

システム工学第5回 (制約あり非線形計画法)

長江 剛志

東北大学大学院工学研究科
技術社会システム専攻

(nagae@m.tohoku.ac.jp)

January 23, 2017 (ver1.0)

制約つき非線形計画問題

等式制約のみの場合

不等式制約を含む場合

ペナルティ関数法

逐次二次計画法

定番アルゴリズムのおさらい

制約つき非線形最適化問題

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

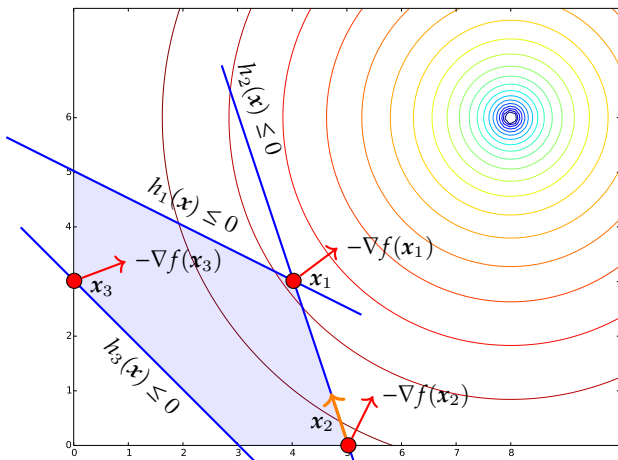
$$\text{s.t. } g_m(\mathbf{x}) = 0, \quad m = 1, 2, \dots, M$$

$$h_l(\mathbf{x}) \leq 0, \quad l = 1, 2, \dots, L$$

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^\top$$

$$f, g_m, h_l : \mathcal{R}^N \rightarrow \mathcal{R}$$

$$(m = 1, \dots, M) \quad (l = 1, \dots, L)$$



目次

制約つき非線形計画問題

等式制約のみの場合

不等式制約を含む場合

ペナルティ関数法

逐次二次計画法

定番アルゴリズムのおさらい

等式制約のみの場合 (1)

等式制約のみの問題:

$$\begin{array}{ll} \min_x f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^\top \\ \text{s.t. } g_m(\mathbf{x}) = 0, & m = 1, 2, \dots, M \end{array} \quad \begin{array}{l} f, g_m : \mathcal{R}^N \rightarrow \mathcal{R} \\ (m = 1, \dots, M) \end{array}$$

最適性条件

以下の **Lagrange 関数 (Lagrangian)** を定義する:

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}) \left(= f(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M y_m g_m(\mathbf{x}) \right)$$

ここで, $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_M)^\top$ は **Lagrange 乗数** と呼ばれる.

等式制約のみの場合 (2)

\mathbf{x}^* が最適解ならば、以下を満足する $\mathbf{y}^* = (y_1^*, \dots, y_M^*)^\top$ が存在する：

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) &= \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{m=1}^M y_m^* \nabla g_m(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \\ \nabla_{\mathbf{y}} L(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) &= \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}\end{aligned}$$

最適性条件の例

$$\begin{aligned}\min_{\mathbf{x}} f(x_1, x_2) &= 2x_1^2 + 3x_2^2 \\ \text{s.t. } x_1 + x_2 &= 1\end{aligned}$$

等式制約のみの場合 (3)

$g(\mathbf{x}) = x_1 + x_2 - 1$ として, Lagrange 関数を以下のように定義:

$$L(x_1, x_2, y) = 2x_1^2 + 3x_2^2 + y \{x_1 + x_2 - 1\}$$

最適性条件は,

$$\nabla_{\mathbf{x}} L(x_1, x_2, y) = \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) + y \nabla_{\mathbf{x}} g(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 4x_1 \\ 6x_2 \end{bmatrix} + y \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

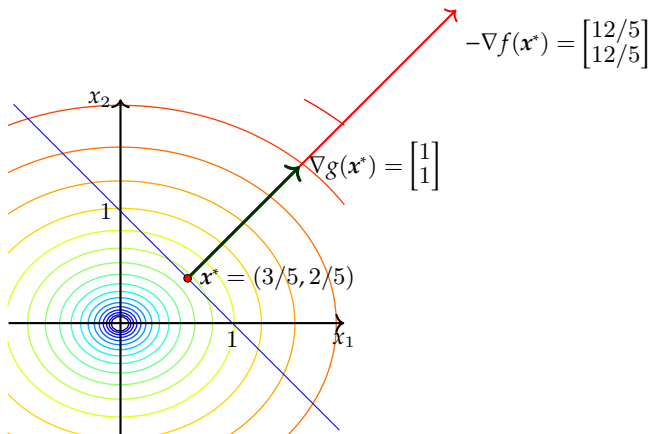
$$\nabla_y L(x_1, x_2, y) = g(\mathbf{x}) = x_1 + x_2 - 1 = 0$$

これを連立させて解けば, $x_1^* = 3/5$, $x_2^* = 2/5$, $y^* = -12/5$ を得る.

