オペレーションズ・リサーチ II (4)

田中 俊二

shunji.tanaka@okayama-u.ac.jp

スケジュール

No.	内容
1	導入 (非線形最適化問題，ゲーム理論，多目的最適化問題)
2	非線形計画 1 (勾配，ヘッセ行列，凸性，最適性条件，ニュートン法)
3	非線形計画 2 (最急降下法，準ニュートン法，共役勾配法，信頼領域法)
4	非線形計画 3 (制約つき問題の最適性条件，KKT 条件，ペナルティ関数法，２次計画法，逐次 2 次計画法)
5	ゲーム理論 1 (種々のゲーム，標準形，純粋戦略，混合戦略，ナッシュ均衡)
6	ゲーム理論 2 (展開形ゲーム，繰り返しゲーム)
7	多目的最適化 (パレート最適性，重み付け法，ϵ 制約法，重み付きメトリック法)

制約付き非線形計画問題

制約付き非線形計画問題 (P1)

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) & \\
\text{s.t.} \quad & h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \ \ i = 1, \ldots, m & (m \text{ 個の等式制約条件}) \\
& g_j(\boldsymbol{x}) \leq 0, \ \ j = 1, \ldots, r & (r \text{ 個の不等式制約条件})
\end{aligned}
$$

仮定

$f(\boldsymbol{x})$, $h_i(\boldsymbol{x})$, $g_j(\boldsymbol{x})$ は **C^1 級**

- 制約なし問題に対する最適性の **1 次の必要条件** $\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ に対応する条件
  ⇒ **カルーシュ・キューン・タッカー (KKT) 条件** *(Karush-Kuhn-Tucker condition)
- **ラグランジュ関数** (Lagrangian function) を用いる

$$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i h_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{r} \mu_j g_j(\boldsymbol{x})$$

$\lambda_1, \ldots, \lambda_m, \mu_1, \ldots, \mu_r$: **ラグランジュ乗数** (Lagrange multiplier)

* 数十年前まではキューン・タッカー条件と呼ばれていたが，その後カルーシュが先に見つけていたことがわかり，現在はこの名前で呼ばれる

カルーシュ・キューン・タッカー条件 (KKT 条件)

制約付き非線形最適化問題に対する最適性の 1 次の必要条件

(P1) の局所的最適解 $\boldsymbol{x}^*$ において制約想定が成り立っているとする．このとき，以下を満たすラグランジュ乗数 λ_i $(1 \le i \le m)$，μ_j $(1 \le j \le r)$ が存在する．

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla h_i(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{r} \mu_j \nabla g_j(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0} \qquad \text{(A)}$$

$$h_i(\boldsymbol{x}^*) = 0,\ \ 1 \le i \le m \qquad \text{(B)}$$

$$g_j(\boldsymbol{x}^*) \le 0,\ \ 1 \le j \le r \qquad \text{(C)}$$

$$\mu_j g_j(\boldsymbol{x}^*) = 0,\ \ 1 \le j \le r \qquad \text{(D)}$$

$$\mu_j \ge 0 \quad 1 \le j \le r \qquad \text{(E)}$$

- (A)–(E) 式を**カルーシュ・キューン・タッカー条件 (KKT 条件)** という
- 制約想定は制約条件に関する条件で，いくつか種類がある (後ほど説明)
  例：$\nabla g_j(\boldsymbol{x})$ が 1 次独立 (1 次独立制約想定)
- (A) 式の左辺は $\nabla_x L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ と書ける (ラグランジュ関数 L の $\boldsymbol{x}$ に関する勾配)
- (B), (C) 式は $\boldsymbol{x}^*$ が (P1) の実行可能 (制約条件を満たす) 解という条件
  ⇒ 必要なのは当たり前
- (D) 式は**相補性条件** (complementary slackness condition) と呼ばれる
  ⇒ 線形計画問題でも出てきた

KKT 条件の意味

KKT 条件

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla h_i(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{r} \mu_j \nabla g_j(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0} \quad \text{(A)}$$

$$h_i(\boldsymbol{x}^*) = 0,\ \ 1 \le i \le m \quad \text{(B)}$$

$$g_j(\boldsymbol{x}^*) \le 0,\ \ 1 \le j \le r \quad \text{(C)}$$

$$\mu_j g_j(\boldsymbol{x}^*) = 0,\ \ 1 \le j \le r \quad \text{(D)}$$

$$\mu_j \ge 0,\ \ 1 \le j \le r \quad \text{(E)}$$

有効制約 (active constraint) と無効制約 (inactive constraint)

