

最適化数学 講義ノート 3 (担当: 関口 良行)

1 制約付き最適化問題

制約付きの最適化問題を扱う. 今までと同様に最小化問題で主に説明するが最大化問題も同様である. また変数を一般に n 個として扱う.

C を数ベクトル空間 \mathbb{R}^n の部分集合とする. $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ のように書く. 以下のような問題を制約付き最小化問題と呼ぶ.

$$(P) \quad \begin{array}{l} \text{最小化 } J(x) \\ \text{制約 } x \in C \end{array}$$

最小化問題 (P) において, 上記のような集合 C を実行可能領域, C の点を実行可能解と呼ぶ. 制約なし最小化問題では, 最小解を任意の数ベクトルから探してきたが, 制約付き最小化問題では, C に入っている x の中で, 目的関数 $J(x)$ を最小にするものを探す.

例 1. 辺の長さが一定な長方形の中で, 面積が最大になるのはどのような場合か?

この問題は次のように定式化できる. 辺の長さを x と y とすると, 面積は xy になる. 辺の長さの合計を $a > 0$ とすると, 問題は

$$\begin{array}{l} \text{最大化 } xy \\ \text{制約 } (x, y) \in C := \{(x, y) \mid x + y = a, x \geq 0, y \geq 0\} \end{array}$$

となる.

不等式を用いて最大解を求める. (x, y) を C 内の任意の点とする. すると, $x, y \geq 0$ なので, 相加相乗平均の不等式より

$$\sqrt{xy} \leq \frac{x+y}{2} = \frac{a}{2}$$

となり, $xy \leq a^2/4$ を満たす. 等号が成立するのは $x = y$ のときなので, 最大解は $(x, y) = (a/2, a/2)$ となり, これは正方形を表す.

補足. 相加相乗平均の不等式は一般に n 変数に対しても成り立つ. 例えば, 3 変数の場合を用いれば, 辺の和が一定の直方体の中で体積が最大のものも求まる.

例 2. 円 $x^2 + y^2 = 1$ 上の点で, 点 $(1, 2)$ に一番近い点はどこか?

一般に点 (x, y) と $(1, 2)$ の距離は $\sqrt{(x-1)^2 + (y-2)^2}$ と書ける. この問題は, 円上の点の中でこの距離を最小にする点を探すのだが, 距離を 2 乗した $(x-1)^2 + (y-2)^2$ を最小にするものを探しても一緒なので,

$$\begin{array}{l} \text{最小化 } J(x, y) := (x-1)^2 + (y-2)^2 \\ \text{制約 } (x, y) \in C := \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = 1\} \end{array}$$

という問題を解けばよい.

(x, y) を C の点とする. いま, C 上の点は $x^2 + y^2 = 1$ となるので, 目的関数を展開しこの関係式を代入すると, $J(x, y) = 1 - 2x - 4y + 3 = -2x - 4y + 4$ となる. ここで, 定数項を無視した部分にシュワルツの不等式を適用して

$$\begin{aligned} |-2x - 4y| &= | \langle (-2, -4), (x, y) \rangle | \leq \|(-2, -4)\| \| (x, y) \| \\ &= \sqrt{(-2)^2 + (-4)^2} \sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{20} \cdot 1 = 2\sqrt{5} \end{aligned}$$

を得る. これより特に, $J(x, y) = -2x - 4y + 4 \geq -2\sqrt{5} + 4$ を得る

シュワルツの不等式では, 等号は二つのベクトルの方向が同じ時に成り立つので, ある数 t が存在して, $(x, y) = t(-2, -4)$ が成り立つような (x, y) で, C 上の点になるものを探す. まず, t を消去すると, $y = 2x$ を得る. この関係を満たす点で, C 内の点になるのは, $x^2 + (2x)^2 = 1$ を満たすので, $(x, y) = (\pm 1/\sqrt{5}, \pm 2/\sqrt{5})$ を得る.

この二つの点での目的関数値を考えると, $J(1/\sqrt{5}, 2/\sqrt{5}) = -10/\sqrt{5} + 4 = -2\sqrt{5} + 4$ となるので, 最小解は $(x, y) = (1/\sqrt{5}, 2/\sqrt{5})$ である.

