

第12回 非線形計画法II

—— 最適性条件 ——

大域的最適解であることを判定することは大変な作業であるので，局所的最適解（その近辺においては目的関数が最小となる解）を考える．ここでは，与えられた解が局所的最適解であることを判定するための条件について説明する．

12.1 条件なし問題の最適性条件

制約条件のない非線形問題の場合，とにかく目的関数 f を小さくすればよいので比較的簡単である．

1 次の必要条件： $\mathbf{x}^*$ が局所的最適解であるためには

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \quad (12.1)$$

でなければならない．

2 次の必要条件： $\mathbf{x}^*$ が局所的最適解であるためには式 (12.1) かつ

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}^*) \text{ が半正定値} \quad (12.2)$$

でなければならない．

2 次の十分条件： 式 (12.1) かつ

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}^*) \text{ が正定値} \quad (12.3)$$

ならば， $\mathbf{x}^*$ は局所的最適解である．

式 (12.1) は必要条件であるが十分条件ではないので， $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ であっても， $\mathbf{x}^*$ が局所的最適解であるとは限らない．（たとえば，_____ などの**停留点**．）同様に，式 (12.2) も必要条件であって十分条件ではない．逆に，式 (12.3) は十分条件であって必要条件ではないので，局所的最適解であっても式 (12.3) を満たさないものもあるので，注意が必要である．

図 12.1: 局所最適解の十分条件と必要条件の関係

これらの条件の関係を図 12.1 に示す.

例として, $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$, $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + 2x_2^2$ を考えてみよう. 最適解は $\mathbf{x}^* = (0, 0)$ であるが,

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} _ \\ _ \end{pmatrix}, \quad \nabla f(\mathbf{x}^*) = \begin{pmatrix} _ \\ _ \end{pmatrix}$$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} _ & _ \\ _ & _ \end{pmatrix} = \nabla^2 f(\mathbf{x}^*), \quad \text{固有値は } _$$

であるから, 1 次の必要条件, 2 次の必要条件, 2 次の十分条件は _____

[課題 12.1] $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$ であるとき, $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + 2x_2^4$ の最小値を与える $\mathbf{x}^* = (0, 0)$ は, 1 次の必要条件, 2 次の必要条件, 2 次の十分条件を満たすか?

[課題 12.2] $f(\mathbf{x}) = x_1^2 + 2x_2^3$ の場合はどうか. $\mathbf{x}^* = (0, 0)$ は, 1 次の必要条件, 2 次の必要条件, 2 次の十分条件を満たすか?

12.2 制約つき問題の最適性条件

制約つき非線形計画問題は, 一般に

目的関数: $f(\mathbf{x}) \rightarrow \text{最小化}$

制約条件: $g_i(\mathbf{x}) = 0 \quad (1 \leq i \leq l)$

$g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (l+1 \leq i \leq m)$

のように書くことができる. $g_i \quad (1 \leq i \leq l)$ を等式制約関数, $g_i \quad (l+1 \leq i \leq m)$ を不等式制約関数という. 等式制約は, 2 つの不等式制約に書き換えることができる.

$$g_i(\mathbf{x}) = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \\ _ \end{cases}$$

したがって、全ての制約条件が不等式制約であるとしても一般性を失わない。以後は等式制約のない問題：

目的関数： $f(\mathbf{x}) \rightarrow \text{最小化}$

制約条件： $g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \ (1 \leq i \leq m)$

のみを扱う。ここでは、目的関数と全ての制約関数は微分可能であるとする。

制約つき問題における最適性は、最適解が境界上にあるかないかによって状況が変わってくる。最適解 $\mathbf{x}^*$ が境界上にない（内点である）場合、制約なし問題の場合と同様に

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

が1次の必要条件となる。しかし、最適解 $\mathbf{x}^*$ が境界上にある場合、

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

が成り立つとは限らない。では、最適解 $\mathbf{x}^*$ が境界上にある場合の必要条件はどのように表されるか、考えてみよう。

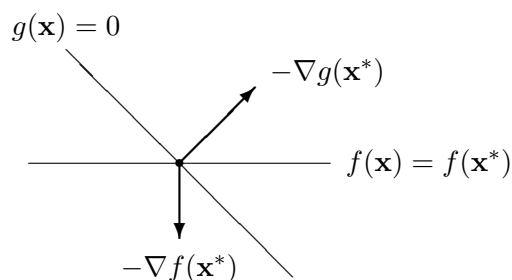


図 12.2: f の勾配と g の勾配との関係

たとえば、1つの不等式制約関数 $g(\mathbf{x}) \leq 0$ の境界上の点 $\mathbf{x}^*$ を考える（図 12.2 の中心にある点）。点 $\mathbf{x}^*$ から、点 $\mathbf{x}^*$ における g の勾配方向 ± 90 度以内の方向に進むと、 $g(\mathbf{x})$ の値は _____ なり、その領域内の $\mathbf{x}$ は制約条件 $g(\mathbf{x}) \leq 0$ を満たさなくなる。逆に、点 $\mathbf{x}^*$ から、点 $\mathbf{x}^*$ における g の勾配と逆の方向 ± 90 度以内の方向に進むと、 $g(\mathbf{x})$ の値は _____ なり、制約条件は満たされている。

一方、点 $\mathbf{x}^*$ における f の勾配と反対の方向（ $-\nabla f(\mathbf{x}^*) \pm 90$ 度未満の方向）にある点では、 $f(\mathbf{x})$ は $f(\mathbf{x}^*)$ より小さくなっている。