$\boldsymbol{x}$ は (P1) の実行可能解とし，不等式制約 $g_j(\boldsymbol{x}) \le 0$ $(1 \le j \le r)$ を考える．

有効制約： $\boldsymbol{x}$ において等号で成り立つ制約． $g_j(\boldsymbol{x}) = 0$

無効制約： $\boldsymbol{x}$ において不等号で成り立つ制約． $g_j(\boldsymbol{x}) < 0$

局所的最適解 $\boldsymbol{x}^*$ において無効な制約 $g_j(\boldsymbol{x}^*) < 0$

$\mu_j = 0$ とすれば，(D) は成り立つ．また，(A) の対応する項は消える

$\Downarrow$

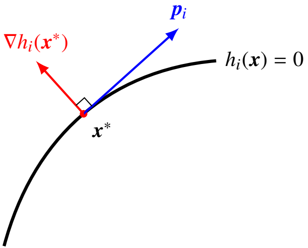
(P1) から無効制約を取り除いた問題を考えても同じ．

不等式制約はすべて有効制約と考えることができる．つまり $g_j(\boldsymbol{x}) = 0$ $(1 \le j \le r)$

KKT 条件の意味：図形的な説明 (その 1)

制約付き非線形計画問題 (P1)：等式制約のみの場合

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) \\
\text{s.t.} \quad & h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \; i = 1, \ldots, m
\end{aligned}
$$



- $h_i(\boldsymbol{x}) = 0$ の $\boldsymbol{x}^*$ における接線方向を $\boldsymbol{p}_i$ とすると，$\boldsymbol{x}^*$ は，$f(\boldsymbol{x})$ の $\boldsymbol{p}_i$ 方向での停留点
  $\Rightarrow \phi_i(\alpha) = f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{p}_i)$ とおくと，$\phi_i'(0) = 0$
  $\Rightarrow \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{p}_i = 0$ ($\nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ と $\boldsymbol{p}_i$ は直交)
- $\boldsymbol{x}^*$ における $h_i(\boldsymbol{x}) = 0$ の法線方向は $\nabla h_i(\boldsymbol{x}^*)$
  $\Rightarrow \nabla^\top h_i(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{p}_i = 0$ ($\nabla h_i(\boldsymbol{x}^*)$ と $\boldsymbol{p}_i$ は直交)
- $m = 1$ なら，$\nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ と $\nabla h_1(\boldsymbol{x}^*)$ は平行
  $\Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \lambda_1 \nabla h_1(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$

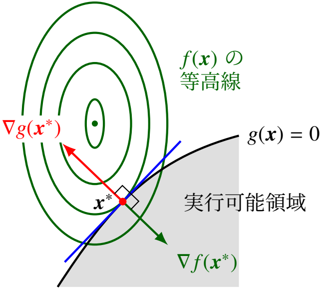
- $m \geq 2$ の場合，$\nabla h_i(\boldsymbol{x}^*)$ $(1 \leq i \leq m)$ が張る $\mathbb{R}^n$ の部分空間を V とする．すべての $\nabla h_i(\boldsymbol{x}^*)$ に直交するベクトル全体は V の直交補空間と呼ばれる．記号は $V^\perp$
- $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ は $V^\perp$ のすべてのベクトルと直交．$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) \in (V^\perp)^\perp = V$
- $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ は $\nabla h_i(\boldsymbol{x}^*)$ $(1 \leq i \leq m)$ の 1 次結合で表せる．$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla h_i(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$

$\phi_i'(\alpha)$ の計算：$\phi_i'(\alpha) = \dfrac{\partial}{\partial x_1} f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{p}_i) p_{i1} + \cdots + \dfrac{\partial}{\partial x_n} f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{p}_i) p_{in} = \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \boldsymbol{p}_i)\boldsymbol{p}_i$

KKT 条件の意味：図形的な説明 (その 2)