2 最適性条件

2.1 最適性と接線

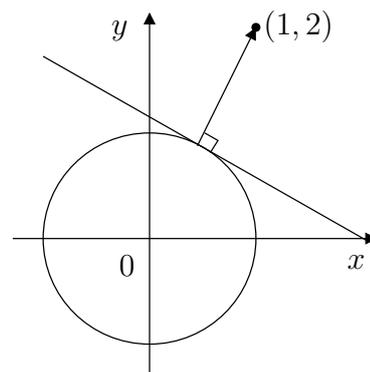
上記の例のように, 不等式を用いて綺麗に解ける問題もあるが, 制約なしの最適化問題で行ったように微分法を用いた一般的な解法を学ぶ.

例 2 で得た解を幾何的に解釈してみよう.

まず, テーラー展開を考えると, 点 (\bar{x}, \bar{y}) において, 方向 $-\nabla J(\bar{x}, \bar{y})$ は (ゼロベクトルでなければ) $J(\bar{x}, \bar{y})$ を減少させる方向である. 例 2 で, この「減少方向ベクトルが C のその点における接線と直交する方向を指す」ことが確認できる.

例 2 で, 点 $(1, 2)$ までの距離を最小にする円上の点は $(1/\sqrt{5}, 2/\sqrt{5})$ であることを示した. 実際, この点で減少方向ベクトルは $-\nabla J(1/\sqrt{5}, 2/\sqrt{5}) = (2(1/\sqrt{5} - 1), 2(2\sqrt{5} - 2)) = 2(1/\sqrt{5} - 1, 2\sqrt{5} - 2)$ となる.

これは $(1/\sqrt{5}, 2/\sqrt{5})$ と $(1, 2)$ を通る直線と同じ方向を指す. 距離が最短であることを考えると, C のこの点での接線と, この点と点 $(1, 2)$ を通る直線は直交しているはずである. よって上記の主張は正しそうだ.



2.2 接ベクトルと法線ベクトル

この現象を数学的に表現し、より一般的な場合も扱えるようにするために、集合に対する接ベクトルと法線ベクトルと呼ばれるものを定義する。

定義. C を \mathbb{R}^n の部分集合とする.

$\bar{x} \in C$ に対して、小さな数 $\varepsilon > 0$ と、ある関数 $x: [0, \varepsilon] \rightarrow C$ が存在して、 $x(0) = \bar{x}$ かつ、

$$u = x'_+(0) = \lim_{t \rightarrow +0} \frac{1}{t}(x(t) - x(0))$$

のとき、ベクトル $u \in \mathbb{R}^n$ を、 C の \bar{x} における接ベクトルと呼ぶ。その接ベクトルの集合を接錘と呼び、 $T_C(\bar{x})$ とおく。また、 C の \bar{x} における法線錘を

$$N_C(\bar{x}) = \{v \in \mathbb{R}^n \mid \langle v, u \rangle \leq 0, u \in T_C(\bar{x})\}$$

で定義する ($\langle v, u \rangle$ は v と u の内積)。法線錘の中のベクトルを法線ベクトルと呼ぶ。

補足. 接錘と法線錘は $\bar{x} \in C$ の場合にのみ定義される。 \bar{x} が C の点でないときは、 $T_C(\bar{x})$, $N_C(\bar{x})$ にはどんなベクトルも入っていないと考える。

補足. 例えば、 $x(t) = (x(t), y(t)) \in \mathbb{R}^2$ の場合、

$$x'_+(0) = (x'_+(0), y'_+(0)) = \left(\lim_{t \rightarrow +0} \frac{x(t) - x(0)}{t}, \lim_{t \rightarrow +0} \frac{y(t) - y(0)}{t} \right)$$

となる。

接ベクトルと法線ベクトルの定義は少し難しいかもしれないが、関数の微分と同じように、定義に戻って計算することはほとんどなく、以下のような簡単な公式を組み合わせて使用する。

例 3 (一次元).

- (1). $C = [0, \infty) = \{x \in \mathbb{R} \mid x \geq 0\}$, $\bar{x} = 0$ のとき、接錘は $T_C(\bar{x}) = [0, \infty)$, 法線錘は $N_C(\bar{x}) = (-\infty, 0]$.

