① 不等式制約がある場合 KKT条件とつかう → 有効制約法

$$\min_{x} \quad f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x - c^T x \qquad Q \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ は正定値対称} \qquad c \in \mathbb{R}^n$$

$$\text{s.t} \quad g_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j - b_i \le 0 \quad \text{for } i = 1 \sim m.$$

$$A \in \mathbb{R}^{m\times n}.$$

に限ったものとする.

(1) 上の最適化問題に対する KKT条件を書け

① $\nabla f(x)$ を計算. $\qquad (\nabla g_i)_k = A_{ik}$

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} x_i Q_{ij} x_j - \sum_j c_j x_j$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \frac{1}{2} \sum_j (Q_{kj} x_j + x_j Q_{jk}) - c_k$$

$$\boxed{\therefore \nabla f = Qx - c.}$$

② $$(\nabla f)_k + \sum_{i=1}^{m} y_i A_{ik} = 0 \iff Qx - c + A^T y = 0.$$

↑ Lagrange 乗数

$$\left(\sum_{i=}\right) y_i \left(\sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j - b_i\right) = 0, \quad y_i \ge 0, \qquad g_i \le 0.$$

$$\begin{cases} A^T y + Qx - c = 0 & \text{— ①} \\ y \ge 0 & \text{— ②} \\ Ax \le b & \text{— ③} \\ y^T (Ax - b) = 0. & \text{— ④} \end{cases}$$

ある実行可能解 $\hat{x}$ があったとしよう。

このとき $\sum_{j=1}^{n} A_{ij}\hat{x}_j = b_i$ をみたす i の集合を I とおく

$$\left(\begin{array}{l} \text{i.e.}\ i \in I \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{n} A_{ij}\hat{x}_j = b_i \\ \quad\ \ i \notin I \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{n} A_{ij}\hat{x}_j < b_i \end{array} \right).$$

KKT

④より $i \notin I$ ならば $y_i = 0$ なので、KKT ①は

$$0 = (A^T y + Q\hat{x} - c)_i = \sum_{j \in I} A^T_{ij} y_j + \sum_{j=1}^{n} Q_{ij}\hat{x}_j - c_i \quad —— ⑥$$

y のうち $y_j \neq 0$ だけをならべたものを $\hat{y}$ とおくと

$$⑥ \Leftrightarrow \quad A\hat{y} + Q\hat{x} = c \quad —— ⑦$$

一方、b_i のうち $i \in I$ だけをならべたベクトルを $\hat{b}$ とすると

$$A\hat{x} = \hat{b} \quad —— ⑧$$

⑦⑧をならべて

$$\begin{pmatrix} Q & A^t \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ \hat{b} \end{pmatrix}.$$

有効制約法 ということ。

⓪ $x^{(0)} \in S$ を定め, $k=0$, $I^{(0)}$ とおいておく

feasible set

有効な制約の index.

①

$$\begin{pmatrix} Q & A \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x}^{(k)} \\ \hat{y}^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ \hat{b}^{(k)} \end{pmatrix}$$ をとく. $\hat{x}^{(k)} \in S$ なら ③へ.

そうでなければ ②へ
($\hat{x}^{(k)} \notin S$ なら)

② t^* を $\sum_{j=1} A^T_{ij} \left(x_j^{(k)} + t (\hat{x}_j^{(k)} - x_j^{(k)}) \right) \le b_i$ をすべての i に対して満たす

t の最大値にえらぶ (すべての制約にイハンしない範囲で $x^{(k)}$ を $\hat{x}^{(k)}$ に近づける).

$I^{(k)}$ を更新.

③ $\hat{y}^{(k)} \ge 0$ なら $x^{(k)}$ が さいてきかい. (KKT条件をすべてみたす)

$\hat{y}^{(k)} \not\ge 0$ なら $\hat{y}^{(k)}$ の 1番小さい成分の index を $I^{(k)}$ からのぞき, ①に帰る

ペナルティ法

$$\nabla g = \begin{cases} 0 & \text{if } g=0 \\ \cdots \end{cases}$$

$\min_x f(x)$ subject to $g_i(x) \le 0$ for $i=1 \sim m$

→ $\min_x \underbrace{f(x) + \rho \sum_{i=1}^{m} \max(0, |g_i(x)|^2)}_{F}$ を最小化する

制約条件にイハンしたら目的かんすうの

値が大きい → かってに制約をみたす。

(注) ρ はステップ毎に大きくしていくとよい

n：設計へんすうへんすう $\rho^{(0)}$

⓪ $c_A \in (0, 1)$, $c_W \in (c_A, 1)$, $x^{(0)}$ $k=0$ とする

① $f(x^{(k)})$ を計算 $\begin{pmatrix} K \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P \end{pmatrix}$ をとく u, P

$\nabla f(x^{(k)})$ をけいさん

" $-u^T \frac{\partial K}{\partial a_i} u$ → ∇F をけいさん

② アルミホ

" $F(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) \le F(x^{(k)}) + c_A \alpha \nabla F(x^{(k)}) \cdot d^{(k)}$

をみたすまで $\alpha^{(k)} \leftarrow \alpha^{(k)}/(1+\varepsilon)$ とする

③ Wolfe

$\nabla f(x^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)})$ をけいさん

$\nabla f(x^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)}) \cdot d^{(k)} \ge c_W \nabla f(x^{(k)}) \cdot d^{(k)}$

なら次へ. そうでなければ $\alpha^{(k)} \leftarrow \alpha^{(k)}/(1-\varepsilon)$ として アルミホへ.

④ $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)}$