制約付き非線形計画問題 (P1)：(有効な) 不等式制約が 1 つの場合

$$\min \quad f(\boldsymbol{x})$$
$$\text{s.t.} \quad g(\boldsymbol{x}) \le 0$$



- $g(\boldsymbol{x}) = 0$ は有効制約なので，$\boldsymbol{x}^*$ を通る $f(\boldsymbol{x})$ の等高線は $g(\boldsymbol{x}) = 0$ と接する
- 実行可能領域の外側の方が $f(\boldsymbol{x})$ の値は小さい

  $\Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ は実行可能領域の内側方向
- 実行可能領域では $g(\boldsymbol{x}) \le 0$ なので，$g(\boldsymbol{x})$ の等高線の増加方向は，実行可能領域の外側方向

  $\Rightarrow \nabla g(\boldsymbol{x}^*)$ は実行可能領域の外側方向

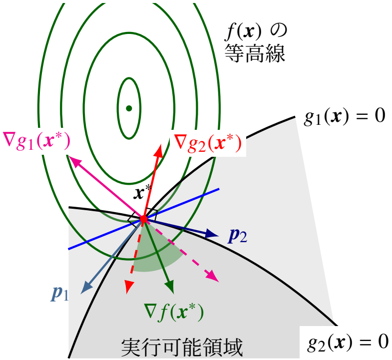
  $\Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ と $\nabla g(\boldsymbol{x}^*)$ の向きは逆

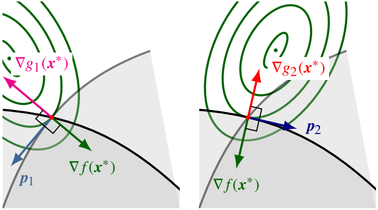
  $\Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \mu \nabla g(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}, \ \ \mu \ge 0$

KKT 条件の意味：図形的な説明 (その 3)

制約付き非線形計画問題 (P1)：(有効な) 不等式制約が 2 つの場合

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) \\
\text{s.t.} \quad & g_1(\boldsymbol{x}) \le 0 \\
& g_2(\boldsymbol{x}) \le 0
\end{aligned}
$$





$\nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ が $-\nabla g_1(\boldsymbol{x}^*)$ と $-\nabla g_2(\boldsymbol{x}^*)$ の間に収まる

$$\Downarrow$$

$$
\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mu_1(-\nabla g_1(\boldsymbol{x}^*)) + \mu_2(-\nabla g_2(\boldsymbol{x}^*))
$$
$$
\mu_1 \ge 0,\ \mu_2 \ge 0
$$

制約想定 (constraint qualification)

KKT 条件

(P1) の局所的最適解 $\boldsymbol{x}^*$ において**制約想定**が成り立っているとする．このとき，以下を満たすラグランジュ乗数 λ_i $(1 \le i \le m)$，μ_j $(1 \le j \le r)$ が存在する．

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla h_i(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{r} \mu_j \nabla g_j(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0} \tag{A}$$

$$h_i(\boldsymbol{x}^*) = 0, \ \ 1 \le i \le m \tag{B}$$

$$g_j(\boldsymbol{x}^*) \le 0, \ \ 1 \le j \le r \tag{C}$$

$$\mu_j g_j(\boldsymbol{x}^*) = 0, \ \ 1 \le j \le r \tag{D}$$

$$\mu_j \ge 0, \ \ 1 \le j \le r \tag{E}$$

$A(\boldsymbol{x}^*) = \{j \mid g_j(\boldsymbol{x}^*) = 0\}$: $\boldsymbol{x}^*$ における有効制約の番号の集合

1 次独立制約想定 (linear independence constraint qualification; LICQ)

$\nabla g_j(\boldsymbol{x}^*)$ $(j \in A(\boldsymbol{x}^*))$ が 1 次独立

マンガサリアン・フロモヴィッツ制約想定 (Mangasarian-Fromovitz constraint qualification; MFCQ)

$\nabla h_i(\boldsymbol{x}^*)$ $(1 \le i \le m)$ が 1 次独立，かつ，$\nabla^\top h_i(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} = 0$ $(1 \le i \le m)$ および $\nabla^\top g_j(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} < 0$ $(j \in A(\boldsymbol{x}^*))$ を同時に満たす $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^n$ が存在

スレーター条件 (Slater's condition; SC)

