## 学習用テキスト 非線形計画法 (3)

# 非線形計画問題

## 水野 真治

東京工業大学 大学院社会理工学研究科 経営工学専攻 http://www.me.titech.ac.jp/~mizu\_lab/text/ 2013 年 2 月 9 日

#### 概要

ここでは、非線形計画問題を扱う。まず、制約のない1変数関数の最小化、多変数 関数の最小化について、最適解であるための必要条件と十分条件を述べ、実際に最小 解を求めるためのアルゴリズムについても紹介する。その後、等式制約のみの非線 形計画問題、不等式制約のみの非線形計画問題、一般の非線形計画問題の最適条件等 について説明する。

## 目次

L	非線形計画問題 (Nonlinear Programming Problem)	1
1.1	1 変数関数の最小化	1
1.2	l 変数関数最小化問題に対するニュートン法 (Newton's Method)	4
1.3	多変数関数の最小化	5
1.4	最急降下法	8
1.5	多変数関数最小化問題に対するニュートン法 (Newton's Method)	10
1.6	等式制約のみの非線形計画問題	11
1.7	不等式制約のみの非線形計画問題	11
1.8	一般の非線形計画問題	15
1.9	演習問題の略解・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	16

# 1 非線形計画問題 (Nonlinear Programming Problem)

### 1.1 1変数関数の最小化

1 変数関数の最小化とは、関数  $f:\mathcal{R}\to\mathcal{R}$  が与えられたとき、任意の実数  $x\in\mathcal{R}$  に対して

$$f(x^*) \le f(x)$$

を満たす  $x^* \in \mathcal{R}$  を求める問題である. この 1 変数最小化問題を

$$\min_{x} f(x) \tag{1}$$

と表す. また, 解  $x^*$  を関数 f(あるいは最小化問題) の大域的最小解または大域的最適解 (global optimal solution) という.

ある  $\epsilon > 0$  が存在し、 $|x - x^*| < \epsilon$  をみたす任意の x に対して

$$f(x^*) < f(x)$$

を満たすとき、この  $x^*$  を関数 f(最小化問題) の局所的最小解または局所的最適解 (local optimal solution) という.

関数 f は

$$x, y \in \mathcal{R}, \alpha \in [0, 1] \Rightarrow f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \le \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y).$$

を満たすとき、凸関数と呼ばれる。関数 f が凸関数ならば、任意の局所的最適解は大域的最適解となる。

f が連続微分可能で、その導関数を f' とするとき、 $x^*$  が問題 (1) の局所的最適解ならば

$$f'(x^*) = 0 (2)$$

が成立する. この条件 (2) を,  $x^*$  が局所的最適解であるための 1 次の必要条件 (first-order necessary condition) という. f が凸関数ならば,条件 (2) は, $x^*$  が局所的最適解であるための必要十分条件となる.

f が 2 回連続微分可能で,その 2 階の導関数を f'' とするとき, $x^*$  が問題 (1) の局所的最適解ならば

$$f'(x^*) = 0, \ f''(x^*) \ge 0 \tag{3}$$

が成立する. この条件 (3) を,  $x^*$  が局所的最適解であるための 2 次の必要条件 (second-order necessary condition) という. 逆に,  $x^*$  において

$$f'(x^*) = 0, \ f''(x^*) > 0$$
 (4)

が成立するならば、 $x^*$  は問題 (1) の局所的最適解となる.この条件 (4) を、 $x^*$  が局所的最適解であるための 2 次の十分条件 (second-order sufficient condition) という.

例 1.1 1 変数関数 f を任意の  $x \in \mathcal{R}$  に対して

$$f(x) = 3x^4 - 4x^3 - 12x^2 + 32$$

とする. x が局所的最小解ならば

$$f'(x) = 12x^3 - 12x^2 - 24x = 12x(x-2)(x+1) = 0$$

となるので, x = -1, 0, 2 がその候補である. このとき

$$f''(x) = 36x^2 - 24x - 24$$

より

$$f''(-1) = 36, \ f''(0) = -24, \ f''(2) = 72$$

となるので、x = -1,2 が 2 次の十分条件を満たすので、局所的最小解である.この関数のグラフは、図 1 のようにあらわすことができる.これをみると、x = 2 が大域的最小解となっており、x = -1 は大域的最小解ではない.

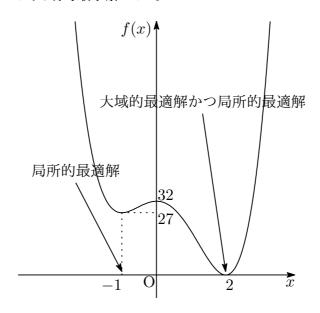


図1 大域的最適解と局所的最適解

演習問題 1.2 次の関数の局所的最小解であるための 1 次の必要条件をみたす解 x をすべて求め、それらの解が、2 次の必要条件および 2 次の十分条件をみたすかどうか調べよ.

(1) 
$$f(x) = 2x^3 - 9x^2 + 12x - 2$$

(2) 
$$f(x) = 3x^4 + 4x^3 - 6x^2 - 12x - 4$$

## 1.2 1変数関数最小化問題に対するニュートン法 (Newton's Method)

関数  $f: \mathcal{R} \to \mathcal{R}$  が 2 回連続微分可能なとき,次の最小化問題

$$\min_{x} f(x)$$

を解くためのニュートン法について解説する.

