最適化数学 第 6 回

[今回の項目]

1. 復習：ラグランジュ乗数法
2. 等式制約が複数ある場合
3. 不等式制約問題

復習：制約が一つの場合

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

[定理]

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

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，以下が成り立つ：

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

今回の話題：制約が二つの場合は？

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x,y,z) := z \\ \text{制　約} & g_1(x,y,z) := x^2 + y^2 + z^2 - 4 = 0 \\ & g_2(x,y,z) := 3x - \sqrt{3}y + z - 3\sqrt{3} = 0 \end{array}$$

等式制約が二つある場合

［定理］

最小化問題

$$
\begin{aligned}
&\text{最小化} \quad f(x) \\
&\text{制　約} \quad g_1(x) = 0,\ g_2(x) = 0
\end{aligned}
$$

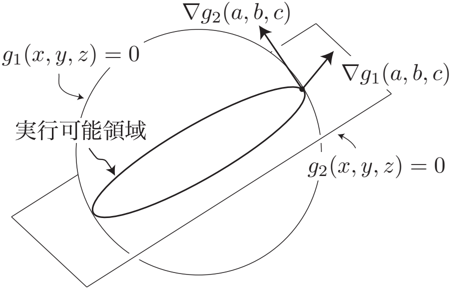
を考え，$\bar{x}$ を局所最小解とする．$\nabla g_1(\bar{x}), \nabla g_2(\bar{x})$ が一次独立ならば，ある数 λ_1, λ_2 が存在して，以下が成り立つ：

$$
\begin{aligned}
&\nabla f(\bar{x}) = \lambda_1 \nabla g_1(\bar{x}) + \lambda_2 \nabla g_2(\bar{x}) \\
&g_1(\bar{x}) = 0,\ g_2(\bar{x}) = 0
\end{aligned}
$$

定理の解説

制約式が複数の場合は 3 変数の問題を考えた方が良い．α，β，γ，δ を定数とする．以下の問題に対して，$\bar{x} = (a, b, c)$ を局所最小解とする．

$$
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & f(x, y, z) = \alpha x + \beta y + \gamma z + \delta \\
\text{制　約} & \begin{cases} g_1(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 - 1 = 0 \\ g_2(x, y, z) = x + y + z - 1 = 0 \end{cases}
\end{array}
$$



等高面

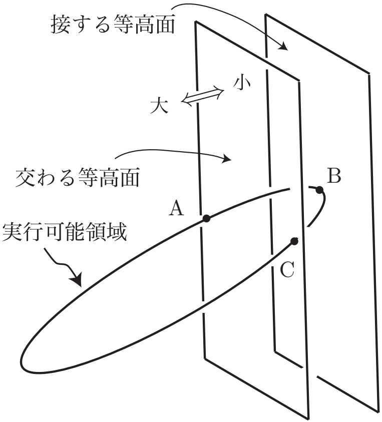
3 変数関数が同じ値をとる点
(x, y, z) の集合

$$f(x, y, z) = (\text{定数})$$

を 等高面 と呼ぶ.
点が A $\to$ B $\to$ C と動くとき,
増減表は

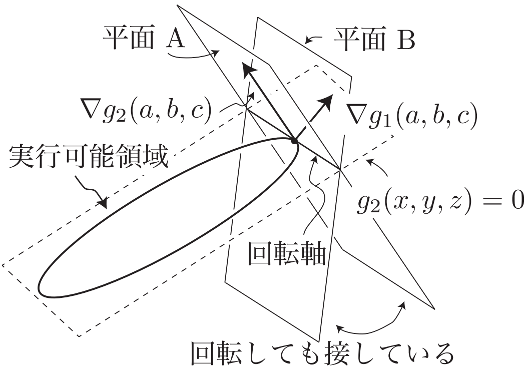
(x, y)	A		B		C
$f(x, y)$	大	$\searrow$	小	$\nearrow$	大

となる．よって，点 B で局所最小解をとる.