$g_j(\boldsymbol{x})$ $(1 \le j \le r)$ が凸関数，かつ，$g_j(\boldsymbol{x}^{\mathrm{int}}) < 0$ $(1 \le j \le r)$ を満たす $\boldsymbol{x}^{\mathrm{int}} \in \mathbb{R}^n$ が存在

制約付き非線形計画問題に対する 2 次の最適性条件

仮定

$f(\boldsymbol{x}),\ g_i(\boldsymbol{x}),\ h_j(\boldsymbol{x})$ は C^2 級

制約なし問題に対する条件

1 次の必要条件 $\boldsymbol{x}^*$ が局所的最適解なら，$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$

2 次の必要条件 $\boldsymbol{x}^*$ が局所的最適解なら，$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) \succeq O$

2 次の十分条件 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$ かつ $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) \succ O$ なら，$\boldsymbol{x}^*$ は局所的最適解

制約付き問題に対する 1 次の必要条件

(P1) 局所最適解 $\boldsymbol{x}^*$ が制約想定を満たすなら，KKT 条件が成り立つ．

制約付き問題に対する 2 次の必要条件 (second order necessary conditions)

(P1) の局所最適解 $\boldsymbol{x}^*$ において，**1 次独立制約想定**が成り立つとする．また，KKT 条件を満たすラグランジュ乗数を $\boldsymbol{\mu}^*$，$\boldsymbol{\lambda}^*$ とする．このとき，

$$\nabla^\top h_i(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} = 0 \quad (1 \le i \le m), \quad \nabla^\top g_j(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} = 0 \quad (j \in A(\boldsymbol{x}^*))$$

を満たす任意の $\boldsymbol{d}$ に対して

$$\boldsymbol{d}^\top \nabla^2_{xx} L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)\boldsymbol{d} \ge 0$$

が成り立つ (∇^2_{xx} は $\boldsymbol{x}$ に関するヘッセ行列).

制約付き非線形計画問題に対する 2 次の最適性条件 (続き)

制約付き問題に対する 2 次の十分条件 (second order sufficiency conditions)

(P1) の解 $\boldsymbol{x}^*$ はラグランジュ乗数 $\boldsymbol{\mu}^*$，$\boldsymbol{\lambda}^*$ において KKT 条件を満たすとする．また，

$$
\begin{aligned}
\nabla^\top h_i(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} &= 0 \quad (1 \le i \le m)\\
\nabla^\top g_j(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} &\le 0 \quad (j \in A(\boldsymbol{x}^*))\\
\nabla^\top g_j(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{d} &= 0 \quad (j \in A(\boldsymbol{x}^*)\text{ かつ }\lambda_j > 0)
\end{aligned}
$$

を満たす任意の $\boldsymbol{d} \neq \boldsymbol{0}$ に対して

$$\boldsymbol{d}^\top \nabla^2_{xx} L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)\boldsymbol{d} > 0$$

が成り立つとする．このとき，$\boldsymbol{x}^*$ は (P1) の局所的最適解である．

ざっくりいうと，

制約なし： 停留点 $\boldsymbol{x}^*$ の周りで $(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)^\top \nabla^2_{xx} f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)$ が正

制約あり： 停留点 $\boldsymbol{x}^*$ の周りで $(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)^\top \nabla^2_{xx} f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)$ が正．ただし，$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*$ は実行可能領域の内側

凸計画問題に対する KKT 条件の十分性

制約なし凸計画問題に対する十分条件

$f(\boldsymbol{x})$ は凸関数とする．また，$\boldsymbol{x}^*$ は停留点，すなわち以下を満たすとする．

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

このとき，$\boldsymbol{x}^*$ は制約なし非線形計画問題 (P0) の大域的最適解である．

制約付き凸計画問題に対する KKT 条件の十分性

$f(\boldsymbol{x}), g_j(\boldsymbol{x})$ は**凸関数**，$h_i(\boldsymbol{x})$ は **1 次関数**であるとする．また，$(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ は次の KKT 条件を満たすとする (**制約想定は考えなくてよい**).