このとき, 以下が成立する:

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = \begin{bmatrix} 4x_1^* \\ 6x_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -12/5 \\ -12/5 \end{bmatrix} = y^* \nabla g(\mathbf{x}^*)$$

等式制約のみの場合 (4)



線形等式制約条件つき 2 次凸計画問題 (1)

線形等式制約 つき 2 次凸 計画問題:

$$\begin{aligned}\min_x f(x) &:= \frac{1}{2} x^\top Q x + c^\top x \\ \text{s.t. } Ax - b &= 0, \\ x &\text{ is free.}\end{aligned}$$

ここで, $Q \in \mathcal{R}^{N \times N}$ は正定値対称行列, $A \in \mathcal{R}^{M \times N}$ は階数 M の行列, $b \in \mathcal{R}^M$ は定数列ベクトル.

Lagrange 関数 を

$$L(x, y) = \frac{1}{2} x^\top Q x + c^\top x + y^\top (Ax - b)$$

線形等式制約条件つき 2 次凸計画問題 (2)

とすれば、最適性条件は以下の **連立方程式** となる：

$$\begin{aligned}\nabla_x L(x, y) &= Qx + c + A^\top y = 0, \\ \nabla_y L(x, y) &= Ax - b = 0\end{aligned}$$

これを連立させて解けば、最適解が以下のように解析的に求められる：

$$\begin{aligned}x^* &= -\left(I - Q^{-1}A^\top \Sigma^{-1}A\right)Q^{-1}c + Q^{-1}A^\top \Sigma^{-1}b \\ y^* &= \Sigma^{-1}\left(b + AQ^{-1}c\right)\end{aligned}$$

ここで、 $\Sigma \in M \times M$ 正則な対称行列であり、以下の式で定義される

$$\Sigma := AQ^{-1}A^\top$$

目次

制約つき非線形計画問題

等式制約のみの場合

不等式制約を含む場合

ペナルティ関数法

逐次二次計画法

定番アルゴリズムのおさらい

不等式制約のみの場合 (1)

$$\begin{array}{ll} \min_x f(x) & \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^\top \\ \text{s.t. } h_l(\mathbf{x}) \leq 0, \quad l = 1, 2, \dots, L & f, h_l : \mathcal{R}^N \rightarrow \mathcal{R} \\ & (l = 1, \dots, L) \end{array}$$

最適性条件

等式制約のみの場合と同様に Lagrange 関数を定義する：

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{z}) := f(\mathbf{x}) + \mathbf{z}^\top \mathbf{h}(\mathbf{x}) \left(= f(\mathbf{x}) + \sum_{l=1}^L z_l h_l(\mathbf{x}) \right)$$

ここで、 $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_L)^\top$ は Lagrange 乗数。

不等式制約のみの場合 (2)

\mathbf{x}^* が最適解であるなら，以下を満足する $\mathbf{z}^* = (z_1^*, \dots, z_L^*)^\top$ が存在する：

$$\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}^*, \mathbf{z}^*) = \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{l=1}^L z_l^* \nabla h_l(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \quad (1)$$

$$\nabla_{\mathbf{z}} L(\mathbf{x}^*, \mathbf{z}^*) = \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \leq \mathbf{0} \quad (2)$$

$$z_l^* \geq 0 \quad (l = 1, \dots, L) \quad (3)$$

$$z_l^* h_l(\mathbf{x}^*) = 0 \quad (l = 1, \dots, L) \quad (4)$$

(1)～(4) は **KKT (Karush-Kuhn-Tucker)** 条件と呼ばれる.