証明. $u \in [0, \infty) \Rightarrow u \in T_C(\bar{x})$ を示す。 $u \geq 0$ とする。 $x(t) = \bar{x} + tu$ とおくと、 $x(0) = \bar{x}$ かつ、 $t > 0$ ならば $x(t) \in C$ となる ($x: [0, \infty) \rightarrow C$)。 $x'_+(0) = \lim_{t \rightarrow +0} \frac{1}{t}(x(t) - x(0)) = u$ となるので、 $u \in T_C(\bar{x})$ が成り立つ。

次に、 $u \in T_C(\bar{x}) \Rightarrow u \in [0, \infty)$ を示す。 $u \in T_C(\bar{x})$ とすると、ある関数 $x: [0, \varepsilon] \rightarrow C$ が存在して、 $x(0) = \bar{x}$ かつ $x'_+(0) = u$ が成り立つ。ここで、 $x(t) - x(0) = x(t) - 0 \geq 0$ なので、 $x'_+(0) \geq 0$ となる。よって、 $u \in [0, \infty)$ が成り立つ。

接錘の公式より、法線錘に関しては自明。 □

- (2). $C = \mathbb{R}$, $\bar{x} \in \mathbb{R}$ のとき、接錘は $T_C(\bar{x}) = \mathbb{R}$, 法線錘は $N_C(\bar{x}) = \{0\}$ (0 のみ)。

証明. $u \in T_C(\bar{x}) \Rightarrow u \in \mathbb{R}$ は自明.

$u \in \mathbb{R} \Rightarrow T_C(\bar{x})$ を示す. $u \in \mathbb{R}$ とすると, $x(t) = \bar{x} + tu \in \mathbb{R}$ は $x(0) = \bar{x}$ かつ $x'_+(0) = u$ を満たす. よって $u \in T_C(\bar{x})$ が成り立つ.

□

- (3). $C = [-1, 2]$, $\bar{x} = -1$ のとき, 接錘は $T_C(\bar{x}) = [0, \infty)$, 法線錘は $N_C(\bar{x}) = (-\infty, 0]$ となる.

証明. (1) で $x(t)$ の定義域 $[0, \varepsilon]$ で ε として小さい正の数を考えれば, あとは同様の議論で証明できる. □

補足. C が区間のように直線的な境界しか持っていないときは, 直感的に説明できる. $\bar{x} \in C$ における接ベクトルとは, \bar{x} を始点として線分を書いたとき, C 上を離れずに書ける線分の方角を表すベクトルである. 尚, 接ベクトルは方向を表していても長さは関係ないので, 接ベクトルに正の定数を掛けたものもまた接ベクトルになる.

例 4.

- (1). 一般に, 数 $a < b$ に対して, $C = [a, b]$ とすると,

$$\begin{aligned} \text{接錘 } T_C(\bar{x}) &= \begin{cases} [0, \infty) & x = a \text{ のとき} \\ (-\infty, \infty) & a < x < b \text{ のとき} \\ (-\infty, 0] & x = b \text{ のとき} \end{cases} \\ \text{法線錘 } N_C(\bar{x}) &= \begin{cases} (-\infty, 0] & x = a \text{ のとき} \\ \{0\} & a < x < b \text{ のとき} \\ [0, \infty) & x = b \text{ のとき} \end{cases} \end{aligned}$$

- (2). $C = \{(x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid a_k \leq x_k \leq b_k, 1 \leq k \leq n\}$, $\bar{\mathbf{x}} = (\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n) \in C$ とする. $C_k = [a_k, b_k]$ とおくと,

$$\begin{aligned} T_C(\bar{\mathbf{x}}) &= \{(u_1, u_2, \dots, u_n) \in \mathbb{R}^n \mid u_k \in T_{C_k}(\bar{x}_k), 1 \leq k \leq n\} \\ N_C(\bar{\mathbf{x}}) &= \{(v_1, v_2, \dots, v_n) \in \mathbb{R}^n \mid v_k \in N_{C_k}(\bar{x}_k), 1 \leq k \leq n\}. \end{aligned}$$

