＜数理計画モデル＞

・線形計画問題

・ネットワーク計画問題

簡単に解ける

・非線形計画問題

・組合せ計画問題

難しい
（厳密な最適化は困難な場合が多い）

非線形計画モデル

＜ポートフォリオ選択問題＞

資産w円を3種類の株式A_1, A_2, A_3に分散して投資する。

株式の現在価格：p_1, p_2, p_3円

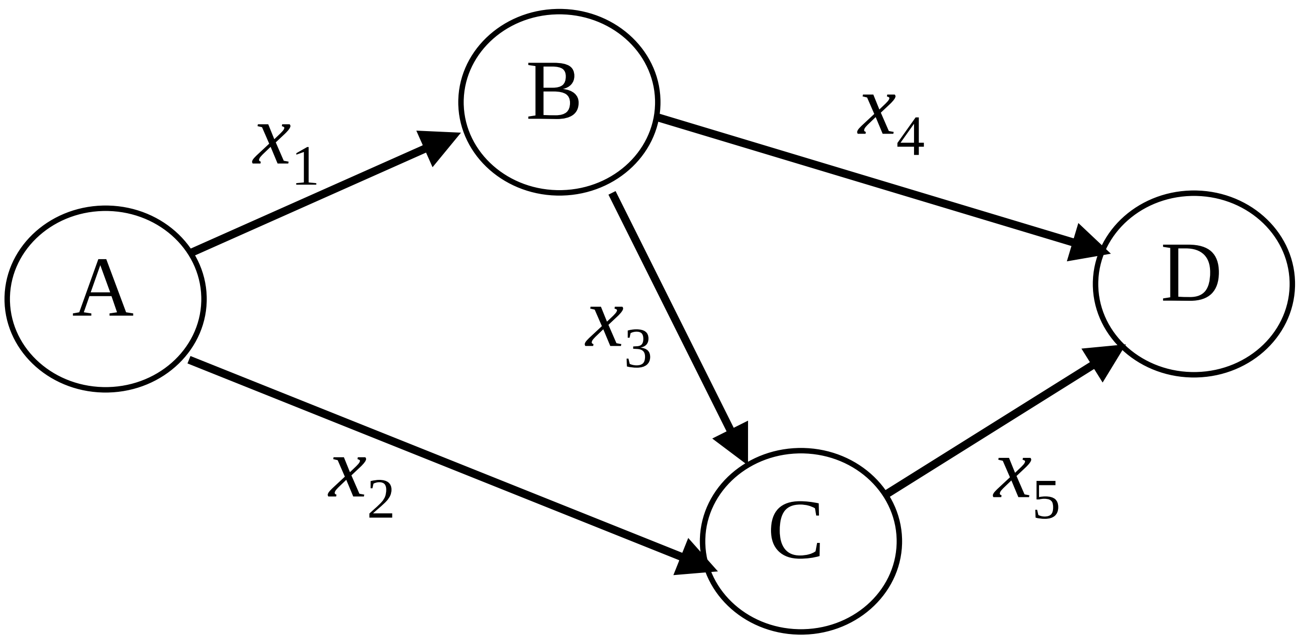
1カ月後の株式の価格：P_1, P_2, P_3円

⟶ 確率変数

＜交通流割当問題＞

W台の車がAからDへ向かう

各道路を通る車の台数: x_1, x_2, x_3, x_4, x_5



非線形計画問題

・制約なし問題

・制約つき問題

＜非線形計画問題＞

目的関数：　$f(\boldsymbol{x}) \longrightarrow$ 最小

制約条件：　$\boldsymbol{x} \in \mathrm{S}$

＜制約なし問題＞