ニュートン法は、初期点  $x^0$  より数列 (点列) $\{x^k|k=0,1,\cdots\}$  を生成する反復法である。この数列の第 k 項を点  $x^k$  と呼ぶこともある。第 k 反復で得られた点を  $x^k$  とするとき、関数 f を  $x^k$  において 2 次近似した関数を

$$g(x) = f(x^k) + f'(x^k)(x - x^k) + \frac{1}{2}f''(x^k)(x - x^k)^2$$

とする.2 階の微係数  $f''(x^k)$  が正であると仮定すれば,関数 g は凸 2 次関数となり,その最小値は

$$g'(x) = f'(x^k) + f''(x^k)(x - x^k) = 0$$

をみたす $x^*$ において達成される.この解は

$$x^* = x^k - \frac{f'(x^k)}{f''(x^k)}$$

と表される. この  $x^*$  を次の点  $x^{k+1}$  として、上記の操作を繰り返すことにより、点列  $\{x^k\}$  を生成するのが、ニュートン法である.

例 1.3 1 変数関数 f を任意の  $x \in \mathcal{R}$  に対して

$$f(x) = 3x^4 - 4x^3 - 12x^2 + 32$$

とし、初期点を  $x^0=4$  とする.このとき、f(4)=352、f'(4)=480、f''(4)=456 であり、関数 f を  $x^0$  において 2 次近似した関数は

$$g(x) = 352 + 480(x - 4) + 228(x - 4)^{2}$$

となり,  $g'(x^*) = 0$ の解は

$$x^* = 4 - \frac{480}{456} = 2\frac{54}{57}$$

となる.

演習問題 1.4 次の関数

$$f(x) = 2x^3 - 9x^2 + 12x - 3$$

に初期点  $x^0 = 3$  からニュートン法を適用したとき、1 反復後の点を計算せよ.

## 1.3 多変数関数の最小化

多変数関数の最小化とは、関数  $f: \mathcal{R}^n \to \mathcal{R}$  が与えられたとき、任意の点  $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$  に対し

$$f(\boldsymbol{x}^*) \leq f(\boldsymbol{x})$$

となる  $x^* \in \mathcal{R}^n$  を求める問題である. この最小化問題を

$$\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$$

と表す.この解  $x^*$  を関数 f(最小化問題) の大域的最小解 (最適解) という. ある  $\epsilon > 0$  が存在し, $\|x - x^*\| < \epsilon$  をみたす任意の  $x \in \mathcal{R}^n$  に対して

$$f(\boldsymbol{x}^*) \leq f(\boldsymbol{x})$$

をみたすとき,この点  $x^*$  を関数 f(最小化問題) の局所的最小解 (最適解) という. 関数 f は

$$x, y \in \mathbb{R}^n, \alpha \in [0, 1] \Rightarrow f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \le \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$$

を満たすとき、凸関数と呼ばれる.関数 f が凸関数ならば、任意の局所的最適解は大域的最適解となる.

関数 f が連続微分可能であるとする. 点 x における偏導関数  $\frac{\partial f}{\partial x_i}$  の値を第 i 要素とする n 次元ベクトル

$$abla f(oldsymbol{x}) = \left(egin{array}{c} rac{\partial f(oldsymbol{x})}{\partial x_1} \ rac{\partial f(oldsymbol{x})}{\partial x_2} \ dots \ rac{\partial f(oldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{array}
ight)$$

を f の勾配ベクトル (gradient vector) という.

定理 1.5 点  $x^*$  が関数 f の局所的最適解ならば

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0} \tag{5}$$

が成立する.

証明 点  $x^*$  が関数 f の局所的最適解であるが, $\nabla f(x^*) \neq \mathbf{0}$  であると仮定し,矛盾を導く.このとき

$$oldsymbol{d} = -rac{
abla f(oldsymbol{x}^*)}{\|
abla f(oldsymbol{x}^*)\|}$$

とすれば、 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)^T\boldsymbol{d}<0$  である.平均値の定理より、任意の  $\epsilon>0$  に対して、ある  $\theta\in[0,1]$  が存在し

$$f(\boldsymbol{x}^* + \epsilon \boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}^*) + \epsilon \nabla f(\boldsymbol{x}^* + \theta \epsilon \boldsymbol{d})^T \boldsymbol{d}$$

が成立する.  $\nabla f$  の連続性より、十分小さな  $\epsilon > 0$  に対し  $\nabla f(\boldsymbol{x}^* + \theta \epsilon \boldsymbol{d})^T \boldsymbol{d} < 0$  となる. このとき、 $f(\boldsymbol{x}^* + \epsilon \boldsymbol{d}) < f(\boldsymbol{x}^*)$  となり、点  $\boldsymbol{x}^*$  が関数 f の局所的最適解であることに矛盾する.  $\blacksquare$ 

上の定理の式 (5) を  $x^*$  が関数 f の局所的最適解であるための 1 次の必要条件という. 関数 f が凸関数ならば、必要十分条件となる。一般に、 $\nabla f(x) = 0$  をみたす点 x を関数 f の停留点 (stationary point) という.

関数 f が 2 回連続微分可能であるとする. 点 x における 2 階の偏導関数  $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$  の値を i 行 j 列成分とする  $n \times n$  行列

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2 \partial x_n} \\ & & & \vdots & \\ \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}$$

をヘッセ行列 (Hessian matrix) という.