不等式制約のみの場合 (3)

最適性条件の例

$$\begin{aligned}\min_x f(x_1, x_2) &= \frac{1}{2} \left\{ (x_1 - 8)^2 + (x_2 - 6)^2 \right\} \\ \text{s.t. } 3x_1 + x_2 &\leq 15 \\ x_1 + 2x_2 &\leq 10 \\ x_1 + x_2 &\geq 3 \\ x_1 \geq 0, \quad x_2 &\geq 0\end{aligned}$$

不等式制約のみの場合 (4)

$h_1(x) = 3x_1 + x_2 - 15$, $h_2(x) = x_1 + 2x_2 - 10$, $h_3(x) = 3 - x_1 - x_2$,
 $h_4(x) = -x_1$, $h_5(x) = -x_2$ とし, **Lagrange 関数** を以下のように定義する:

$$\begin{aligned} L(x_1, x_2, z_1, z_2, z_3, z_4, z_5) = & \frac{1}{2} \left\{ (x_1 - 8)^2 + (x_2 - 6)^2 \right\} \\ & + z_1(3x_1 + x_2 - 15) + z_2(x_1 + 2x_2 - 10) \\ & + z_3(3 - x_1 - x_2) - z_4x_1 - z_5x_2 \end{aligned}$$

不等式制約のみの場合 (5)

このとき, **KKT 条件** は以下の式で表される:

$$\begin{bmatrix} x_1 - 8 \\ x_2 - 6 \end{bmatrix} + z_1 \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix} + z_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} + z_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} + z_4 \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} + z_5 \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$3x_1 + x_2 - 15 \leq 0, \quad z_1 \geq 0, \quad z_1(3x_1 + x_2 - 15) = 0,$$

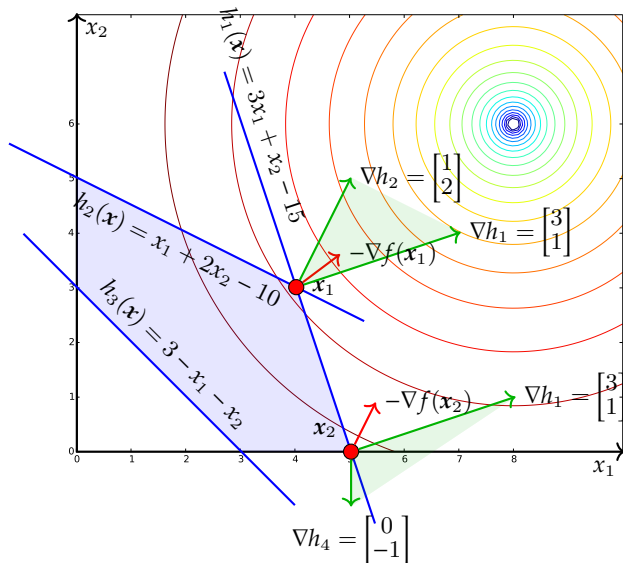
$$x_1 + 2x_2 - 10 \leq 0, \quad z_2 \geq 0, \quad z_2(x_1 + 2x_2 - 10) = 0,$$

$$3 - x_1 - x_2 \leq 0, \quad z_3 \geq 0, \quad z_3(3 - x_1 - x_2) = 0,$$

$$-x_1 \leq 0, \quad z_4 \geq 0, \quad z_4 x_1 = 0,$$

$$-x_2 \leq 0, \quad z_5 \geq 0, \quad z_5 x_2 = 0$$

不等式制約のみの場合 (6)



一般の制約付きの問題に対する最適性条件 (1)

$$\begin{array}{ll} \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^\top \\ \text{s.t. } g_m(\mathbf{x}) = 0, \quad m = 1, 2, \dots, M & f, g_m, h_l : \mathcal{R}^N \rightarrow \mathcal{R} \\ h_l(\mathbf{x}) \leq 0, \quad l = 1, 2, \dots, L & (m = 1, \dots, M) \quad (l = 1, \dots, L) \end{array}$$

最適性条件

Lagrangian を以下のように定義:

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) &:= f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{z}^\top \mathbf{h}(\mathbf{x}) \\ &= f(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M y_m g_m(\mathbf{x}) + \sum_{l=1}^L z_l h_l(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

一般の制約付きの問題に対する最適性条件 (2)

\mathbf{x}^* が最適解ならば、以下の **KKT 条件** を満足する $\mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*$ が存在する：

$$\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*) = \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{m=1}^M \mathbf{y}_m^* \nabla g_m(\mathbf{x}^*) + \sum_{l=1}^L \mathbf{z}_l^* \nabla h_l(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \quad (5)$$

$$\nabla_{\mathbf{y}} L(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*) = \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \quad (6)$$

$$\nabla_{\mathbf{z}} L(\mathbf{x}^*, \mathbf{z}^*) = \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \leq \mathbf{0} \quad (7)$$

$$\mathbf{z}_l^* \geq 0 \quad (l = 1, \dots, L) \quad (8)$$

$$\mathbf{z}_l^* h_l(\mathbf{x}^*) = 0 \quad (l = 1, \dots, L) \quad (9)$$

目次

制約つき非線形計画問題

等式制約のみの場合

不等式制約を含む場合

ペナルティ関数法

逐次二次計画法

定番アルゴリズムのおさらい

内点ペナルティ関数法 (バリア関数法) (1)

