オペレーションズリサーチ 2010(4) 非線形計画問題

水野 眞治 (西 9-520 号室)、中田 和秀 (西 9-521 号室), 北原知就 (西 9-425 号室) 本資料は,参考文献 [1] をもとにしている.

5 非線形計画問題 (Nonlinear Programming Problem)

5.1 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 ƒ 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.<math>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

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

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.

5.2 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 $f^{\prime\prime}(x^k)$ 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 5.1 1 変数関数 f を任意の $x \in \mathcal{R}$ に対して

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

とし,初期点を $x^0=4$ とする.このとき, 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.

5.3 多変数関数の最小化

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

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

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

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

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 5.2 点 x^* が関数 f の局所的最適解ならば

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

が成立する.

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 5.3 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.

上の定理にある条件 (6) を x^* が関数 f の局所的最適解であるための 2 次の必要条件という.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, $x^TMx\geq 0$ となる行列のことである.

定理 5.4 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.

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.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, $x^TMx>0$ となる行列のことである.

例 5.5 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

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

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.

5.4 最急降下法

関数 $f: \mathcal{R}^n \to \mathcal{R}$ 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 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 $\nabla f(x^k)$ 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 α 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 α 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 α 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, $\mathrm{line}\ \mathrm{search}$)により近似解を求めることができる.

アルゴリズム 5.6 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 ϵ を定め、k=0 とする、

ステップ $1 \| \nabla f(x^k) \| \le \epsilon$ ならばストップし, 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 α^* を求める.

ステップ 2 $x^{k+1} = x^k - lpha^* \nabla f(x^k)$ 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 x^* は関数 f の停留点となる $(\nabla f(x^*)=0$ となる) ことが知られている.

5.5 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 $f: \mathcal{R}^n \to \mathcal{R}$ 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 $oldsymbol{x}^k$ において 2 次近似した関数を

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

とする.ヘッセ行列 $abla^2 f({m x}^k)$ が正定値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

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

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.

 $m{d} = \hat{m{x}} - m{x}^k = abla^2 f(m{x}^k)^{-1}
abla f(m{x}^k)$ を探索方向とし,ステップ幅を lpha とし,問題

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

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

アルゴリズム 5.7 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 $1 \| \nabla f(x^k) \| \leq \epsilon$ 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 α^* 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.

5.6 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 $x\in\mathcal{R}^n$ と関数 $f:\mathcal{R}^n\to\mathcal{R},$ $g_i:\mathcal{R}^n\to\mathcal{R}~(i=1,2,\cdots,m)$ に対し

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

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 5.8 非線形計画問題の例として,

最小化
$$f(x_1,x_2)=(x_1-1)^2+(x_2-2)^2$$
 制約条件
$$g_1(x_1,x_2)=x_1^2+x_2^2-2\leq 0$$

$$g_2(x_1,x_2)=-x_1+x_2\leq 0$$

$$g_3(x_1,x_2)=-x_2\leq 0$$

を扱う.この問題の最適解は, $x^*=(1,1)^T$ であり,そのときの最小値は 1 である.最適解で等号が成立している制約式 $(g_1(x^*)=0$ と $g_2(x^*)=0)$ を有効制約という.最適解 x^* において目的関数の勾配ベクトル $\nabla f(x^*)=(0,-2)^T$ が有効制約の勾配ベクトル $\nabla g_1(x^*)=(2,2)^T$ と $\nabla g_2(x^*)=(-1,1)^T$ の非負結合で釣り合っている.すなわち,ある $u_1^*\geq 0$ と $u_2^*\geq 0$ に対し,

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

が成立する.実際, $u_1^*=.5$, $u_2^*=1$ 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,

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

$$\begin{cases} g_i(\mathbf{x}^*) \le 0 \\ u_i^* \ge 0 \\ u_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0 \end{cases} i = 1, 2, 3$$

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

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

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

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

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) と呼ぶ.

例 5.9 次の例題

最小化
$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 + 1)^2$$

制約条件 $g_1(\mathbf{x}) = (x_1 - 1)^3 + x_2 \le 0$
 $g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \le 0$
 $g_3(\mathbf{x}) = -x_2 \le 0$

では,最適解 $(x_1,x_2)=(1,0)$ において,有効制約の勾配ベクトルが 1 次独立でない.この例題では,この最適解において KKT 条件が成立していない.

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

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

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, $L(m{x},m{u}) = -\infty$ とする.このとき,KKT 条件は,

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

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

$$u_i^* \ge 0$$

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

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

と表わされる.

最適解 x^* における有効制約の集合を

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

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 ($\mathrm{NLP1}$) 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,

$$M' = \left\{ \boldsymbol{y} \in \mathcal{R}^n | \begin{array}{l} \nabla g_i(\boldsymbol{x}^*)^T \boldsymbol{y} = 0, i \in I(\boldsymbol{x}^*) \text{ and } u_i^* > 0, \\ \nabla g_i(\boldsymbol{x}^*)^T \boldsymbol{y} \ge 0, i \in I(\boldsymbol{x}^*) \text{ and } u_i^* = 0 \end{array} \right\}$$

と定義するとき

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

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.

5.7 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 $f(\boldsymbol{x})$ 制約条件 $g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0, \ i=1,\cdots,m$ $h_j(\boldsymbol{x})=0, \ j=1,\cdots,l$

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 $(\mathrm{NLP1})$ 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

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

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)

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

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

$$\boldsymbol{u}_i^* \ge 0$$

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

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

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.

参考文献

[1] 水野眞治:学習用テキスト 非線形計画法 (1) 非線形計画問題, Web 上のテキスト, http://www.me.titech.ac.jp/~mizu_lab/text/(2010)