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla h_i(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{j=1}^{r} \mu_j \nabla g_j(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0} \qquad \text{(A)}$$

$$h_i(\boldsymbol{x}^*) = 0, \ 1 \le i \le m \qquad \text{(B)}$$

$$g_j(\boldsymbol{x}^*) \le 0, \ 1 \le j \le r \qquad \text{(C)}$$

$$\mu_j g_j(\boldsymbol{x}^*) = 0, \ 1 \le j \le r \qquad \text{(D)}$$

$$\mu_j \ge 0, \ 1 \le j \le r \qquad \text{(E)}$$

このとき，$\boldsymbol{x}^*$ は制約付き非線形計画問題 (P1) の大域的最適解である．

制約付き非線形計画問題に対するラグランジュの未定乗数法

制約付き非線形計画問題 (P1)

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) \\
\text{s.t.} \quad & h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \ \ i = 1, \dots, m \\
& g_j(\boldsymbol{x}) \leq 0, \ \ j = 1, \dots, r
\end{aligned}
$$

ラグランジュの未定乗数法 (method of Lagrange multiplier)

- KKT 条件を用いて局所的最適解を求める方法
- KKT 条件を満たす解を求める
- $f(\boldsymbol{x})$, $g_j(\boldsymbol{x})$ が凸関数，$h_i(\boldsymbol{x})$ が 1 次関数なら，**大域的最適解**が求まる

ラグランジュの未定乗数法の例

例題

$$
\begin{aligned}
\min\ & 2x_1^2 + 4x_2^2 + 3x_3^2 + 2x_1x_2 \\
\text{s.t.}\ & 2x_1 + x_2 + 3x_3 = 5 \\
& x_1 + x_2 + 2x_3 = 3
\end{aligned}
$$

$$\Downarrow$$

$$
\begin{aligned}
\min\ & f(\boldsymbol{x}) \\
\text{s.t.}\ & h_1(\boldsymbol{x}) = 0 \\
& h_2(\boldsymbol{x}) = 0
\end{aligned}
\qquad
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}) &= 2x_1^2 + 4x_2^2 + 3x_3^2 + 2x_1x_2 \\
h_1(\boldsymbol{x}) &= 2x_1 + x_2 + 3x_3 - 5 \\
h_2(\boldsymbol{x}) &= x_1 + x_2 + 2x_3 - 3
\end{aligned}
$$

$f(\boldsymbol{x})$ が凸であることの確認

ヘッセ行列 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ を計算する．

$$
\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix}
\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} f(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} f(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_3} f(\boldsymbol{x}) \\
\frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_1} f(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} f(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_3} f(\boldsymbol{x}) \\
\frac{\partial^2}{\partial x_3 \partial x_1} f(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_3 \partial x_2} f(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} f(\boldsymbol{x})
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 2 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}
$$

固有値は 6，$6 \pm 2\sqrt{2}$ であり，いずれも正なので，正定行列．したがって，$f(\boldsymbol{x})$ は凸関数 (第 2 回 p. 8)．また，$h_1(\boldsymbol{x})$，$h_2(\boldsymbol{x})$ はいずれも $\boldsymbol{x}$ の 1 次関数だから，ラグランジュの未定乗数法により大域的最適解が求まる．

ラグランジュの未定乗数法の例 (続き)

KKT 条件

ラグランジュ関数

$$\begin{aligned} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) &= f(\boldsymbol{x}) + \lambda_1 h_1(\boldsymbol{x}) + \lambda_2 h_2(\boldsymbol{x}) \\ &= 2x_1^2 + 4x_2^2 + 3x_3^2 + 2x_1 x_2 + \lambda_1(2x_1 + x_2 + 3x_3 - 5) + \lambda_2(x_1 + x_2 + 2x_3 - 3) \end{aligned}$$

を用いて,

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \\ \frac{\partial}{\partial x_2} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \\ \frac{\partial}{\partial x_3} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4x_1 + 2x_2 + 2\lambda_1 + \lambda_2 \\ 8x_2 + 2x_1 + \lambda_1 + \lambda_2 \\ 6x_3 + 3\lambda_1 + 2\lambda_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{0}$$

$$\begin{aligned} h_1(\boldsymbol{x}) &= 2x_1 + x_2 + 3x_3 - 5 = 0 \\ h_2(\boldsymbol{x}) &= x_1 + x_2 + 2x_3 - 3 = 0 \end{aligned}$$