定理 1.6 点  $x^*$  が関数 f の局所的最適解ならば

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$$
 かつ  $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$  が半正定値行列 (6)

が成立する. ここで、半正定値行列 M とは、任意のベクトル  $x \in \mathcal{R}^n$  に対して、 $x^T M x > 0$  となる行列のことである.

証明 点  $x^*$  が関数 f の局所的最適解であるとき,定理 1.5 より  $\nabla f(x^*) = \mathbf{0}$  であるので,  $\nabla^2 f(x^*)$  が半正定値でないと仮定し,矛盾を導く.このとき,大きさ 1 のあるベクトル d に対して

$$\boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) \boldsymbol{d} < 0$$

となる. 関数  $\nabla^2 f$  の連続性より、十分小さな  $\bar{\alpha} > 0$  に対し

$$\boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{d}) \boldsymbol{d} < 0, \ \forall \alpha \in [0, \bar{\alpha}]$$

となる. 一方, 平均値の定理より, 任意の  $\epsilon > 0$  に対して, ある  $\theta \in [0,1]$  が存在し

$$f(\boldsymbol{x}^* + \epsilon \boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}^*) + \epsilon \nabla f(\boldsymbol{x}^*)^T \boldsymbol{d} + \frac{1}{2} \epsilon^2 \boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^* + \theta \epsilon \boldsymbol{d}) \boldsymbol{d}$$

が成立する.ここで,右辺の第 2 項は 0 であり, $\epsilon \leq \bar{\alpha}$  ならば第 3 項が負となるので, $f(\boldsymbol{x}^* + \epsilon \boldsymbol{d}) < f(\boldsymbol{x}^*)$  が成立し,点  $\boldsymbol{x}^*$  が関数 f の局所的最適解であることに矛盾する.  $\blacksquare$  上の定理にある条件 (6) を  $\boldsymbol{x}^*$  が関数 f の局所的最適解であるための  $\boldsymbol{2}$  次の必要条件という.

定理 1.7 関数 f が 2 回連続微分可能であり、条件

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$$
 かつ  $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$  が正定値行列 (7)

が成り立つならば、 $x^*$  は関数 f の局所的最適解である.ここで,正定値行列 M とは,任意のゼロベクトルでない  $x \in \mathcal{R}^n$  に対して, $x^T M x > 0$  となる行列のことである.

証明 点  $x^*$  で条件 (7) が成り立つとする.このとき,関数  $\nabla^2 f$  の連続性より,ある  $\bar{\alpha}>0$  が存在し,大きさ 1 の任意のベクトル d に対し

$$\boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{d}) \boldsymbol{d} > 0, \ \forall \alpha \in [0, \bar{\alpha}]$$

が成立する. 平均値の定理より、任意の  $\epsilon \in (0,\bar{\alpha}]$  に対して、ある  $\theta \in [0,1]$  が存在し

$$f(\boldsymbol{x}^* + \epsilon \boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}^*) + \epsilon \nabla f(\boldsymbol{x}^*)^T \boldsymbol{d} + \frac{1}{2} \epsilon^2 \boldsymbol{d}^T \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^* + \theta \epsilon \boldsymbol{d}) \boldsymbol{d} > f(\boldsymbol{x}^*)$$

が成立する. これより、 $x^*$ は、関数 f の局所的最適解である.

上の定理の条件(7) を $x^*$  が関数 f の局所的最適解であるための2 次の十分条件という.

例 1.8 2 変数関数 f を任意の  $(x_1,x_2)^T \in \mathcal{R}^2$  に対して

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 + 2x_2 + 3$$

とする. このとき,

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2x_2 - 4 \\ -2x_1 + 4x_2 + 2 \end{pmatrix}$$

かつ

$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \left(\begin{array}{cc} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{array}\right)$$

となる. このとき, 最小解であるための一次の必要条件は

$$2x_1 - 2x_2 = 4 \\
-2x_1 + 4x_2 = -2$$

となるので、 $(x_1,x_2)=(3,1)$  が得られる.この点(この場合、任意の点)において、ヘッセ行列  $\nabla^2 f(x_1,x_2)$  が正定値となるので、2 次の必要条件と十分条件を満たす.したがって、 $(x_1,x_2)=(3,1)$  は f の局所的最適解であり、そのときに最小値 -2 をとる.この場合、f が凸関数であるので、これは大域的最適解でもある.

#### 演習問題 1.9 次の2変数関数

$$f(x_1, x_2) = x_1^3 + 2x_1x_2 + x_2^2 + x_1 + 2x_2$$

の局所的最小解であるための 1 次の必要条件をみたす点  $(x_1, x_2)^T$  をすべて求め、それらの点が、2 次の必要条件および 2 次の十分条件をみたすかどうか調べよ.

### 1.4 最急降下法

関数  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  が 2 回連続微分可能なとき、次の最小化問題

$$\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$$

を考える. この問題に対する最急降下法は,反復解法であり,初期点  $x^0$  より点列 $\{x^k|k=0,1,\cdots\}$  を生成する.

