第13回　非線形計画法III
— 解法 —

13.1　最急降下法

制約なし問題に対する１次の必要条件を用いた解法に，最急降下法がある．これは，ある適当な解 $\mathbf{x}^{(t)}$ に対して $\nabla f(\mathbf{x}^{(t)}) \neq \mathbf{0}$ ならば，$\mathbf{x}^{(t)}$ から $\mathbf{d}^{(t)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(t)})$ の方向に進むと，必ず目的関数の値が ____________ ことを利用している．具体的な手順は以下のとおり．

最急降下法

(Step 1) 適当に近似解 $\mathbf{x}^{(0)}$ を選ぶ．$t = 0$ とする．

(Step 2) $\nabla f(\mathbf{x}^{(t)}) = \mathbf{0}$ であれば，$\mathbf{x}^{(t)}$ が停留点であるので終わり．そうでなければ，$\mathbf{d}^{(t)} = -\nabla f(\mathbf{x}^{(t)})$ とし，$f(\mathbf{x}^{(t)} + \alpha^{(t)}\mathbf{d}^{(t)})$ が最小となるような正の数 $\alpha^{(t)}$ を選ぶ．

(Step 3) $\mathbf{x}^{(t+1)} = \mathbf{x}^{(t)} + \alpha^{(t)}\mathbf{d}^{(t)}$ を次の近似解とし，$t \leftarrow t+1$ として step 2 に戻る．

$\alpha^{(t)}$ を**ステップ幅**と呼ぶ．実際に解く場合は，有限回の繰り返しで $\nabla f(\mathbf{x}^{(t)}) = \mathbf{0}$ となる $\mathbf{x}^{(t)}$ を得ることは期待できないので，十分小さい正数 ϵ を定めておき，$||\nabla f(\mathbf{x}^{(t)})|| < \epsilon$ であれば終了する．

真の最適解を $\mathbf{x}^*$ としたとき，最急降下法ではある正の定数 $\beta < 1$ が存在して，

$$||\mathbf{x}^{(t+1)} - \mathbf{x}^*|| \leq \beta ||\mathbf{x}^{(t)} - \mathbf{x}^*||$$

となることが保証されている．このような性質を持つ解法は，____________________ という．

最急降下法の性質

- どこを出発点 $\mathbf{x}^{(0)}$ として選んでも，必ず１つの停留点に収束していく．
これを __________________________ という．
- 収束の速さが遅い．

最急降下法は，制約なし問題の解法であるが，少し変形することによって制約つき問題を解くのにも使うことができる．制約なし問題の場合，ステップ幅は $f(\mathbf{x}^{(t+1)})$ が最小と

なるように選ぶが，制約つき問題の場合，$f(\mathbf{x}^{(t+1)})$ が最小となる前に，$\mathbf{x}^{(t+1)}$ が実行可能領域を出てしまうこともありうる．したがって，上記の step 2 のステップ幅は，$f(\mathbf{x}^{(t+1)})$ が最小となる，または $\mathbf{x}^{(t+1)}$ が実行可能領域の境界になるように選ぶ．また，終了条件もキューン・タッカー条件を用いる．

13.2　ニュートン法

制約なし問題に対する 2 次の必要条件を用いた解法であるニュートン法について説明する．

目的関数を点 $\mathbf{x}^*$ の付近で近似すると，

$$f(\mathbf{x}^* + \mathbf{d}) \simeq f(\mathbf{x}^*) + \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} + \frac{1}{2}\mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)\mathbf{d}$$

となる．ここで $\mathbf{d} = (d_1, \ldots, d_n)^T$ は微小なベクトル．$\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ が正定値であると仮定すれば，２次関数

$$q(\mathbf{d}) \stackrel{\triangle}{=} f(\mathbf{x}^*) + \nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d} + \frac{1}{2}\mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)\mathbf{d}$$

は凸関数となる.（$f(\mathbf{x}^*)$ は定数項，$\nabla f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{d}$ は 1 次の項，$\frac{1}{2}\mathbf{d}^T \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)\mathbf{d}$ は 2 次の項.）
$q(\mathbf{d})$ の勾配を計算すると，

$$\begin{aligned}
\nabla q(\mathbf{d}) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial q(\mathbf{d})}{\partial d_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial q(\mathbf{d})}{\partial d_n} \end{pmatrix} \\
&= \underline{\hspace{20em}} \\
&= \underline{\hspace{10em}}
\end{aligned}$$