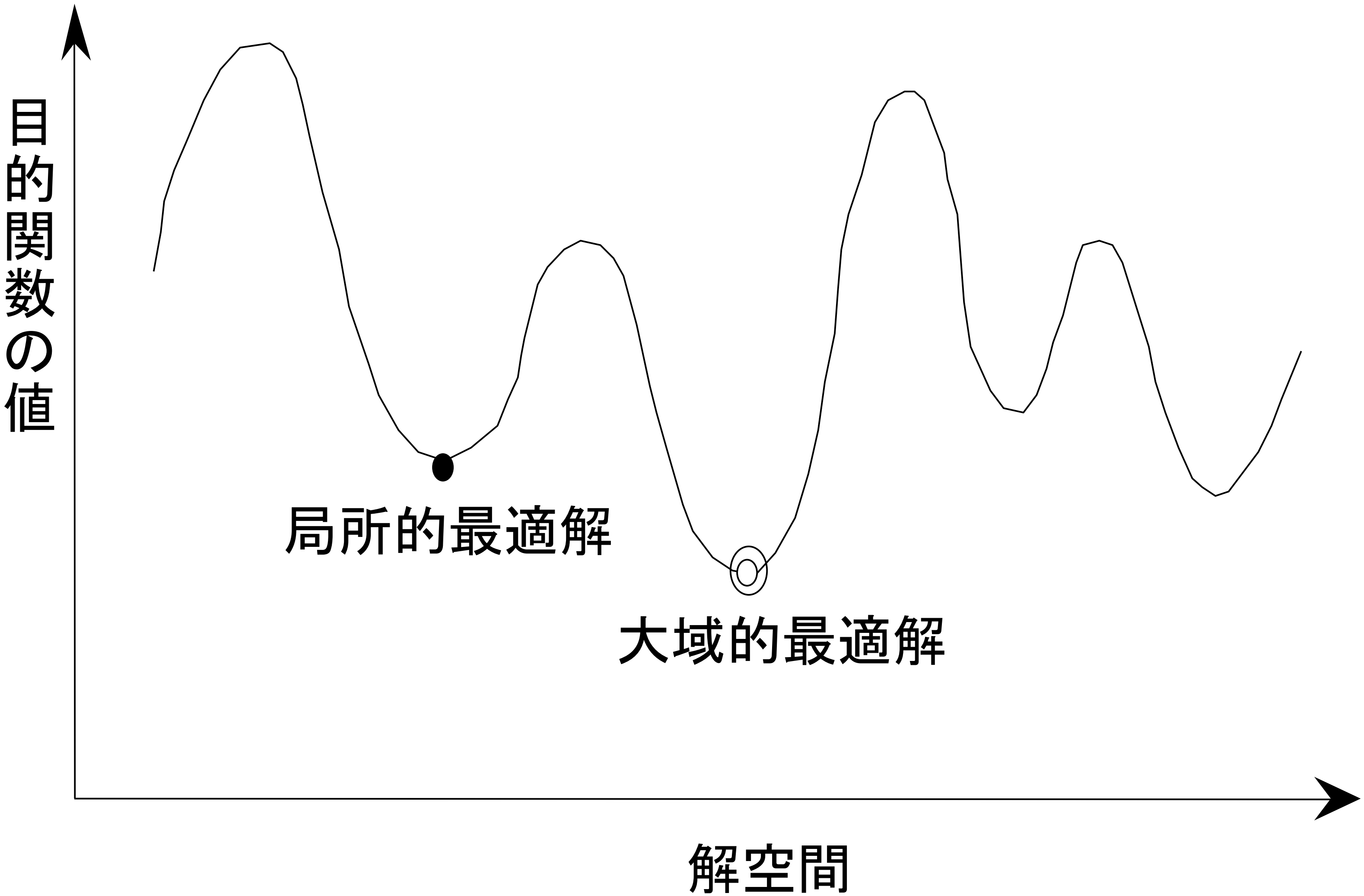
目的関数：　$f(\boldsymbol{x}) \longrightarrow$ 最小

局所的最適解と大域的最適解

大域的最適解：実行可能領域S全体において目的関数fが最小となる点

局所的最適解：十分近くのどの実行可能解よりも目的関数fの値が小さい点

＜最適化の概念＞



＜凸計画問題＞

目的関数f：凸関数

実行可能領域：凸集合

局所的最適解＝大域的最適解

凸関数f: $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \in \mathrm{R}^n,\ 0 \leqq \alpha \leqq 1 \Rightarrow f(\alpha\boldsymbol{x}+(1-\alpha)\boldsymbol{y}) \leqq \alpha f(\boldsymbol{x})+(1-\alpha)f(\boldsymbol{y})$