第 k 反復で点  $\boldsymbol{x}^k$  が求められているとし、次の点の求め方を説明する。勾配ベクトル  $\nabla f(\boldsymbol{x}^k)$  は、この点における関数 f の増加方向であるから、その逆方向へ進むことにより、関数 f の値を減少させることができる。ステップサイズを  $\alpha$  として、次の点を

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k - \alpha \nabla f(\boldsymbol{x}^k)$$

とする. ステップサイズ  $\alpha$  は、問題

$$\min_{\alpha} f(\boldsymbol{x}^k - \alpha \nabla f(\boldsymbol{x}^k))$$

を解くことにより求めることができる.上記の問題は,1 変数  $\alpha$  に関する最小化問題であるので,直線探索(1 変数関数の最小化,1 次元探索,line search)により近似解を求めることができる.

アルゴリズム 1.10 最急降下法のアルゴリズムは、次のステップからなる、

ステップ 0 初期点  $x^0$  を選び、十分小さな正の数  $\epsilon$  を定め、k=0 とする.

ステップ 1  $\|\nabla f(\boldsymbol{x}^k)\| \le \epsilon$  ならばストップし、 $\boldsymbol{x}^k$  を近似解とする. さもなければ問題

$$\min_{\alpha} f(\boldsymbol{x}^k - \alpha \nabla f(\boldsymbol{x}^k))$$

の (近似) 解  $\alpha^*$  を求める.

ステップ 2  $x^{k+1} = x^k - \alpha^* \nabla f(x^k)$  とし、k を 1 増加しステップ 1 へ戻る.

上の最急降下法のアルゴリズムにおいて、 $\epsilon=0$  とすれば、生成される点列が有界ならば、その点列の集積点  $\boldsymbol{x}^*$  は関数 f の停留点となる ( $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)=0$  となる) ことが知られている。

#### 例 1.11 2 変数関数を

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 + 2x_2 + 3$$

とし、初期点を  $(x_1, x_2) = (0,0)$  とするとき、最急降下法による次の点  $(x_1^1, x_2^1)$  を求めてみる。勾配ベクトルは、

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2x_2 - 4 \\ -2x_1 + 4x_2 + 2 \end{pmatrix}$$

より

$$\nabla f(0,0) = \left(\begin{array}{c} -4\\ 2 \end{array}\right)$$

となる. ステップサイズを  $\alpha$  とすれば

$$\begin{pmatrix} x_1^1 \\ x_2^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} -4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4\alpha \\ -2\alpha \end{pmatrix}$$

となる. これより

$$f(x_1^1, x_2^1) = 16\alpha^2 + 16\alpha^2 + 8\alpha^2 - 16\alpha - 4\alpha + 3 = 40\alpha^2 - 20\alpha + 3$$

となる. この関数  $f(x_1^1, x_2^1)$  は, $\alpha = 1/4$  のときに最小値 1/2 をとる.  $\alpha = 1/4$  であるから,

$$\left(\begin{array}{c} x_1^1 \\ x_2^1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} 1 \\ -\frac{1}{2} \end{array}\right)$$

が得られる.

演習問題 1.12  $(x_1^1,x_2^1)=(1,-\frac12)$  から,関数  $f(x_1,x_2)=x_1^2-2x_1x_2+2x_2^2-4x_1+2x_2+3$  に最急降下法を適用したときの,次の点  $(x_1^2,x_2^2)$  を計算せよ.

## 1.5 多変数関数最小化問題に対するニュートン法 (Newton's Method)

写像  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  が 2 回連続微分可能なとき,次の最小化問題

$$\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$$

を考える. 関数 f を点  $x^k$  において 2 次近似した関数を

$$g(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T \nabla^2 f(x^k) (x - x^k)$$

とする. ヘッセ行列  $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)$  が正定値であると仮定すれば, g は凸 2 次関数となり, その最小値は

$$\nabla g(\boldsymbol{x}) = \nabla f(\boldsymbol{x}^k) + \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^k) = 0$$

をみたす点 $\hat{x}$ において達成される.この解は

$$\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^k = -\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^k)$$

と表される.  $d=\hat{x}-x^k=-\nabla^2 f(x^k)^{-1}\nabla f(x^k)$  を探索方向とし、ステップ幅を  $\alpha$  とし、問題

$$\min_{\alpha} f(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{d})$$

を解き、その解  $\alpha^*$  に対して、次の点  $x^{k+1} = x^k + \alpha^* d$  を求める.

アルゴリズム 1.13 ニュートン法のアルゴリズムは、次のステップからなる.

ステップ 0 初期点  $x^0$  を選び、十分小さな正の数  $\epsilon > 0$  を定め、k = 0 とする. ステップ 1  $\|\nabla f(x^k)\| < \epsilon$  ならばストップし、 $x^k$  を近似解とする. さもなければ、

$$\boldsymbol{d} = -\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^k)^{-1} \nabla f(\boldsymbol{x}^k)$$

を計算し,問題

$$\min_{\alpha} f(\boldsymbol{x}^k + \alpha \boldsymbol{d})$$

の (近似) 解  $\alpha^*$  を求める.

ステップ 2  $x^{k+1} = x^k + \alpha^* d$  とし、k を 1 増加してステップ 1 へ戻る.

最小解  $x^*$  においてヘッセ行列  $\nabla^2 f(x^*)$  が正定値であり、初期点  $x^0$  が  $x^*$  に十分近いならば、ニュートン法で生成される点列は  $x^*$  に速く収束する (局所的に 2 次収束する) ことが知られている.

演習問題 1.14 原点 (0,0) を初期点とするとき、関数  $f(x_1,x_2)=x_1^2-2x_1x_2+2x_2^2-4x_1+2x_2+3$  にニュートン法を適用し、1 反復後の点を計算せよ.