KKT 条件を満たす解が大域的最適解．以下の連立方程式を解けばよい．

$$\begin{aligned} 4x_1 + 2x_2 \qquad + 2\lambda_1 + \lambda_2 &= 0 \\ 2x_1 + 8x_2 \qquad + \lambda_1 + \lambda_2 &= 0 \\ + 6x_3 + 3\lambda_1 + 2\lambda_2 &= 0 \\ 2x_1 + x_2 + 3x_3 &= 5 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 &= 3 \end{aligned}$$

これを解いて，大域的最適解 $(x_1, x_2, x_3) = (1, 0, 1)$ $((\lambda_1, \lambda_2) = (1, 0))$，最適値 $f(x_1, x_2, x_3) = 5$ が求まる．

ラグランジュ緩和問題

- 線形計画問題と同様，双対問題を考えることができる
- まずラグランジュ緩和問題を定義

制約付き非線形計画問題 (P1)

$$\begin{aligned} \text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} \quad & h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \ \ i = 1, \ldots, m \\ & g_j(\boldsymbol{x}) \leq 0, \ \ j = 1, \ldots, r \end{aligned}$$

ラグランジュ関数

$$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i h_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{r} \mu_j g_j(\boldsymbol{x})$$

ラグランジュ緩和問題 (Lagrangian relaxation problem)

$$\begin{aligned} \text{inf} \quad & L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

- ラグランジュ乗数 $\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}$ は固定して考える
- 最適解を持たない場合も考慮するため，min の代わりに inf を用いる

ラグランジュ緩和問題の性質

ラグランジュ緩和問題 (Lagrangian relaxation problem)

$$\begin{aligned} \text{inf} \quad & L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

$L_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \inf_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$, (P1) の実行可能解を $\boldsymbol{x}$ とすると，$\boldsymbol{\mu} \geq \boldsymbol{0}$ のとき $L_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \leq f(\boldsymbol{x})$ が成り立つ．

$$\begin{aligned} L_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) &= \inf_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ &\leq L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ &= f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i h_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{r} \mu_j g_j(\boldsymbol{x}) \\ &\leq f(\boldsymbol{x}) \end{aligned}$$

(最後の不等号は $h_i(\boldsymbol{x}) = 0$ および $g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0, \mu_j \geq 0$ より)

- ラグランジュ緩和問題は (P1) の目的関数の下界値を与える
- より目的関数値に近い下界値を求めるには，$\boldsymbol{\lambda}$ および $\boldsymbol{\mu} \geq \boldsymbol{0}$ をうまく選ぶ必要がある
  $\Rightarrow$ ラグランジュ双対問題

ラグランジュ双対問題と主問題

ラグランジュ双対問題 (Lagrangian dual problem) (LD)

$$\sup \quad L_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \inf_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$$

$$\text{s.t.} \quad \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m, \quad \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^r_{\geq 0}$$

($\boldsymbol{\mu}$ は r 次元非負ベクトルの意味)

(P1) と等価な主問題 (P2)

$$\inf \quad L_{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}) = \sup_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$$

$$\text{s.t.} \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$$

たとえば $g_1(\boldsymbol{x}) > 0$ なら，λ_1 を大きくすれば $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda})$ はいくらでも大きくなる．$h_i(\boldsymbol{x})$ についても同様．したがって，L_{P} は以下で表すことができる．

$$L_{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} f(\boldsymbol{x}) & (\boldsymbol{x} \text{ は (P1) の実行可能解}) \\ +\infty & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

よって，(P2) と (P1) は実質的に等価

- ラグランジュ双対問題：$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ を $\boldsymbol{x}$ に関して最小化 $\Rightarrow$ $\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}$ に関して最大化
- **等価な主問題**：$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ を $\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}$ に関して最大化 $\Rightarrow$ $\boldsymbol{x}$ に関して最小化

弱双対定理

主問題 (P1)

$$\begin{aligned} \text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} \quad & h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \ \ i = 1, \ldots, m \\ & g_j(\boldsymbol{x}) \leq 0, \ \ j = 1, \ldots, r \end{aligned}$$

等価な主問題 (P2)

$$\begin{aligned} \text{inf} \quad & L_{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x}) = \sup_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

ラグランジュ双対問題 (LD)

$$\begin{aligned} \text{sup} \quad & L_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \inf_{\boldsymbol{x}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m, \quad \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^r_{\geq 0} \end{aligned}$$