凸集合S: $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \in \mathrm{S},\ 0 \leqq \alpha \leqq 1 \Rightarrow \alpha\boldsymbol{x}+(1-\alpha)\boldsymbol{y} \in \mathrm{S}$

＜一般的な非線形計画問題＞

いくつもの局所的最適解のなかから大域的最適解を見つけることは非常に困難

→ 局所的最適解を求めることが当面の目標

関数の勾配とヘッセ行列

$\nabla f(\boldsymbol{x})$: 点$\boldsymbol{x}$における関数fの勾配

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

例）

$$f(\boldsymbol{x}) = 5x_1^{\,2} - 6x_1x_2 + 5x_2^{\,2} - 10x_1 + 6x_2$$

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} = 10x_1 - 6x_2 - 10$$

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} = -6x_1 + 10x_2 + 6$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 10x_1 - 6x_2 - 10 \\ -6x_1 + 10x_2 + 6 \end{bmatrix}$$

点$\boldsymbol{a}=(0,0)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{b}=(2,0)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{c}=(3,1)^{\mathrm{T}}$における関数$f$の勾配

$$\nabla f(\boldsymbol{a}) = \begin{bmatrix} -10 \\ 6 \end{bmatrix}, \ \nabla f(\boldsymbol{b}) = \begin{bmatrix} 10 \\ -6 \end{bmatrix}, \nabla f(\boldsymbol{c}) = \begin{bmatrix} 14 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$: 点$\boldsymbol{x}$における関数fのヘッセ行列

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1{}^2} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1 x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1 x_n} \\ \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2{}^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n{}^2} \end{bmatrix}$$

対称行列

例）

$$f(\boldsymbol{x}) = 5x_1{}^2 - 6x_1x_2 + 5x_2{}^2 - 10x_1 + 6x_2$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 10x_1 - 6x_2 - 10 \\ -6x_1 + 10x_2 + 6 \end{bmatrix}$$

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 10 & -6 \\ -6 & 10 \end{bmatrix}$$

固有値：$\lambda_1=4,\ \lambda_2=16$

固有ベクトル：$x_1=(1,1)^T,\ x_2=(1,-1)^T$

固有多項式

$g_A(t)=|tE-A|$　　A: 正方行列

行列Aの固有値: $g_A(t)=0$ の根(複素根も含む)

$$A=\nabla^2 f(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix}10 & -6\\ -6 & 10\end{bmatrix}$$

$$|tE-A|=\begin{vmatrix}t-10 & 6\\ 6 & t-10\end{vmatrix}=t^2-20t+64=(t-4)(t-16)$$

$$\lambda=4,16$$

$$T_A(\boldsymbol{x})=A\boldsymbol{x} \longrightarrow A\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x} \longrightarrow A\boldsymbol{x}=\lambda E\boldsymbol{x}$$

$(\lambda E-A)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$　　$\boldsymbol{x}$: 固有ベクトル

$\lambda=4$のとき　$\begin{bmatrix}-6 & 6\\ 6 & -6\end{bmatrix}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$　　$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$

$\lambda=16$のとき　$\begin{bmatrix}6 & 6\\ 6 & 6\end{bmatrix}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$　　$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}$

固有値がすべて正である対称行列

↓

正定値行列

$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathrm{A}\boldsymbol{x} > 0$ （すべての$\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$について）