不等式制約つき最適化問題：

$$\min_x \{f(x) : h_l(x) \leq 0, \quad l = 1, \dots, L\}$$

バリア関数法は, 制約条件 $h(x) \leq 0$ に対応した **バリア関数** $B[h(x)] : \mathcal{R}^N \rightarrow \mathcal{R}^L \rightarrow \mathcal{R}$ を導入することで, 以下の制約なし最適化問題:

$$\min_x f(x) + \mu B[h(x)]$$

に帰着させる方法.

ここで, $\mu > 0$ は **バリア・パラメータ** と呼ばれる定数.

内点ペナルティ関数法 (バリア関数法) (2)

バリア関数は「 $h(x) < 0$ ならば有界で, $h_l(x) = 0$ では無限大となる」性質を備える必要がある。代表的なものとしては,

- ▶ $B(x) = -\sum_{l=1}^L \frac{1}{h_l(x)}$

- ▶ $B(x) = \sum_{l=1}^L \frac{1}{h_l(x)^2}$

- ▶ $B(x) = -\sum_{l=1}^L \ln(-h_l(x))$ (ログバリア型)

内点ペナルティ法のアルゴリズム

内点ペナルティ関数法では、バリア・パラメータ μ が大きすぎると、無制約化された最適化問題の解はもとの最適化問題の解に一致しない。そこで、これを徐々に 0 に近づけながら無制約最適化問題を解いていく。その具体的な手続きは以下の通り：

Step 0 適当な実行可能解 $x^{(0)}$ とバリア・パラメータ $\mu^{(1)} > 0$ を与える。 $k \leftarrow 1$ とする。

Step 1 $x^{(k-1)}$ を初期解として、無制約化された最適化問題を解き、その解を $x^{(k)}$ とする

$$\min_x f(x) + \mu^{(k)} B(x)$$

Step 2 $\mu^{(k)}$ が十分に小さければ $x^{(k)}$ を最適解として終了

Step 3 $0 < \mu^{(k+1)} < \mu^{(k)}$ となるようなバリア・パラメータ $\mu^{(k+1)}$ を選ぶ。 $k \leftarrow k + 1$ として Step 1 へ。

ペナルティ関数法の特徴

長所

- ▶ アルゴリズムが簡単.
- ▶ いつ手続きを停止させても, 初期解よりも良い実行可能解が得られる.

短所

- ▶ 初期実行可能解 $x^{(0)}$ を与える必要がある
- ▶ 実行可能領域の境界に近づくにつれて, 無制約最適化法が数値的に不安定になる

外点ペナルティ関数法

一般的な制約つき最適化問題

$$\min_x \left\{ f(x) : \begin{array}{ll} g_m(x) = 0, & m = 1, \dots, M, \\ h_l(x) \leq 0, & l = 1, \dots, L \end{array} \right\}$$

に対して、以下の **ペナルティ関数** を定義する.

$$P(x) = \sum_{m=1}^M (g_m(x))^\alpha + \sum_{l=1}^L (\max\{h_l(x), 0\})^\beta$$

ただし、 $\alpha, \beta > 1$ は所与のパラメータ.

外点ペナルティ関数法では、**障壁 (バリア)** を徐々に弱めて実行可能領域内の点を境界に近づけていくのではなく、**罰金 (ペナルティ)** を徐々に強めて実行可能領域に押し込めていく. 具体的には、徐々に増加するペナルティ・パラメータ $\rho^{(0)} < \rho^{(1)} < \dots$ に対して、逐次、以下の無制約最適化問題を解く:

$$\min_x f(x) + \rho^{(k)} P(x).$$

正確なペナルティ関数法

内点ペナルティ関数法, 外点ペナルティ関数法は, それぞれ, バリア・パラメータ μ やペナルティ・パラメータ ρ を変化させながら何度も無制約化された最適化問題を解く必要がある. そのため, 反復が進行するにつれて, 解くべき無制約最適化問題が数値的に不安定になる.

正確なペナルティ関数法: 変換された問題を 1 回解くだけで, もとの問題の最適解が得られるような手法. 例えば, 十分に大きな ρ に対して, 以下の問題の解はもとの問題の解に一致する.

$$P(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M |g_m(\mathbf{x})| + \sum_{l=1}^L \max \{h_l(\mathbf{x}), 0\}$$

ただし, $P(\mathbf{x})$ は微分不可能なので, Newton 法などでは解けない.

