最適化数学 第 7 回

[今回の項目]

1. 等式制約が複数ある場合
2. 不等式制約問題
3. 等式・不等式制約

復習：等式制約が二つある場合

［定理］

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

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：

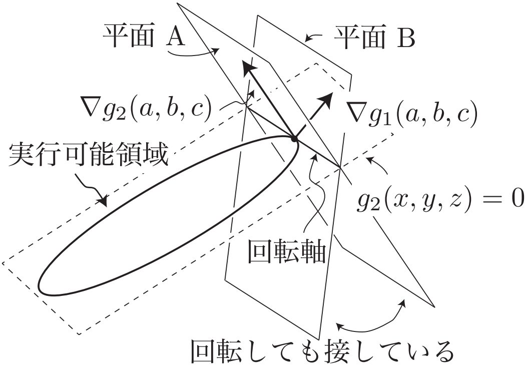
$$\begin{aligned} &\nabla f(\bar{x}) = \lambda_1 \nabla g_1(\bar{x}) + \lambda_2 \nabla g_2(\bar{x}) \\ &g_1(\bar{x}) = 0,\ g_2(\bar{x}) = 0 \end{aligned}$$

(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

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

実行可能領域と接する平面



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．

例題

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

練習問題

$$
\begin{aligned}
\text{最小化} \quad & f(x, y, z) = 2x + 2y + z \\
\text{制　約} \quad & g_1(x, y, z) = x^2 + z^2 - 25 = 0 \\
& g_2(x, y, z) = -x + 2y - 3z = 0
\end{aligned}
$$

復習：不等式が一つの場合

$$
\begin{array}{lll}
(P) & \text{最小化} & f(x,y) \\
 & \text{制　約} & g(x,y) \le 0
\end{array}
$$

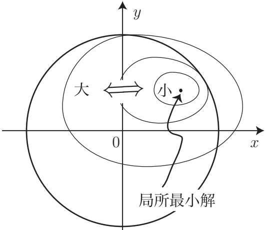
(a,b) を局所最小解とすると，次の二つの場合が考えられる：

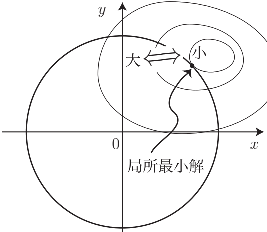
1. (a,b) が実行可能領域の内部にある $(g(a,b) < 0)$ 場合:

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

2. (a,b) が実行可能領域の境界にある $(g(a,b) = 0)$ 場合:

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





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

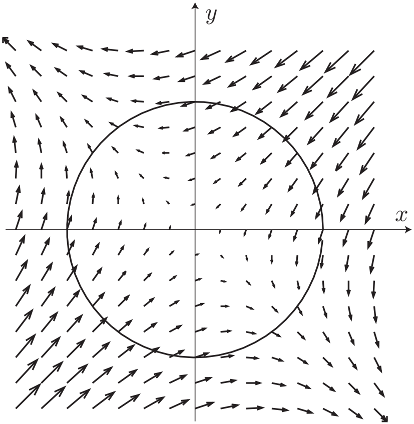


Figure: 点 $(\pm 1/\sqrt{2}, \mp 1/\sqrt{2})$ で $-\nabla f(x,y)$ が直交外側を向いている.

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：

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

不等式が複数ある場合

$$
\begin{array}{ll}
\text{最小化} & f(x) \\
\text{制　約} & g_1(x) \leq 0,\ g_2(x) \leq 0
\end{array}
$$

$\bar{x} = (a, b)$ を局所最小解とすると，以下の 4 つの場合がある：

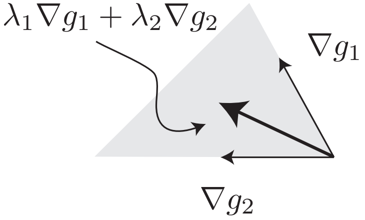
1. $g_1(\bar{x}) < 0,\ \ g_2(\bar{x}) < 0 \longrightarrow$ 制約なし
2. $g_1(\bar{x}) = 0,\ \ g_2(\bar{x}) < 0 \longrightarrow$ 制約：$g_1(x) = 0$
3. $g_1(\bar{x}) < 0,\ \ g_2(\bar{x}) = 0 \longrightarrow$ 制約：$g_2(x) = 0$
4. $g_1(\bar{x}) = 0,\ \ g_2(\bar{x}) = 0 \longrightarrow$ 制約：$g_1(x) = g_2(x) = 0$