## 1.6 等式制約のみの非線形計画問題

等式制約のみの非線形計画問題は、変数ベクトル  $x \in \mathbb{R}^n$  と関数  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ,  $h_i: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$   $(j=1,2,\cdots,l)$  に対し

(NLP0) 最小化 
$$f(x)$$
 制約条件  $h_j(x) = 0, j = 1, 2, \cdots, l$ 

と表される.ここで,目的関数 f とすべての  $h_j$  が 2 回連続微分可能であるとする. 制約条件をすべてみたす点 x を実行可能解といい,すべての実行可能解の集合  $S=\{x|h_j(x)=0,j=1,2,\cdots,l\}$  を実行可能領域という.

任意の実行可能解  $x \in S$  に対して、

$$f(\boldsymbol{x}^*) \leq f(\boldsymbol{x})$$

となる  $x^* \in S$  を非線形計画問題 (NLP0) の大域的最小解 (最適解) という.ある  $\epsilon > 0$  が存在し, $\|x-x^*\| < \epsilon$  をみたす任意の実行可能解  $x \in S$  に対して,

$$f(x^*) \le f(x)$$

をみたす  $x^* \in S$  を非線形計画問題 (NLP0) の局所的最小解 (最適解) という.

点  $\boldsymbol{x}^*$  が非線形計画問題 (NLP0) の局所的最適解であり、点  $\boldsymbol{x}^*$  における勾配ベクトル  $\nabla h_j(\boldsymbol{x}^*)$   $(j=1,2,\cdots,l)$  が 1 次独立であるならば、ある  $\boldsymbol{v}^*=(v_1^*,v_2^*,\cdots,v_l^*)\in\mathcal{R}^m$  が存在し

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^m v_j^* \nabla h_j(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$$
  
$$h_j(\boldsymbol{x}^*) = 0, \ j = 1, 2, \dots, l$$

が成立する. これを最適性の1次の必要条件という.

#### 1.7 不等式制約のみの非線形計画問題

不等式制約のみの非線形計画問題は、変数ベクトル  $x \in \mathbb{R}^n$  と関数  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ,  $g_i: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$   $(i=1,2,\cdots,m)$  に対し

(NLP1) 最小化 
$$f(\mathbf{x})$$
 制約条件  $g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, 2, \dots, m$ 

と表される.ここで,目的関数 f とすべての  $g_i$  は 2 回連続微分可能であるとする.制約条件をすべてみたす点 x を実行可能解といい,すべての実行可能解の集合  $S=\{x|g_i(x)\leq 0, i=1,2,\cdots,m\}$  を実行可能領域という.

任意の実行可能解  $x \in S$  に対して,

$$f(\boldsymbol{x}^*) \leq f(\boldsymbol{x})$$

となる  $x^* \in S$  を非線形計画問題 (NLP1) の大域的最小解 (最適解) という.ある  $\epsilon > 0$  が存在し、 $\|x-x^*\| < \epsilon$  をみたす任意の実行可能解  $x \in S$  に対して、

$$f(\boldsymbol{x}^*) \leq f(\boldsymbol{x})$$

をみたす  $x^* \in S$  を非線形計画問題 (NLP1) の局所的最小解 (最適解) という.

実行可能領域 S が凸集合 (すべての関数  $g_i$  が凸関数) で目的関数 f が凸関数ならば、任意の局所的最小解が大域的最小解となる。このとき、問題 (NLP1) を凸計画問題という。

#### 例 1.15 非線形計画問題の例として,

最小化 
$$f(x_1,x_2) = \frac{1}{2}(x_1-2)^2 - x_2$$
 制約条件 
$$g_1(x_1,x_2) = (x_1-1)^2 + x_2^2 - 1 \le 0$$
 
$$g_2(x_1,x_2) = x_1 - 1 \le 0$$
 
$$g_3(x_1,x_2) = -x_2 \le 0$$

を扱う. この問題の最適解は、 ${m x}^*=(1,1)^T$  であり、そのときの最小値は -1/2 である.

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + u_1^* \nabla g_1(\boldsymbol{x}^*) + u_2^* \nabla g_2(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$$

が成立する. 実際,  $u_1^*=1/2$ ,  $u_2^*=1$  とすれば, 上の式が成立する. 上記の条件と制約条件を一緒にすると,

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + u_1^* \nabla g_1(\mathbf{x}^*) + u_2^* \nabla g_2(\mathbf{x}^*) + u_3^* \nabla g_3(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$g_i(\mathbf{x}^*) \le 0$$

$$u_i^* \ge 0$$

$$u_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0$$

$$i = 1, 2, 3$$

と表すことができる.ここで, $g_3(\mathbf{x}^*) < 0$  より, $u_3^* = 0$  である.