であるから，$\nabla f(\mathbf{x}^*) + \nabla^2 f(\mathbf{x}^*)\mathbf{d} = \mathbf{0}$ となる $\mathbf{d}$ で，$q(\mathbf{d})$ は極小値を取る．$q(\mathbf{d})$ は，$\mathbf{x}^*$ の近傍において目的関数を近似した関数であるから，$\mathbf{x}^* + \mathbf{d}$ を次の近似解として考えることができる．以上の考え方を利用した解法の具体的な手順は以下のとおり．

ニュートン法

(Step 1) 適当に初期近似解 $\mathbf{x}^{(0)}$ を定める．$t = 0$ とする．

(Step 2) $\nabla f(\mathbf{x}^{(t)}) = \mathbf{0}$ であれば $\mathbf{x}^{(t)}$ を出力して終了．

(Step 3) $\nabla^2 f(\mathbf{x}^{(t)})$ が正定値であれば

$$\nabla f(\mathbf{x}^{(t)}) + \nabla^2 f(\mathbf{x}^{(t)})\mathbf{d} = \mathbf{0}$$

を満たす $\mathbf{d}$ を求め，$\mathbf{x}^{(t+1)} = \mathbf{x}^{(t)} + \mathbf{d}$ とする．$t \leftarrow t+1$ として step 2 にもどる．

真の最適解を $\mathbf{x}^*$ としたとき，ニュートン法ではある正の定数 β が存在して，

$$||\mathbf{x}^{(t+1)} - \mathbf{x}^*||_G \leq \beta ||\mathbf{x}^{(t)} - \mathbf{x}^*||_G^2$$

となることが保証されている.（ただし，$\mathbf{G} = \nabla^2 f(\mathbf{x}^*), ||\mathbf{x}||_G = \mathbf{x}^T\mathbf{G}\mathbf{x}$.）このような性質を ________________ という.

ニュートン法の性質

- 収束が速い.
- $\nabla^2 f(\mathbf{x}^{(t)})$ が正定値でなければいけない．$\mathbf{x}^{(t)}$ が十分局所的最適解に近ければ，$\nabla^2 f(\mathbf{x}^{(t)})$ は正定値となるが，任意の点について言えるわけではない．したがって，ニュートン法は大域的収束性はもっていない.（______________________ ）

13.3 ペナルティ法

制約つき問題：

$$\begin{aligned} \text{目的関数:} \quad & f(\mathbf{x}) \to \text{ 最小化} \\ \text{制約条件:} \quad & g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \ (1 \leq i \leq m) \end{aligned}$$

の解法として，ペナルティ法（罰金法）について説明する.

ペナルティ法は，制約条件を破ったときに目的関数値にペナルティを加えることによって，制約条件を目的関数の中に取り込み，制約なし問題として解く手法．次の 2 つの考え方がある.

- 実行可能領域においてはペナルティは 0 とし，制約を破った場合にはその度合に応じてペナルティを課す.（一般にペナルティ法と呼ばれるもの.）

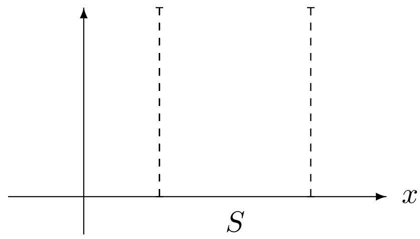

図 13.1: ペナルティ法（その１）

- 実行可能領域の境界に近づくほどにペナルティが増加し，境界上においてペナルティを無限大にする．(一般に,「内点法」と呼ばれるもの.）

まず，１つ目の考えかたによる方法について説明する．たとえば,

$$P(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m} \{\max(0, g_i(\mathbf{x}))\}^{\alpha}$$

という関数を考える（$\alpha \geq 1$）．関数 P は，制約条件を全て満たしていれば値 0 をとり，制約条件を大きく違反していれば大きい値をとり，____________________ と呼ばれる．次に，目的関数にペナルティ関数 P の定数倍を加えた関数 F_r を考える．

$$F_r(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + rP(\mathbf{x})$$

F_r を拡張目的関数と呼ぶ．r は正の値をとるパラメータで，r を大きくすると，制約条件を満たさない解においては拡張目的関数の値も大きくなっていく．したがって，拡張目的関数を（制約なしで）最小化することは，元の目的関数 f を（制約ありで）最小化することと等しくなり，制約つき問題を等価な制約なし問題にすりかえることができる．

[**問題 13.1**] 1 変数の非線形計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{目的関数:} & f(x) = (x-2)^2 \to \text{ 最小化} \\ \text{制約条件:} & |x| \leq 1 \end{array}$$

を解け.

