y(a, b)(y - b)$$



点 $(a, b, f(a, b))$ を通り xy 平面に平行な平面 $z = f(a, b)$ で，グラフと接平面を切った時の断面は，右図になる．グラフの断面は等高線，接平面の断面は接線になる．さらに，この接線は接平面と平面 $z = f(a, b)$ との交線なので，

$$\text{[等高線の接線の式]} \quad f_x(a, b)(x - a) + f_y(a, b)(y - b) = 0.$$

よって，勾配ベクトル $\nabla f(a, b) = \begin{bmatrix} f_x(a, b) \\ f_y(a, b) \end{bmatrix}$ と等高線は直交している．

勾配ベクトルの向きは，関数の増える方向

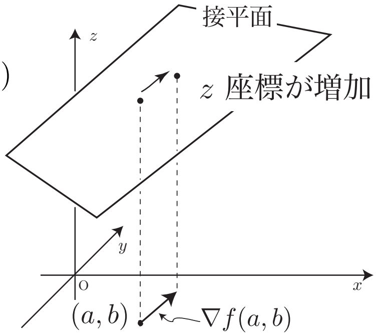
さらに，接平面の式

$$z = f(a,b)+f_x(a,b)(x-a)+f_y(a,b)(y-b)$$

で，点 (a,b) を $\nabla f(a,b)$ 方向へ移動した点

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} + \nabla f(a,b) = \begin{bmatrix} a + f_x(a,b) \\ b + f_y(a,b) \end{bmatrix}$$

における z 座標を調べると



$$z = f(a,b) + f_x(a,b)^2 + f_y(a,b)^2 > f(a,b)$$

となるので，$\nabla f(a,b)$ は接平面の z 座標が増加する方向を向いている．よって，

勾配ベクトルは関数値が増える方向を向いている

［定理］ (ラグランジュ乗数法)

$$\begin{aligned} \text{最小化または最大化} \quad & f(x, y) \\ \text{制　約} \quad & g(x, y) = 0 \end{aligned}$$

に対して，$\bar{x} = (a, b)$ を局所最適解とする．$\nabla g(\bar{x}) \neq \mathbf{0}$ ならば，ある数 λ が存在して，以下が成り立つ：

$$\nabla f(\bar{x}) = \lambda \nabla g(\bar{x}), \quad g(\bar{x}) = 0.$$

解説.

制約は $g(x, y) = 0$ なので，実行可能領域は g の等高線．よって，

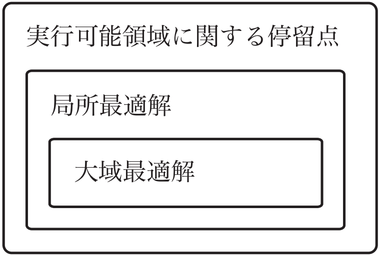
$$\nabla f(\bar{x}) \perp \ \{ f \text{ の等高線}\}\text{「接する」}\{\text{実行可能領域}\} \perp \nabla g(\bar{x})$$

よって，$\nabla f(\bar{x})$ と $\nabla g(\bar{x})$ は平行． □

制約付き停留点

［定義］

ある実数 λ に対して，$\begin{cases} \nabla f(\bar{x}) = \lambda \nabla g(\bar{x}) \\ g(\bar{x}) = 0 \end{cases}$
を満たす点 $\bar{x}$ を**制約つき停留点**と呼ぶ．ただし，省略しても誤解がない場合は，単に停留点と呼ぶ．



最適解の存在定理

証明はしないが，最適解の存在定理を一つ挙げておく.

［定理］

目的関数が連続で，実行可能領域が有界閉集合ならば, 最適化問題は大域最小解と大域最大解を持つ.

有界閉集合とは，大きさに限りがあって，中も端もつまっている集合．例えば，$[0, 1]$ は有界閉集合だが，$(0, 1)$，$[0, \infty)$ は有界閉集合ではない．特に等式制約を持つ最適化問題は，実行可能領域が有界閉集合になる場合が多い.

例題

$$
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & f(x,y) := x - y \\
\text{制　約} & g(x,y) := 2x^2 + 3y^2 - 1 = 0
\end{array}
$$

練習問題

(1)

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & x + 3y \\ \text{制約} & 2x^2 + y^2 = 1 \end{array}$$

(2)

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & 3x^2 + 2y^2 + 4z^2 + 4xy + 4xz \\ \text{制約} & x + y + z = 1 \end{array}$$