局所最適解で目的関数の等高面は
実行可能領域と接する

実行可能領域と接する平面



よって，実行可能領域に接する平面の法線ベクトルは，回転させた平面のものも含めて，

$$\lambda_1 \nabla g_1(a,b,c) + \lambda_2 \nabla g_2(a,b,c)$$

と書けることがわかる．

等式制約が二つある場合

［定理］

$$
\begin{aligned}
&\text{最小化} \quad f(x) \\
&\text{制\quad 約} \quad g_1(x) = 0,\ g_2(x) = 0
\end{aligned}
$$

に対して，$\bar{x}$ を局所最小解とする．$\nabla g_1(\bar{x}), \nabla g_2(\bar{x})$ が一次独立ならば，ある数 λ_1, λ_2 が存在して，以下が成り立つ：

$$
\begin{aligned}
&\nabla f(\bar{x}) = \lambda_1 \nabla g_1(\bar{x}) + \lambda_2 \nabla g_2(\bar{x}) \\
&g_1(\bar{x}) = 0,\ g_2(\bar{x}) = 0
\end{aligned}
$$

(a, b, c) は局所最小解

$\Rightarrow$ 局所最小解で目的関数の等高面と実行可能領域は接する

$\Rightarrow \nabla f(a, b, c) = \lambda_1 \nabla g_1(a, b, c) + \lambda_2 \nabla g_2(a, b, c)$

例題

$$
\begin{aligned}
\text{最小化}\quad & z \\
\text{制　約}\quad & x^2 + y^2 + z^2 = 4 \\
& 3x - \sqrt{3}y + z = 3\sqrt{3}
\end{aligned}
$$

練習問題

$$
\begin{aligned}
\text{最小化} \quad & x^2 + y^2 \\
\text{制　約} \quad & 2x + y + z = 1 \\
& x - y - z = 0
\end{aligned}
$$

不等式制約問題

Example (射影問題)

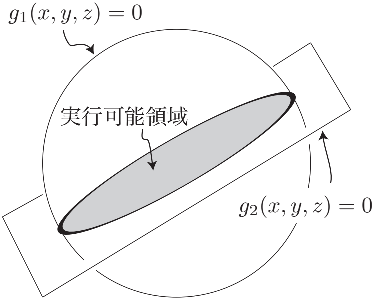
平面 $4x + y + 2z = 2$ と単位球の内部 $x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$ との共通部分の点で，点 $(2, 3, 4)$ までの距離が一番近い点を求めよ．この問題は

$$
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & f(x,y,z) := (x-2)^2 + (y-3)^2 + (z-4)^2 \\
\text{制　約} & g_1(x,y,z) := x^2 + y^2 + z^2 - 1 \leq 0 \\
& g_2(x,y,z) := 4x + y + z - 2 = 0
\end{array}
$$

と定式化できる．すると制約式に不等式と等式が現れる．

射影問題

$$
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & f(x,y,z) := (x-2)^2 + (y-3)^2 + (z-4)^2 \\
\text{制　約} & g_1(x,y,z) := x^2 + y^2 + z^2 - 1 \le 0 \\
 & g_2(x,y,z) := 4x + y + z - 2 = 0
\end{array}
$$



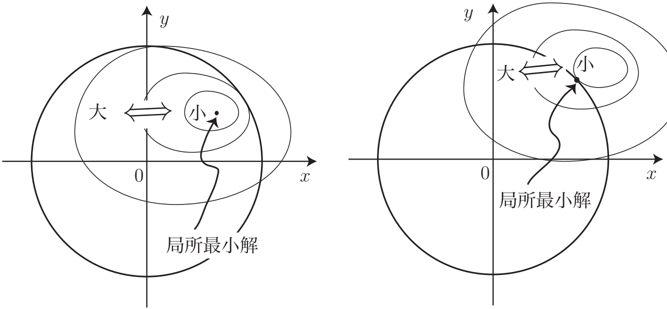
不等式が一つの場合

まず制約式が円周とその内部を表す不等式一つのみの場合

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

(a,b) を局所最小解とすると，次の二つの場合が考えられる：

1. (a,b) が円の内部にある $(g(a,b) < 0)$ 場合
2. (a,b) が円周上にある $(g(a,b) = 0)$ 場合



(a, b) が円の内部にある $(g(a, b) < 0)$ 場合

このとき,

$$\nabla f(a, b) = \mathbf{0}$$

が成り立つ.

解説 (a, b) は制約なしの最小化問題

$$\begin{array}{lll} (\mathrm{P}') & \text{最小化} & f(x, y) \\ & \text{制　約} & \text{なし} \end{array}$$

の局所最小解である. これを次の具体例で説明する.

$$\begin{cases} \text{最小化} & x^2 + y^2 \\ \text{制　約} & x^2 + y^2 - 1 \leq 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} \text{最小化} & x^2 + y^2 \\ \text{制　約} & \text{なし} \end{cases}$$

左側の問題の最小解は $(0, 0)$ である. ここで, 最小解が実行可能解の内部に含まれているので, 制約を外した右側の問題の最小解も $(0, 0)$ になる. 一般の場合も同様なので, $\nabla f(a, b) = \mathbf{0}$ が成り立つ.