この問題の最適解が $x^* = 1$ であることは明らかであるが，これをペナルティ法を用いて解いてみよう.

制約条件は，$x \leq 1, -x \leq 1$ であるから，

$$\begin{aligned} g_1 &= \underline{\qquad\quad} \leq 0 \\ g_2 &= \underline{\qquad\quad} \leq 0 \end{aligned}$$

と書ける．$\alpha = 1$ とした場合，

$$\begin{aligned} P(x) &= \max(0, x-1) + \max(0, -1-x) \\ &= \begin{cases} \underline{\hspace{3cm}} & x > 1 \text{ のとき} \\ \underline{\hspace{3cm}} & |x| \le 1 \text{ のとき} \\ \underline{\hspace{3cm}} & x < -1 \text{ のとき} \end{cases} \end{aligned}$$

となる．

$$\begin{aligned} F_r(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) + rP(\mathbf{x}) \\ &= \begin{cases} \underline{\hspace{6cm}} & x > 1 \text{ のとき} \\ \underline{\hspace{6cm}} & |x| \le 1 \text{ のとき} \\ \underline{\hspace{6cm}} & x < -1 \text{ のとき} \end{cases} \end{aligned}$$

を制約条件なしで最小化すると，パラメータ r に対する最適解 $x^*(r)$ は

$$x^*(r) = \begin{cases} 2 - r/2 & 0 \le r < 2 \text{ のとき} \\ 1 & r \ge 2 \text{ のとき} \end{cases}$$

となり，r を 2 以上にすれば $x^* = 1$ に落ち着く．これは問題 13.1 の最適解となっている．

一般に，$\alpha = 1$ とした場合には，r を十分大きく選べば拡張目的関数の最適解は元の問題の最適解に一致する.（ただし，どのくらい大きく r を選べば良いか，事前に求めることは困難である.）

$\alpha = 1$ とした場合，一般に拡張された目的関数には微分不可能である点が存在する．したがって，拡張目的関数の最適解を，微分可能性を用いた制約なし問題の解法を用いて求めることはできない．

拡張目的関数を微分可能にするためには，$\alpha = 2$ とすればよい．問題 13.1 の場合，

$$\begin{aligned} F_r(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) + rP(\mathbf{x}) \\ &= \begin{cases} (x-2)^2 + r(1-x)^2 & x > 1 \text{ のとき} \\ \underline{\hspace{6cm}} & |x| \le 1 \text{ のとき} \\ \underline{\hspace{6cm}} & x < -1 \text{ のとき} \end{cases} \end{aligned}$$

となる．F_r は，

$$x^*(r) = 1 + \frac{1}{r+1}$$

で最小値をとる．r を無限に大きくしたとき，元の問題の最適解 $x^* = 1$ に限りなく近づいていくことがわかる．しかし，$\alpha = 1$ の場合のように，ある一定より大きな r で F_r の最適解が本来の最適解 $x^* = 1$ にちょうど一致することはない．また，F_r の微分可能性を用

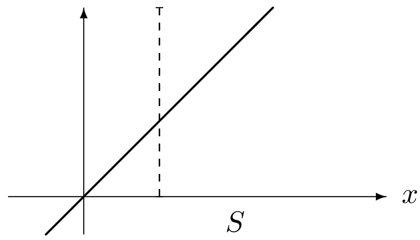

図 13.2: ペナルティ法（その２）

いて，制約なし問題の解法を適用した場合（たとえば最急降下法など），収束が非常に遅くなる等の欠点がある．

次に，２つ目の考えかたによる方法について説明する．
たとえば，ペナルティ関数として

$$P(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{m} \frac{1}{g_i(\mathbf{x})}$$

という関数を考える．実行可能領域内（境界は除く）においては，$g_i(\mathbf{x}) < 0$ であるから，関数 P は常に正となる．また，実行可能領域の境界に近づくほどに増加し，境界上において無限大になる．拡張目的関数は，先と同様に

$$F_r(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + rP(\mathbf{x})$$

とする．r は正の値をとるパラメータで，境界上にあるペナルティによる壁の厚みを示している．r が小さくなればなるほど壁は薄く切り立って行き，同時に壁から離れた領域におけるペナルティは小さくなっていく．したがって，r を 0 に近づけながら拡張目的関数の最小化を繰り返すことにより，元の目的関数 f の最小化を行うことができる．