- (3). $C = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \mid -1 \leq x_1 \leq 2, 3 \leq x_2 \leq 4\}$, $\bar{\mathbf{x}} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2) \in C$ とする. $C_1 = [-1, 2]$, $C_2 = [3, 4]$ とおくと,

$$\begin{aligned} T_C(\bar{\mathbf{x}}) &= \{(u_1, u_2) \in \mathbb{R}^2 \mid u_1 \in T_{C_1}(\bar{x}_1), u_2 \in T_{C_2}(\bar{x}_2)\} \\ N_C(\bar{\mathbf{x}}) &= \{(v_1, v_2) \in \mathbb{R}^2 \mid v_1 \in N_{C_1}(\bar{x}_1), v_2 \in N_{C_2}(\bar{x}_2)\}. \end{aligned}$$

2.3 制約付き最適化問題の最適性条件

初めに書いた一般的な制約付き最小化問題を再度書く.

$$(P) \quad \begin{aligned} & \text{最小化 } J(x) \\ & \text{制約 } x \in C \end{aligned}$$

前節で定義した法線錘を用いると, 以下のような最適性条件を得る.

定理 1 (基本最適性条件). $\bar{x} \in C$ が最小化問題 (P) の局所最小解ならば,

$$-\nabla J(\bar{x}) \in N_C(\bar{x})$$

が成り立つ.

これは制約なしの最小化問題に対する 1 次最適性条件を含む. 制約がないというのは, C が数ベクトル空間 \mathbb{R}^n に等しい場合である. このとき上記の最適性条件は

$$-\nabla J(\bar{x}) \in N_{\mathbb{R}^n}(\bar{x})$$

となる. ここで, 例より $N_{\mathbb{R}^n}(\bar{x})$ はゼロベクトルのみからなる集合であることがわかるので, この条件は $-\nabla J(\bar{x}) = (0, \dots, 0)$ を表す. このことから次の定義をする.

定義. 最適化問題 (P) に対して, $-\nabla J(\bar{x}) \in N_C(\bar{x})$ を満たす点 \bar{x} を, 問題 (P) の実行可能領域 C に関する停留点と呼ぶ.

補足. もし, 目的関数 J の通常の停留点が C の点であれば, それは C に関する停留点にもなる. というのは, (\bar{x}, \bar{y}) が通常の停留点であれば $-\nabla J(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 0)$ を満たす. この点が C の点であれば, 少なくともゼロベクトルは法線錘 $N_C(\bar{x}, \bar{y})$ に含まれるので (定義より), $-\nabla J(\bar{x}, \bar{y}) = (0, 0) \in N_C(\bar{x}, \bar{y})$ が成り立つのである.

証明には以下の補題を利用する.

補題 2. $\bar{x} \in C$ が最小化問題 (P) の局所最小解ならば, すべての $u \in T_C(\bar{x})$ に対して,

$$\langle \nabla J(\bar{x}), u \rangle \geq 0$$

が成り立つ.

証明. $\bar{x} \in C$ を局所最小解, $u \in T_C(\bar{x})$ とする. 接錘の定義より, ある関数 $x: [0, \varepsilon) \rightarrow C$ で, $x(0) = \bar{x}$ かつ $u = \lim_{t \rightarrow +0} \frac{1}{t}(x(t) - x(0))$ となるものが存在する. ここで, $t > 0$ に対して, $w(t) = \frac{1}{t}(x(t) - x(0))$ おく. すると $\lim_{t \rightarrow +0} w(t) = u$ が成り立つ.

いま, \bar{x} が局所最小解なので, \bar{x} に充分近い任意の $x \in C$ に対して, $J(x) \geq J(\bar{x})$ が成り立つ. t を 0 に近づけると, $x(t) = \bar{x} + tw(t)$ は C の点で \bar{x} に近づくので, テーラー展開より,

$$J(\bar{x}) \leq J(x(t)) = J(\bar{x} + tw(t)) = J(\bar{x}) + \nabla J(\bar{x})(tw(t)) + o(t\|w(t)\|)$$

となるので,

$$\nabla J(\bar{x})\mathbf{w}(t) + \frac{o(t\|\mathbf{w}(t)\|)}{t} \geq 0$$

を得る. ここで, $t \rightarrow +0$ とすると, $\langle \nabla J(\bar{x})\mathbf{u} \rangle \geq 0$ を得る. \square