弱双対定理 (weak duality theorem)

任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ ((P2) の実行可能解)，および任意の $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$，$\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^r_{\geq 0}$ ((LD) の実行可能解) について，$L_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \leq L_{\mathrm{P}}(\boldsymbol{x})$ が成り立つ．さらに，もし $\boldsymbol{x}$ が (P1) の実行可能解ならば，$L_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \leq f(\boldsymbol{x})$ が成り立つ．

強双対定理

双対ギャップ (duality gap)

- 非線形計画問題の場合，**強双対定理**は一般には**成り立たない**
- 主問題 (P2) とラグランジュ双対問題 (LD) の最適目的関数値の差 ⇒ **双対ギャップ** (duality gap)

ラグランジュ関数の鞍点 (saddle point)

任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$, $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^r_{\geq 0}$ に対して以下を満たす $\bar{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$, $\bar{\boldsymbol{\lambda}} \in \mathbb{R}^m$, $\bar{\boldsymbol{\mu}} \in \mathbb{R}^r_{\geq 0}$ の組 $(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\boldsymbol{\mu}})$ を，$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ の**鞍点** (saddle point) という．

$$L(\bar{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \leq L(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}) \leq L(\boldsymbol{x}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\boldsymbol{\mu}})$$

鞍点定理 (saddle point theorem)

$(\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\boldsymbol{\mu}})$ がラグランジュ関数 $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ の鞍点となるための必要十分条件は，双対ギャップが 0 となることである．

強双対定理 (strong duality theorem)

(P1) において，$f(\boldsymbol{x})$, $g_j(\boldsymbol{x})$ $(1 \leq j \leq r)$ は**凸関数**であるとする．また，h_i $(1 \leq i \leq m)$ は **1 次関数**であるとする．このとき，$\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}$ が $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ の鞍点となるための必要十分条件は，**KKT 条件を満たす** $\bar{\boldsymbol{x}}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\boldsymbol{\mu}}$ が存在することである．

双対ギャップが 0 となる問題の例：(線形制約付き) 凸 2 次計画問題

制約付き非線形計画問題の解法

制約付き非線形計画問題 (P1)

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) \\
\text{s.t.} \quad & h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \ \ i = 1, \dots, m \\
& g_j(\boldsymbol{x}) \leq 0, \ \ j = 1, \dots, r
\end{aligned}
$$

- 制約付き非線形計画問題の解法をいくつか紹介
- 制約なし問題に変換して解く方法
  - **ペナルティ関数法**
  - **バリア関数法**
- 凸 2 次計画問題で近似
  - **逐次 2 次計画法**

ペナルティ関数法

制約付き非線形計画問題 (P1)

$$\begin{aligned} \text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} \quad & h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \ \ i = 1, \ldots, m \\ & g_j(\boldsymbol{x}) \le 0, \ \ j = 1, \ldots, r \end{aligned}$$

ペナルティ関数 (penalty function)

$$P(\boldsymbol{x}) = 0 \qquad (\boldsymbol{x} \text{ が (P1) の実行可能解のとき})$$

$$P(\boldsymbol{x}) > 0 \qquad (\text{それ以外})$$

ペナルティ問題 (penalty problem) (PP)

$$\begin{aligned} \text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) + \sigma P(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

- パラメータ $\sigma \ge 0$ が十分**大きい**とき，ペナルティ問題 (PP) の最適解はもとの問題 (P1) の最適解に近い (と期待される)
- ラグランジュ関数に近いが，ラグランジュ関数は実行可能解 $\boldsymbol{x}$ に対して
  $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \le f(\boldsymbol{x})$
  無効制約 $g_j(\boldsymbol{x}) < 0$ に対するラグランジュ乗数 μ_j が正のとき，等号が成り立たない

ペナルティ関数法 (続き)

ペナルティ関数法

1. **(初期化)** 適当に初期解 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ および初期パラメータ $\sigma^{(0)}$ を決める．$k := 0$ とする
2. **(終了判定)** 終了条件を満たしているなら $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を解として出力し終了
3. **(解の更新)** 適当な方法でパラメータを $\sigma^{(k)}$ としたペナルティ問題 (PP) の解を求め，$\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ とする
4. **(パラメータの更新)** $\sigma^{(k+1)}$ を $\sigma^{(k+1)} > \sigma^{(k)}$ を満たすよう選ぶ
5. **(次の反復へ)** k を 1 増やして 2 へ

ペナルティ関数の種類

- 1 次 $P(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} |h_i(\boldsymbol{x})| + \sum_{j=1}^{r} \max\{g_j(\boldsymbol{x}), 0\}$
- 2 次 $P(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} h_i^2(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{r} \left[\max\{g_j(\boldsymbol{x}), 0\}\right]^2$
- etc.