[**問題 13.2**]　1 変数の非線形計画問題

$$\begin{aligned} &\text{目的関数:} \quad && f(x) = x \to \text{ 最小化} \\ &\text{制約条件:} \quad && x \geq 1 \end{aligned}$$

を解け．

明らかにこの問題の最適解は $x^* = 1$ である．
不等式制約関数は $g(x) = 1 - x \leq 0$ であるから，拡張目的関数は

$$F_r(x) = \underline{\hspace{6cm}}$$

となる．$(1,\infty)$ の区間での最小点は $\frac{dF_r(x)}{dx}=0$ を満たすので，

$$\frac{dF_r(x)}{dx}=1-\frac{r}{(1-x)^2}=0$$

より，$x=1+\sqrt{r}$ と求めることができる．r を 0 に近づけることで，本来の最適解 $x^*=1$ を得ることができる．

先に紹介した手法では，全域において拡張目的関数値が意味を持つのに対し，この手法での拡張目的関数値は，境界の壁を越した向こう側（実行可能領域以外）では__________ __________ しかし，拡張目的関数の最小化を行うときに，最急降下法のような反復法（初期近似解から始めて，目的関数を改善していく方向へ近似解を移動していく手法）を用いるならば，初期近似解を実行可能領域内に取りさえすれば近似解は境界の壁を越えることは決してないので，十分である．

この手法を用いた制約つき問題の解法の具体例を１つ挙げる．

1. 実行可能領域の内点に，初期近似解 $\mathbf{x}^{(0)}$ をとる．$t=1$ とし，$r_1>1$ を選ぶ．
2. 拡張目的関数 $F_{r_t}(\mathbf{x})$ の最小値 $\mathbf{x}^{(t)}$ を，適当な制約なし問題の解法を用いて求める．反復法を用いて求める場合，$\mathbf{x}^{(t-1)}$ を初期値とする．
3. $|\mathbf{x}^{(t)}-\mathbf{x}^{(t-1)}|$ が十分小さいならば $\mathbf{x}^{(t)}$ を出力して終わり（収束判定）．そうでなければ $r_{t+1}=r_t/c$，$t\leftarrow t+1$ として，2. にもどる．

c は１より大きい正数．c を１に近く取ると，拡張目的関数 P_{r_t} は $P_{r_{t-1}}$ に近いため，$\mathbf{x}^{(t-1)}$ から $\mathbf{x}^{(t)}$ を容易に求めることができるが，真の最適解に達する t は大きくなる．c を大きく取ると，t が小さいうちに最適解に収束するが，$\mathbf{x}^{(t-1)}$ から $\mathbf{x}^{(t)}$ を求めるのに時間がかかる．

13.4 非線形計画法のまとめ

最適性条件

- 制約なし問題

目的関数： $f(\mathbf{x}) \to$ 最小化

１次の必要条件：$\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$
２次の必要条件： $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$,
$\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ が半正定値
２次の十分条件： $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$,
$\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$ が正定値

- 制約つき問題

目的関数： $f(\mathbf{x}) \to$ 最小化
制約条件： $g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \ (1 \leq i \leq m)$

１次の必要条件（キューン・タッカー条件）：$\mathbf{x}^*$ が局所最適解であり，全ての $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)$ が１次独立ならば，ラグランジュ乗数 $u_1, \ldots, u_m$ が存在して

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{x}^*) + u_1 \nabla g_1(\mathbf{x}^*) + \cdots + u_m \nabla g_m(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \\ g_i(\mathbf{x}^*) \leq 0, \ u_i \geq 0 \\ g_i(\mathbf{x}^*) < 0 \text{ ならば } u_i = 0 \end{cases}$$

が成り立つ．

解法

- 制約なし問題

最急降下法 ：１次の必要条件を利用．１次収束（遅い）．大域的収束性．

ニュートン法 ：２次の必要条件を利用．２次収束（速い）．局所的収束（初期近似解が局所的最適解に十分近くないと収束しない）．

- 制約つき問題

ペナルティ法 ：制約条件をペナルティとして目的関数に取り込み，制約なし問題として解く．