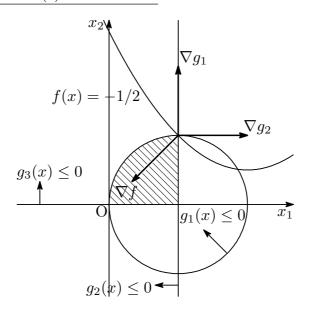


図2 最適解での目的関数と制約関数の勾配ベクトルの関係

一般には,点  $x^*$  が非線形計画問題 (NLP1) の局所的最適解であり,点  $x^*$  における有効制約の勾配ベクトルが 1 次独立であるならば,ある  $u^*=(u_1^*,u_2^*,\cdots,u_m^*)\in\mathcal{R}^m$  が存在し

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$g_i(\boldsymbol{x}^*) \le 0$$

$$u_i^* \ge 0$$

$$u_i^* g_i(\boldsymbol{x}^*) = 0$$

$$i = 1, 2, \dots, m$$
(8)

が成立する. これを最適性の 1 次の必要条件といい,カルーシュ・キューン・タッカー条件 (Karush-Kuhn-Tucker 条件,KKT 条件) またはキューン・タッカー条件 (KT 条件) ともいう.

例 1.16 次の例

最小化 
$$f(\mathbf{x}) = x_1 + x_2$$
  
制約条件  $g_1(\mathbf{x}) = -x_1^3 + x_2 \le 0$   
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$ 

では、 $x^* = (x_1, x_2) = (0, 0)$  が最適解であり、最適値が 0 である.

図 3 には,この問題の実行可能領域と目的関数の値が 0 となる直線を表している.最適解において,制約  $g_1(\boldsymbol{x}) \leq 0$  と  $g_2(\boldsymbol{x}) \leq 0$  は,共に等号が成立しており,有効制約である.図 3 を見るとわかるように,勾配ベクトル  $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = (1,1)^T$ , $\nabla g_1(\boldsymbol{x}^*) = (0,1)^T$ ,

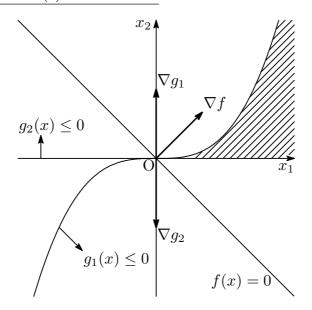


図3 最適解での有効制約の勾配ベクトルが一次独立でない例

 $\nabla g_2(x^*) = (0, -1)^T$  に対して KKT 条件の第 1 式

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + u_1^* \nabla g_1(\boldsymbol{x}^*) + u_2^* \nabla g_2(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$$

を満たす  $u_1^* \ge 0$  と  $u_2^* \ge 0$  が存在しない。その理由は、この最適解において、有効制約の勾配ベクトル  $\nabla g_1(\boldsymbol{x}^*) = (0,1)^T$ 、 $\nabla g_2(\boldsymbol{x}^*) = (0,-1)^T$  が 1 次独立となっていないからである。

非線形計画問題 (NLP1) に対し、ラグランジュ乗数  $u_i \ge 0$   $(i=1,2,\cdots,m)$  を導入して、ラグランジュ関数 (Lagrangian) を

$$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) = f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{m} u_i g_i(\boldsymbol{x})$$

と定義する. ただし、ラグランジュ乗数の中に負の値をとるものがるときは、 $L(x,u)=-\infty$  とする. このとき、KKT 条件は、

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{u}^*) = \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^m u_i^* \nabla g_i(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$g_i(\boldsymbol{x}^*) \le 0$$

$$u_i^* \ge 0$$

$$u_i^* g_i(\boldsymbol{x}^*) = 0$$

$$i = 1, 2, \dots, m$$

と表わされる.

最適解  $x^*$  における有効制約の集合を

$$I(\mathbf{x}^*) = \{i | q_i(\mathbf{x}^*) = 0\}$$

とし、すべての有効制約の勾配ベクトルと直交するベクトルの集合を

$$M = \{ \boldsymbol{y} \in \mathcal{R}^n | \nabla g_i(\boldsymbol{x}^*)^T \boldsymbol{y} = 0, i \in I(\boldsymbol{x}^*) \}$$

とする. 非線形計画問題 (NLP1) の局所的最適解  $x^*$  において有効制約の勾配ベクトルが 1 次独立で、KKT 条件をみたすラグランジュ乗数を  $u^*$  とすれば、

$$\boldsymbol{y}^T \nabla_{\boldsymbol{x}}^2 L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{u}^*) \boldsymbol{y} \ge 0 \text{ for } \forall \boldsymbol{y} \in M$$

が成立する. これと KKT 条件を合わせて, 最適性の 2 次の必要条件という.

逆に、KKT 条件をみたす  $(x^*, u^*)$  に対して、

$$M' = \left\{ oldsymbol{y} \in \mathcal{R}^n | \begin{array}{l} 
abla g_i(oldsymbol{x}^*)^T oldsymbol{y} = 0, i \in I(oldsymbol{x}^*) ext{ and } u_i^* > 0, \\ 
abla g_i(oldsymbol{x}^*)^T oldsymbol{y} \geq 0, i \in I(oldsymbol{x}^*) ext{ and } u_i^* = 0 \end{array} 
ight\}$$

と定義するとき

$$\boldsymbol{y}^T \nabla_{\boldsymbol{x}}^2 L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{u}^*) \boldsymbol{y} > 0$$
 for  $\forall \boldsymbol{y} \in M'$  and  $\boldsymbol{y} \neq 0$ 

が成り立つならば、 $x^*$  は (NLP1) の局所的最適解となる.この条件と KKT 条件を合わせて最適性の 2 次の十分条件という.

演習問題 1.17 2次計画問題

最小化 
$$c^Tx + \frac{1}{2}x^TQx$$
制約条件  $Ax \leq b$  $x \geq 0$ 

の KKT 条件を求めよ.