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{制　約} & g_1(x) \le 0,\ g_2(x) \le 0 \end{array}$$

$\bar{x} = (a, b)$ が $g_1(\bar{x}) = 0$，$g_2(\bar{x}) = 0$ を満たす場合：
このとき，ある実数 λ_1，λ_2 が存在して，

$$-\nabla f(\bar{x}) = \lambda_1 \nabla g_1(\bar{x}) + \lambda_2 \nabla g_2(\bar{x}) \text{ かつ } \lambda_1, \lambda_2 \ge 0$$

が成り立つ.
解説： $\lambda_1 \ge 0$, $\lambda_2 \ge 0$ のとき，$\lambda_1 \nabla g_1 + \lambda_2 \nabla g_2$ と書ける領域は以下である：



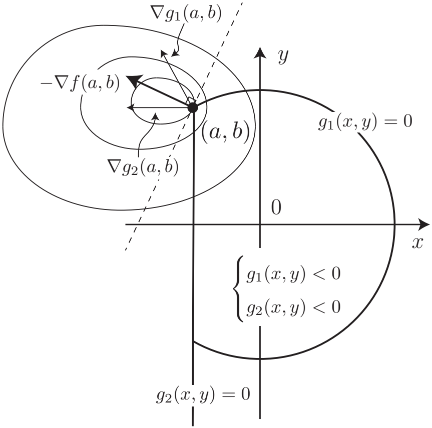


Figure: 目的関数の勾配ベクトルが制約式の勾配ベクトルに挟まれている．破線は等高線の接線である．

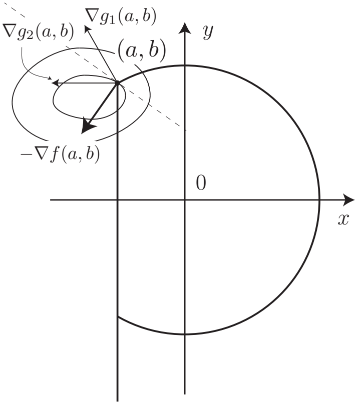


Figure: 制約式の勾配ベクトルに挟まれていない．このとき目的関数の等高線と実行可能領域の境界は交わる．

KKT 条件

[定理]

最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{制　約} & g_1(x) \le 0,\ g_2(x) \le 0 \end{array}$$

に対して，$\bar{x}$ が局所最小解であり，$\{\nabla g_1(\bar{x}), \nabla g_2(\bar{x})\}$ が一次独立であるとする．すると，ある数 λ_1，λ_2 が存在して，

$$(*) \quad \begin{cases} -\nabla f(\bar{x}) = \lambda_1 \nabla g_1(\bar{x}) + \lambda_2 \nabla g_2(\bar{x}) \\ \lambda_i g_i(\bar{x}) = 0,\ \lambda_i \ge 0 \\ g_i(\bar{x}) \le 0\ (i = 1, 2) \end{cases}$$

が成り立つ．

制約に不等式と等式がある場合

［定理］ (KKT 条件)

最適化問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{制　約} & g_1(x) \leq 0,\ g_2(x) \leq 0,\ h(x) = 0 \end{array}$$