今日, バリア関数・ペナルティ関数は, それ自身を最適化させるのではなく, 逐次 2 次計画問題や内点法などの直線探索で用いられる評価関数 (メリット関数) として用いられることが多い.

目次

制約つき非線形計画問題

等式制約のみの場合

不等式制約を含む場合

ペナルティ関数法

逐次二次計画法

定番アルゴリズムのおさらい

逐次二次計画法 (1)

逐次二次計画法 (SQP: sequential quadratic programming) 法は中規模 (1000 変数くらいまで) の非線形計画問題に対しては **定番** といえる方法で, 多くのソフトウェアに組み込まれている。

一般的な制約つき最適化問題

$$\min_x \left\{ f(x) : \begin{array}{l} g_m(x) = 0, \quad m = 1, \dots, M, \\ h_l(x) \leq 0, \quad l = 1, \dots, L \end{array} \right\}$$

に対する SQP 法では, k 回目の反復において, 適当な解 $\mathbf{x}^{(k)}$ と正定値行列 $\mathbf{B}^{(k)} \in \mathcal{R}^{N \times N}$ が与えられたとして以下の **線形制約つき 2 次凸計画問題 (部分問題)** を解く:

$$\begin{aligned} \min_d & \frac{1}{2} \mathbf{d}^\top \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{d} + \nabla f(\mathbf{x}^{(k)})^\top \mathbf{d} \\ \text{s.t. } & g_m(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla g_m(\mathbf{x}^{(k)})^\top \mathbf{d} = 0, \quad (m = 1, \dots, M) \\ & h_l(\mathbf{x}^{(k)}) + \nabla h_l(\mathbf{x}^{(k)})^\top \mathbf{d} \leq 0, \quad (l = 1, \dots, L) \end{aligned}$$

逐次二次計画法 (2)

この問題は、**内点法** などの方法によってかなり効率的に解けることが知られている。

こうして得られた解を探索方向 $d^{(k)}$ とした **線形探索** によってステップサイズ $\alpha^{(k)}$ を決定し、 $x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)}$ と解を改訂する。

$B^{(k)}$ の選び方

SQP 法で解く **部分問題** は、もとの問題の **Lagrange 関数** を $x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}$ の回りで Taylor 展開したものに相当する。そこで、Lagrange 関数のヘッセ行列 $\nabla^2 L(x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)})$ をうまく近似するように $B^{(k)}$ を選んでやれば、準 Newton 法のような収束速度 が得られる。

逐次二次計画法 (3)

具体的には,

$$\mathbf{s}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$$

$$\mathbf{q}^{(k+1)} = \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}^{(k+1)}, \mathbf{y}^{(k+1)}, \mathbf{z}^{(k+1)}) - L(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{y}^{(k)}, \mathbf{z}^{(k)})$$

とし, 以下の **修正 BFGS 公式** を用いて $\mathbf{B}^{(k)}$ を改訂する:

$$\mathbf{B}^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{B}^{(k)} = \frac{\mathbf{B}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)} (\mathbf{B}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)})^\top}{(\mathbf{s}^{(k)})^\top \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)}} + \frac{\hat{\mathbf{q}}^{(k)} (\hat{\mathbf{q}}^{(k)})^\top}{(\mathbf{s}^{(k)})^\top \hat{\mathbf{q}}^{(k)}}$$

ただし,

$$\hat{\mathbf{q}}^{(k)} = \psi^{(k)} \mathbf{q}^{(k)} + (1 - \psi^{(k)}) \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)}$$

$$\psi^{(k)} = \begin{cases} 1 & \text{if } (\mathbf{s}^{(k)})^\top \mathbf{q}^{(k)} \geq 0.2 (\mathbf{s}^{(k)})^\top \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)} \\ \frac{0.8 (\mathbf{s}^{(k)})^\top \mathbf{B}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)}}{(\mathbf{s}^{(k)})^\top (\mathbf{B}^{(k)} \mathbf{s}^{(k)} - \mathbf{q}^{(k)})} & \text{otherwise} \end{cases}$$

目次

制約つき非線形計画問題

等式制約のみの場合

不等式制約を含む場合

ペナルティ関数法

逐次二次計画法

定番アルゴリズムのおさらい

定番アルゴリズムのおさらい

線形計画問題 単体法, 内点法

制約なし / 等式制約のみの非線形最適化問題

準 Newton 法 (中規模), 共役勾配法 (大規模)

不等式制約を含む非線形最適化問題 SQP 法 (中規模), 内点法 (大規模)