バリア関数法

制約付き非線形計画問題 (P1')

$$\begin{aligned} \text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} \quad & g_j(\boldsymbol{x}) \le 0, j = 1, \dots, r \end{aligned}$$

バリア関数 (barrier function)

$$B(\boldsymbol{x}) \ge 0 \qquad (g_j(\boldsymbol{x}) < 0 \ (1 \le j \le r) \text{ のとき})$$

$$B(\boldsymbol{x}) \to \infty \qquad (\lim_{\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}_0} \max_{1 \le j \le r} g_j(\boldsymbol{x}) \to 0 \text{ のとき})$$

バリア関数は，$\boldsymbol{x}$ が実行可能領域の境界に近づくと $+\infty$ に発散する

バリア問題 (barrier problem) (PB)

$$\begin{aligned} \text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) + \rho B(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

パラメータ $\rho \ge 0$ が十分**小さい**とき，バリア問題 (PB) の最適解はもとの問題 (P1) の最適解に近い (と期待される)

バリア関数法 (続き)

バリア関数法

1. **(初期化)** 適当に初期解 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ および初期パラメータ $\rho^{(0)}$ を決める． $k := 0$ とする
2. **(終了判定)** 終了条件を満たしているなら $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を解として出力し終了
3. **(解の更新)** 適当な方法でパラメータを $\rho^{(k)}$ としたバリア問題 (PB) の解を求め， $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ とする
4. **(パラメータの更新)** $\rho^{(k+1)}$ を $\rho^{(k+1)} < \rho^{(k)}$ を満たすよう選ぶ
5. **(次の反復へ)** k を 1 増やして 2 へ

バリア関数の種類

- 逆数 $B(\boldsymbol{x}) = \displaystyle\sum_{j=1}^{r} \frac{1}{g_j(\boldsymbol{x})}$
- 対数 $B(\boldsymbol{x}) = -\displaystyle\sum_{j=1}^{r} \log\bigl(-g_j(\boldsymbol{x})\bigr)$
- etc.

逐次 2 次計画法 (sequential quadratic programming method)

非線形計画問題 (P1)

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & f(\boldsymbol{x}) \\
\text{s.t.} \quad & h_i(\boldsymbol{x}) = 0, \ \ i = 1, \ldots, m \\
& g_j(\boldsymbol{x}) \le 0, \ \ j = 1, \ldots, r
\end{aligned}
$$

逐次 2 次計画法の基本的な考え方

- (準) ニュートン法と同様，目的関数を 2 次近似
$$m_k(\boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} + \frac{1}{2}\boldsymbol{d}^\top B^{(k)}\boldsymbol{d}$$
- $B^{(k)}$ はラグランジュ関数のヘッセ行列 $\nabla^2_{xx}L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ (の近似)
- 制約条件は 1 次近似
$$h_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^\top h_i(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} = 0$$
$$g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^\top g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} \le 0$$
- この問題を解いて探索方向 $\boldsymbol{d}^{(k)}$ を決定

2 次計画問題による近似

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & \frac{1}{2}\boldsymbol{d}^\top \nabla^2_{xx}L(\boldsymbol{x}^{(k)}, \lambda^{(k)}, \mu^{(k)})\boldsymbol{d} + \nabla^\top f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} \\
\text{s.t.} \quad & h_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^\top h_i(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} = 0, \qquad i = 1, \ldots, m \\
& g_j(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla^\top g_j(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} \le 0, \qquad j = 1, \ldots, r
\end{aligned}
$$

Python の SciPy を使って非線形計画問題の解を求めてみる

https://colab.research.google.com/drive/1WrLzz1Ss7gxn9kxsQjuQRZLSiXhhN6g8