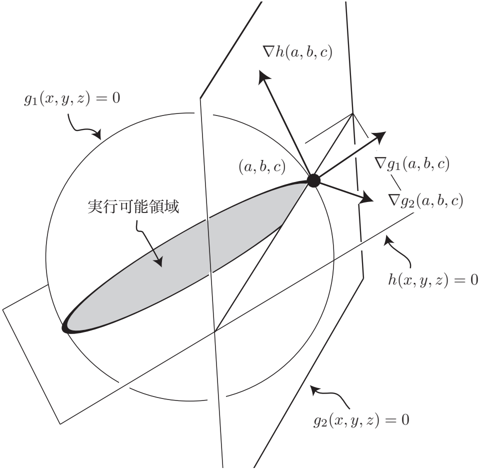
に対して，$\bar{x}$ が局所最小解であり $\{\nabla g_1(\bar{x}), \nabla g_2(\bar{x}), \nabla h(\bar{x})\}$ が一次独立であるとする．すると，ある数 λ_1，λ_2，μ が存在して，

$$\text{（}\mathit{KKT}\ \text{条件）} \quad \begin{cases} -\nabla f(\bar{x}) = \lambda_1 \nabla g_1(\bar{x}) + \lambda_2 \nabla g_2(\bar{x}) + \mu \nabla h(\bar{x}) \\ \lambda_i g_i(\bar{x}) = 0,\ \lambda_i \geq 0,\ g_i(\bar{x}) \leq 0 \\ \mu : \text{任意},\ h(\bar{x}) = 0 \end{cases}$$

が成り立つ．

（例）　最小化　$f(x,y,z) = \alpha x + \beta y + \gamma z + \delta$

制　約　$\begin{cases} g_1(x,y,z) = x^2 + y^2 + z^2 - 1 \leq 0 \\ g_2(x,y,z) = -x - 1/2 \leq 0 \\ h(x,y,z) = x + y + z - 1 = 0 \end{cases}$



（例）　最小化　$f(x,y,z) = \alpha x + \beta y + \gamma z + \delta$

制　約　$\begin{cases} g_1(x,y,z) = x^2 + y^2 + z^2 - 1 \leq 0 \\ g_2(x,y,z) = -x - 1/2 \leq 0 \\ h(x,y,z) = x + y + z - 1 = 0 \end{cases}$

1. 点 (a,b,c) が空間内の円の内側にある場合

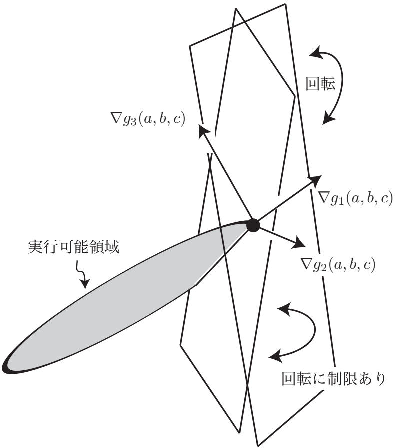
$$-\nabla f(a,b,c) = \mu \nabla h(a,b,c)$$

2. 点 (a,b,c) が空間内の円の境界にある場合

$$-\nabla f(a,b,c) = \lambda_1 \nabla g_1(a,b,c) + \mu \nabla h(a,b,c) \quad (\lambda_1 \geq 0)$$

3. 点 (a,b,c) が実行可能領域の角張ったところにある場合

以下で説明



$$
\begin{aligned}
-\nabla f(a,b,c) = \lambda_1 \nabla g_1(a,b,c) + \lambda_2 \nabla g_2(a,b,c) + \mu \nabla h(a,b,c), \\
\lambda_1 \geq 0,\ \lambda_2 \geq 0,\ \mu : \text{任意}
\end{aligned}
$$

となる.

KKT 条件の例

Example

最適化問題

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

の KKT 条件は

$$\begin{cases} -\begin{bmatrix} 2x-4 \\ 2y-6 \\ 2z-8 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 2x \\ 2y \\ 2z \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \\ \lambda(x^2+y^2+z^2-1) = 0, \lambda \geq 0, \mu : \text{任意} \\ x^2+y^2+z^2-1 \leq 0, 4x+y+2z-2 = 0 \end{cases}$$

練習問題

KKT 条件を求めよ.

$$
\begin{aligned}
\text{最小化} \quad & 3x^2 - 8xy + 3y^2 \\
\text{制約} \quad & x + 2y \leq 8,\ 3x + y \leq 9 \\
& x \geq 0,\ y \geq 0
\end{aligned}
$$