## 1.8 一般の非線形計画問題

等式制約と不等式制約を持つ一般的な非線形計画問題は

(NLP2) 最小化 
$$f(\mathbf{x})$$
 制約条件  $g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m$   $h_i(\mathbf{x}) = 0, j = 1, \dots, l$ 

と表すことができる. 関数 f とすべての  $g_i$ ,  $h_j$  が 2 回連続微分可能であるとする. 問題 (NLP1) と同様に,実行可能解,大域的最適解,局所的最適解などを定義できる.

問題 (NLP2) のラグランジュ関数を

$$L(x, u, v) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i g_i(x) + \sum_{i=1}^{l} v_j h_j(x)$$

と定義する. このとき、点  $x^*$  が非線形計画問題 (NLP2) の最適解であり、有効制約の勾配ベクトル  $\nabla g_i(x^*)$  ( $i \in I(x^*)$ )、 $\nabla h_j(x^*)$  が 1 次独立ならば、ある  $u^*$  と  $v^*$  に対し次の条件 (KKT 条件)

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{u}^*, \boldsymbol{v}^*) = \mathbf{0}$$

$$g_i(\boldsymbol{x}^*) \le 0$$

$$u_i^* \ge 0$$

$$u_i^* g_i(\boldsymbol{x}^*) = 0$$

$$h_j(\boldsymbol{x}^*) = 0, \ j = 1, \dots, l$$
(9)

が成立する. 問題 (NLP2) の 2 次の必要条件と十分条件も (NLP1) と同様に求めることができる.

#### 演習問題 1.18 2次計画問題

最小化 
$$c^Tx + \frac{1}{2}x^TQx$$
  
制約条件  $A_1x \leq b_1$   
 $A_2x = b_2$ 

の KKT 条件を求めよ.

### 1.9 演習問題の略解

#### 1.9.1 演習問題 1.2 の略解

(1) 関数

$$f(x) = 2x^3 - 9x^2 + 12x - 2$$

の局所的最小解であるための 1 次の必要条件は

$$f'(x) = 6(x-1)(x-2) = 0$$

となる. したがって、x = 1,2 が 1 次の必要条件をみたす. このとき

$$f''(x) = 12x - 18$$

となる. f''(1) = -6 < 0 より, x = 1 は 2 次の必要条件も 2 次の十分条件も満たさない. したがって, x = 1 は,関数 f の局所的最小解ではない. また, f''(2) = 6 > 0 より, x = 2 は 2 次の必要条件も 2 次の十分条件も満たす. したがって, x = 2 は,f の局所的最小解である.

(2) 関数

$$f(x) = 3x^4 + 4x^3 - 6x^2 - 12x - 4$$

の局所的最小解であるための1次の必要条件は

$$f'(x) = 12(x+1)^2(x-1) = 0$$

となる. したがって, x = -1.1 が 1 次の必要条件をみたす. このとき

$$f''(x) = 36x^2 + 24x - 12$$

となる. f''(-1)=0 より, x=1 は 2 次の必要条件を満たすが, 2 次の十分条件を満たさない. この条件だけでは, x=1 が局所的最小解であるかどうかわからないが, 関数 f のグラフを書くと, 局所的最適解ではないことがわかる. また, f''(1)=48>0 より, x=1 は 2 次の必要条件も 2 次の十分条件も満たす. したがって, x=1 は, 関数 f の局所的最小解である.

#### 1.9.2 演習問題 1.4 の略解

関数 f を任意の  $x \in \mathcal{R}$  に対して

$$f(x) = 2x^3 - 9x^2 + 12x - 3$$

とし、ニュートン法の初期点を  $x^0=3$  とする.このとき、f(3)=6、f'(3)=12、f''(3)=18 であるので、関数 f を  $x^0=3$  において 2 次近似した関数は

$$g(x) = 6 + 12(x - 3) + 9(x - 3)^{2}$$

となり,  $g'(x^1) = 0$ の解は

$$x^1 = 3 - \frac{12}{18} = 2\frac{1}{3}$$

となる. この  $x^1$  がニュートン法で 1 反復後に計算される点である.

#### 1.9.3 演習問題 1.9 の略解

2 変数関数

$$f(x_1, x_2) = x_1^3 + 2x_1x_2 + x_2^2 + x_1 + 2x_2$$

の勾配ベクトルは

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 3x_1^2 + 2x_2 + 1 \\ 2x_1 + 2x_2 + 2 \end{pmatrix}$$

となり, ヘッセ行列は

$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \left( \begin{array}{cc} 6x_1 & 2\\ 2 & 2 \end{array} \right)$$

となる. このとき, 最小解であるための一次の必要条件は

$$3x_1^2 + 2x_2 + 1 = 0$$

$$2x_1 + 2x_2 + 2 = 0$$

となるので、 $(x_1,x_2)=(-1/3,-2/3),(1,-2)$  が得られる。点  $(x_1,x_2)=(-1/3,-2/3)$  において、ヘッセ行列

$$\nabla^2 f(-\frac{1}{3}, -\frac{2}{3}) = \begin{pmatrix} -2 & 2\\ 2 & 2 \end{pmatrix}$$

は、半正定値ではない. したがって、この点  $(x_1,x_2)=(-1/3,-2/3)$  は、2 次の必要条件と 2 次の十分条件を満たさず、f の局所的最適解ではない.また、点  $(x_1,x_2)=(1,-2)$  において、ヘッセ行列

$$\nabla^2 f(1, -2) = \left( \begin{array}{cc} 6 & 2\\ 2 & 2 \end{array} \right)$$

は,正定値となる.したがって,この点  $(x_1,x_2)=(1,-2)$  は,2 次の必要条件と2 次の十分条件を満たし,f の局所的最適解である.