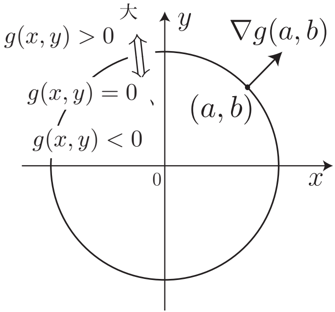
(a,b) が円周上にある $(g(a,b)=0)$ 場合

このとき，ある実数 λ が存在して，

$$-\nabla f(a,b) = \lambda \nabla g(a,b) \quad \text{かつ } \lambda \geq 0$$

が成り立つ（λ の符号が ≥ 0 であることに注意）．

解説 一般的に $\nabla g(a,b)$ は g の等高線に直交し，g の値が増える方向を向いている．一方 $\{-\nabla f(a,b)\}$ は，目的関数 f の等高線に直交し値が減る方向なので前出の図の右図より，実行可能領域の外側を向いている．よって，二つのベクトルが同じ方向を向いていることから



$$-\nabla f(a,b) = \lambda \nabla g(a,b),\ \lambda \geq 0$$

となる．

KKT 条件

上記二つの場合をまとめて書くと，

［定理］

最小化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{制　約} & g(x) \leq 0 \end{array}$$

に対して，$\bar{x}$ が局所最小解であり，$\nabla g(\bar{x}) \neq \mathbf{0}$ ならば，ある数 λ が存在して，以下が成り立つ：

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

$$\begin{array}{ll}\text{最小化} & f(x) \\ \text{制　約} & g(x) \leq 0\end{array}$$ に対して，$\bar{x}$ が局所最小解であり，
$\nabla g(\bar{x}) \neq \mathbf{0}$ ならば，ある数 λ が存在して，以下が成り立つ：

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

証明.

$g(\bar{x}) < 0$ のときは，上記議論の (1) より $\nabla f(\bar{x}) = \mathbf{0}$ となる．
$\lambda = 0$ とおくと，$-\nabla f(\bar{x}) = \mathbf{0} = \lambda \nabla g(\bar{x})$ となり，また $\lambda = 0$ より
$\lambda g(\bar{x}) = 0$ なので，$(*)$ が成り立つ．
$g(\bar{x}) = 0$ のときは上記議論の (2) より，ある実数 λ が存在して，
$-\nabla f(\bar{x}) = \lambda \nabla g(\bar{x})$，$\lambda \geq 0$ となる．また，$g(\bar{x}) = 0$ より
$\lambda g(\bar{x}) = 0$ なので，やはり $(*)$ が成り立つ． □

例題

$$
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & f(x,y) = x^2 + 6xy + y^2 \\
\text{制　約} & g(x,y) = x^2 + y^2 - 1 \leq 0
\end{array}
$$

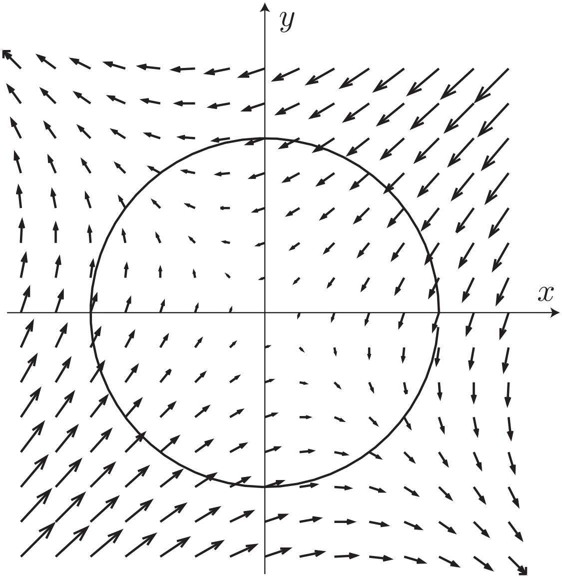


Figure: 点 $(\pm 1/\sqrt{2}, \mp 1/\sqrt{2})$ で $-\nabla f(x,y)$ が直交外側を向いている.

練習問題

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