定理 1 の証明. $\bar{x} \in C$ を局所最小解とすると, 補題 2 より, 任意の $\mathbf{u} \in T_C(\bar{x})$ に対して, $\nabla J(\bar{x})\mathbf{u} \geq 0$ を得る. よって法線錘の定義より, $-\nabla J(\bar{x}) \in N_C(\bar{x})$ が成り立つ. \square

2.4 実行可能領域に関する停留点の求め方

例題を用いて, 実行可能領域に関する停留点の求め方を学ぶ.

例 5.

$$\begin{aligned} \text{最小化 } J(x, y) &:= 3x^2 + 2xy + 10x + 6y + y^2 \\ \text{制約 } (x, y) \in C &:= \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x \geq 0, y \geq 0\} \end{aligned}$$

定理 1 を適用する. 目的関数 J の勾配ベクトルと法線錘は,

$$\begin{aligned} \nabla J(x, y) &= (6x + 2y + 10, 2y + 2x + 6), \\ N_C(x, y) &= \{(u, v) \in \mathbb{R}^2 \mid u \in N_{[0, \infty)}(x), v \in N_{[0, \infty)}(y)\} \end{aligned}$$

となる. 定理 1 より, もし (x, y) が最適解であれば C に関する停留点になるので,

$$\begin{aligned} -J_x(x, y) &= -(6x + 2y + 10) \in N_{[0, \infty)}(x) \\ -J_y(x, y) &= -(2x + 2y + 6) \in N_{[0, \infty)}(y) \end{aligned}$$

を満たす. よって, この条件を満たす $(x, y) \in C$ を求めることにより, 最適解の候補を見つける.

いま, (x, y) が C の点であれば, $x \geq 0, y \geq 0$ となるので, それぞれ,

$$-(6x + 2y + 10) < 0, \quad -(2x + 2y + 6) < 0$$

を満たす. 例 4 (1) より, 法線錘 $N_{[0, \infty)}(x)$ が負の数を含むのは, $x = 0$ のときのみである. y についても同様なので, C に関する停留点は $(x, y) = (0, 0)$ のみになる.

2.5 最適性と凸性

基本最適性条件 (定理 1) は 1 階微分の情報しか使っていないが, 制約付き最適化問題ではこの条件が主に使われる. 2 階微分の情報を用いた条件もあるが, 制約があると複雑になると, 基本最適性条件のみでも局所最適解を突き止められる場合が応用上多いからである.

そのような場合を説明するために, 凸集合と言うものを定義する.

定義. 任意の $x_1, x_2 \in C$ と $0 \leq \lambda \leq 1$ に対して, $\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2 \in C$ のとき, C を凸集合と呼ぶ.

補足. 図形的には, $C \in \mathbb{R}^n$ に対して, C の任意の 2 点を結ぶ線分が, また C の中に入るとき, C は凸集合になる.

定理 3. 最小化問題

$$(P) \quad \begin{array}{l} \text{最小化 } J(x) \\ \text{制約 } x \in C \end{array}$$

で, 目的関数 J が凸関数で, 実行可能領域 C が凸集合ならば, C に関する停留点は大域最小解になる.

補足. 目的関数が凸関数で実行可能領域が凸集合である最小化問題を凸計画と呼ぶ. 凸計画は沢山の応用を持つ. 定理 3 のような良い性質があるので, 実際に問題をモデル化するときにはなるべく凸計画になるようにモデル化するのだ.

この定理を念頭に例 5 を考える. この例では, 目的関数 $J(x, y) = 3x^2 + 2xy + 10x + 6y + y^2$ のヘッセ行列は

$$\nabla^2 J(x, y) = \begin{bmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

となり, これは正定値なので, 任意の点でヘッセ行列が正定値であることにより, J は凸関数になる. 一方, 実行可能領域は $C = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x \geq 0, y \geq 0\}$ となり, これは xy 平面の第一象限を表すので, 凸集合になることが分かる. よって, 定理 3 より, 例 5 で求めた C に関する停留点 $(0, 0)$ は大域最小解になる.