#### 1.9.4 演習問題 1.12 の略解

関数

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 + 2x_2 + 3$$

に点  $\boldsymbol{x}^1=(x_1^1,x_2^1)=(1,-1/2)$  から最急降下法を適用したときの,次の点  $\boldsymbol{x}^2=(x_1^2,x_2^2)$  を求める.勾配ベクトルは,

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2x_2 - 4 \\ -2x_1 + 4x_2 + 2 \end{pmatrix}$$

より

$$\nabla f(1, -\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

となる. ステップサイズを  $\alpha$  とすれば

$$m{x}^2 = \left( \begin{array}{c} x_1^2 \\ x_2^2 \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} 1 \\ -rac{1}{2} \end{array} \right) - lpha \left( \begin{array}{c} -1 \\ -2 \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} 1+lpha \\ -rac{1}{2}+2lpha \end{array} \right)$$

となる. これより

$$f(x_1^2, x_2^2) = 5\alpha^2 - 5\alpha + \frac{1}{2}$$

となる. この関数  $f(x_1^2, x_2^2)$  は、 $\alpha = 1/2$  のときに最小値 -3/4 をとる.  $\alpha = 1/2$  であるから、

$$m{x}^2 = \left( egin{array}{c} x_1^2 \ x_2^2 \end{array} 
ight) = \left( egin{array}{c} rac{3}{2} \ rac{1}{2} \end{array} 
ight)$$

が得られる.

#### 1.9.5 演習問題 1.14 の略解

関数

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 + 2x_2 + 3$$

に点  $\boldsymbol{x}^0=(x_1^0,x_2^0)=(0,0)$  からニュートン法を適用したときの,次の点  $\boldsymbol{x}^1=(x_1^1,x_2^1)$  を求める. 勾配ベクトルは

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 - 2x_2 - 4 \\ -2x_1 + 4x_2 + 2 \end{pmatrix}$$

となり, ヘッセ行列は

$$\nabla^2 f(x_1, x_2) = \left(\begin{array}{cc} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{array}\right)$$

となる. これより

$$\nabla f(0,0) = \left(\begin{array}{c} -4\\ 2 \end{array}\right)$$

かつ

$$\nabla^2 f(0,0) = \left(\begin{array}{cc} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{array}\right)$$

となる. したがって, ニュートン方向は

$$\mathbf{d} = -\nabla^2 f(0,0)^{-1} \nabla f(0,0) = -\begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となる. このとき,

$$f(\boldsymbol{x}^0 + \alpha \boldsymbol{d}) = f(3\alpha, \alpha) = 5\alpha^2 - 10\alpha + 3$$

となり、これは  $\alpha=1$  のとき、最小値 -2 をとる.したがって、 $\mathbf{x}^1=\mathbf{x}^0+\mathbf{d}=(3,1)$  となる.これは、2 次関数 f の最適解となっている.一般に、関数 f が凸 2 次関数の場合には、ニュートン法により最適解が得られる.

#### 1.9.6 演習問題 1.17 の略解

2 次計画問題

最小化 
$$oldsymbol{c}^Toldsymbol{x}+rac{1}{2}oldsymbol{x}^Toldsymbol{Q}oldsymbol{x}$$
 制約条件  $oldsymbol{A}oldsymbol{x}\leqoldsymbol{b}$   $oldsymbol{x}\geqoldsymbol{0}$ 

の KKT 条件は、(8) より、ある  $u_1 \in \mathbb{R}^m$  と  $u_2 \in \mathbb{R}^n$  が存在し、

$$egin{aligned} (m{Q}m{x} + m{c}) + m{A}^Tm{u}_1 - m{u}_2 &= m{0} \ m{A}m{x} - m{b} &\leq m{0} \ -m{x} &\leq m{0} \ m{u}_1 &\geq m{0}, \ m{u}_2 &\geq m{0} \ m{u}_1^T(m{A}m{x} - m{b}) &= 0, \ m{u}_2^Tm{x} &= 0 \end{aligned}$$

となる.

## 1.9.7 演習問題 1.18 の略解

2 次計画問題

最小化 
$$oldsymbol{c}^Toldsymbol{x} + rac{1}{2}oldsymbol{x}^Toldsymbol{Q}oldsymbol{x}$$
制約条件  $oldsymbol{A}_1oldsymbol{x} \leq oldsymbol{b}_1$   $oldsymbol{A}_2oldsymbol{x} = oldsymbol{b}_2$ 

の KKT 条件は, (9) より, ある  $u \in \mathbb{R}^m$  と  $v \in \mathbb{R}^l$  が存在し,

$$(Qx + c) + A_1^T u + A_2^T v = 0$$
  
 $A_1x - b_1 \le 0$   
 $u \ge 0$   
 $u^T (A_1x - b_1) = 0$   
 $A_2x - b_2 = 0$ 

となる.

**謝辞**:本テキストで使用している図の作成をしていただいた田中未来君 (東工大大学院生) に感謝します.