$-\nabla g(\mathbf{x}^*) \pm 90$ 度以内の領域と、 $-\nabla f(\mathbf{x}^*) \pm 90$ 度未満の領域に、重なる部分が存在する場合、その領域内にある点は実行可能解であって、 $\mathbf{x}^*$ よりも目的関数を小さくできる。したがって、このときは $\mathbf{x}^*$ は明らかに最適でない。

つまり、 $\mathbf{x}^*$ が局所的最適解であるためには、 $\nabla g(\mathbf{x}^*) \pm 90$ 度以内の領域と $-\nabla f(\mathbf{x}^*) \pm 90$ 度未満の領域に共通部分が存在してはいけな。このようなことは、 $-\nabla g(\mathbf{x}^*)$ と $-\nabla f(\mathbf{x}^*)$ が _____ を向いているときに起こる。すなわち、ある非負の数 u が存在して

$$u \nabla g(\mathbf{x}^*) + \nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

が成り立つときである。したがってこれが 1 つの不等式制約関数の境界上の点に対する必要条件となる。

次に、2 つの不等式制約関数 $g_1(\mathbf{x}) \leq 0$ と $g_2(\mathbf{x}) \leq 0$ の境界線の交点にある点 $\mathbf{x}^*$ を考える。 $-\nabla g_1(\mathbf{x}^*) \pm 90$ 度以内かつ $-\nabla g_2(\mathbf{x}^*) \pm 90$ 度以内の方向にある点は、制約条件を _____。したがって、そのような点が $-\nabla f(\mathbf{x}^*) \pm 90$ 度未満の方向に存在する場合、 $\mathbf{x}^*$ は明らかに _____。

したがって、 $\mathbf{x}^*$ が局所的最適解であるためには、非負の数 u_1, u_2 が存在して、

$$u_1 \nabla g_1(\mathbf{x}^*) + u_2 \nabla g_2(\mathbf{x}^*) + \nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \quad (12.4)$$

となる必要がある。

例外として、 $-\nabla g_1(\mathbf{x}^*)$ と $-\nabla g_2(\mathbf{x}^*)$ がちょうど逆方向を向いている（線形従属である）場合、 $\mathbf{x}^*$ が局所的最適解であっても式 (12.4) を満たす u_1, u_2 が存在しない場合もある。

以上の考察を一般化すると、次の条件となる。

1 次の必要条件（キューン・タッカー条件）： 解 $\mathbf{x}^*$ が問題

目的関数： $f(\mathbf{x}) \rightarrow$ 最小化

制約条件： $g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \ (1 \leq i \leq m)$

の局所的最適解であり、すべての g_i に対して勾配ベクトル $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)$ が 1 次独立でないならば、 $u_1, \dots, u_m$ が存在して、

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla f(\mathbf{x}^*) + u_1 \nabla g_1(\mathbf{x}^*) + \dots + u_m \nabla g_m(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \\ g_i(\mathbf{x}^*) \leq 0, \ u_i \geq 0 \\ g_i(\mathbf{x}^*) < 0 \text{ ならば } u_i = 0 \end{array} \right\} \quad (1 \leq i \leq m)$$

が成り立つ。

キューン・タッカー条件は、制約なし問題の 1 次の必要条件式 (12.1) を拡張したものである。 u_i を **ラグランジュ乗数** と呼ぶ。 $g_i(\mathbf{x}^*) = 0$ である制約条件を **有効制約** と呼ぶ。

キューン・タッカー条件は必要条件であるから、もちろん、条件を満たしているからといって $\mathbf{x}^*$ が局所最適解になっているとは限らない。ただし、目的関数 f が凸関数、等式

制約関数 g_i が 1 次関数, 不等式制約関数が凸関数であるような, 凸計画問題に対しては, キューン・タッカー条件を満たす $\mathbf{x}^*$ はその問題の大域的最適解であることがわかっている. 次の問題を解いてみよう.

[問題 12.1] 2 変数の凸計画問題:

$$\text{目的関数 : } f(\mathbf{x}) = (x_1 - 3)^2 + 2(x_2 - 3)^2 \rightarrow \text{最小化}$$

$$\text{制約条件 : } g(\mathbf{x}) = x_1 + 2x_2 - 3 \leq 0$$

の最適解 (大域的最適解 = 局所最適解) を求めよ.

まず,

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \underline{\hspace{2cm}} \\ \underline{\hspace{2cm}} \end{pmatrix}$$

より, $\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ となる $\mathbf{x}$ は $\underline{\hspace{2cm}}$ のみであり, これは制約条件を満たさないので, 最適解は境界上にあることがわかる. $\mathbf{x}^* = (x_1^*, x_2^*)$ を境界上の最適解とすると, キューン・タッカー条件よりある非負の数 u が存在して

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + u \nabla g(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

が成り立つ.

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = \begin{pmatrix} 2x_1^* - 6 \\ 4x_2^* - 12 \end{pmatrix}, \nabla g(\mathbf{x}^*) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

であり, 境界にある点は $\underline{\hspace{2cm}}$ を満たしているので, x_1^* を消去して

$$\begin{pmatrix} -4x_2^* \\ 4x_2^* - 12 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u \\ 2u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

これを解くと, $u = \underline{\hspace{1cm}}$, $x_2^* = \underline{\hspace{1cm}}$, $x_1^* = \underline{\hspace{1cm}}$ を得る. $u > 0$ であるから, $\mathbf{x}^* = (\underline{\hspace{1cm}}, \underline{\hspace{1cm}})$ は最適解である.