ヘッセ行列が正定値の２次関数の等高線

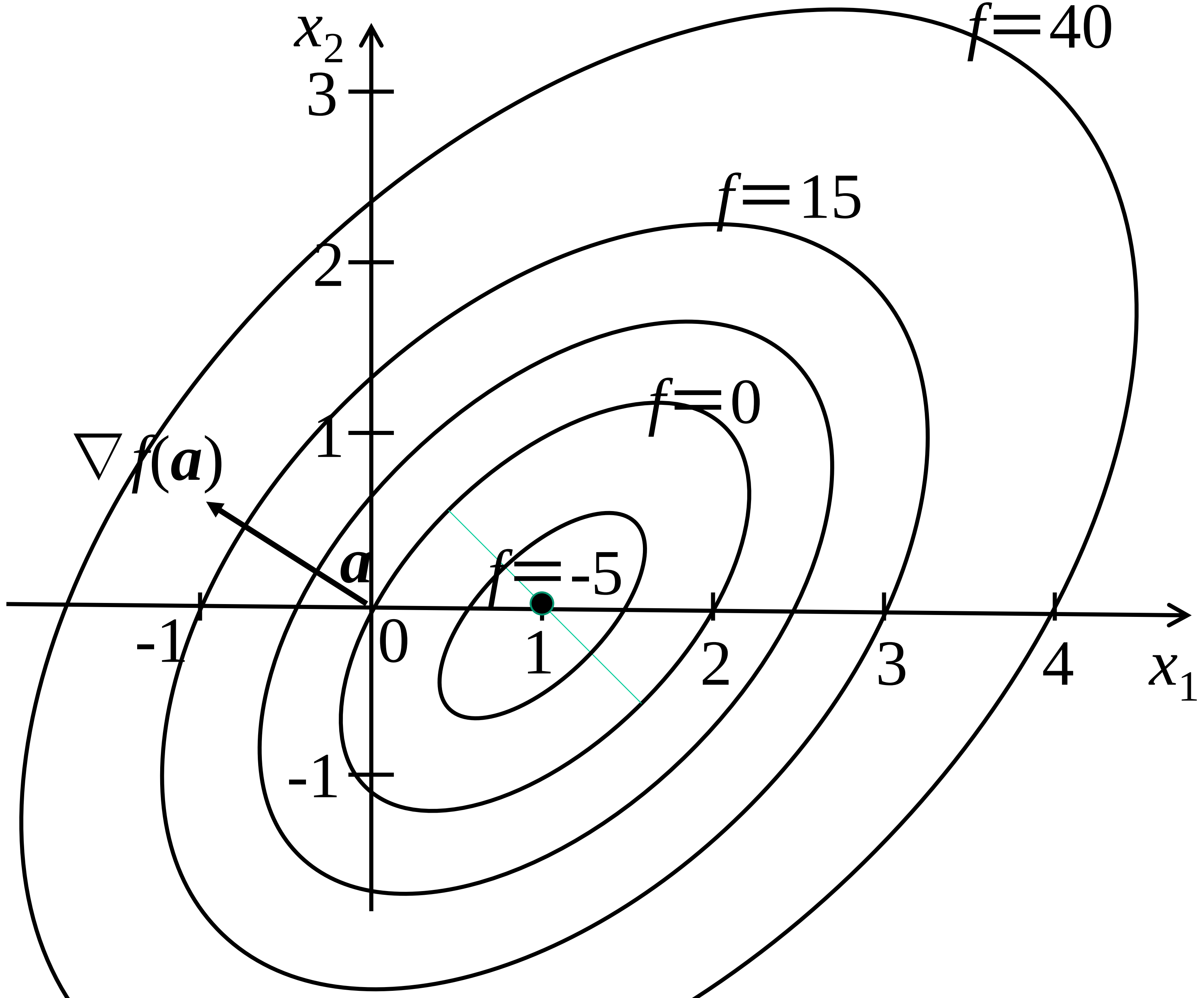
⟶ 楕円（共通の軸をもつ相似な楕円）

軸の方向：固有ベクトルの方向

軸の長さの比：固有値の平方根の逆数の比

ヘッセ行列：関数の形に関する重要な情報

$f(\boldsymbol{x}) = 5x_1^2 - 6x_1x_2 + 5x_2^2 - 10x_1 + 6x_2$ の等高線



＜一般の非線形関数の場合＞

任意の点$\bar{x}$に対して関数fを２次の項までテイラー展開した関数

$$\tilde{f}(\boldsymbol{x}) = f(\bar{\boldsymbol{x}}) + \nabla f(\bar{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\bar{\boldsymbol{x}})\,(\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}})$$

点$\bar{x}$のまわりで関数fを近似した関数

一般の非線形関数に対しても局所的性質を知るうえで非常に重要

制約なし問題の最適性条件

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

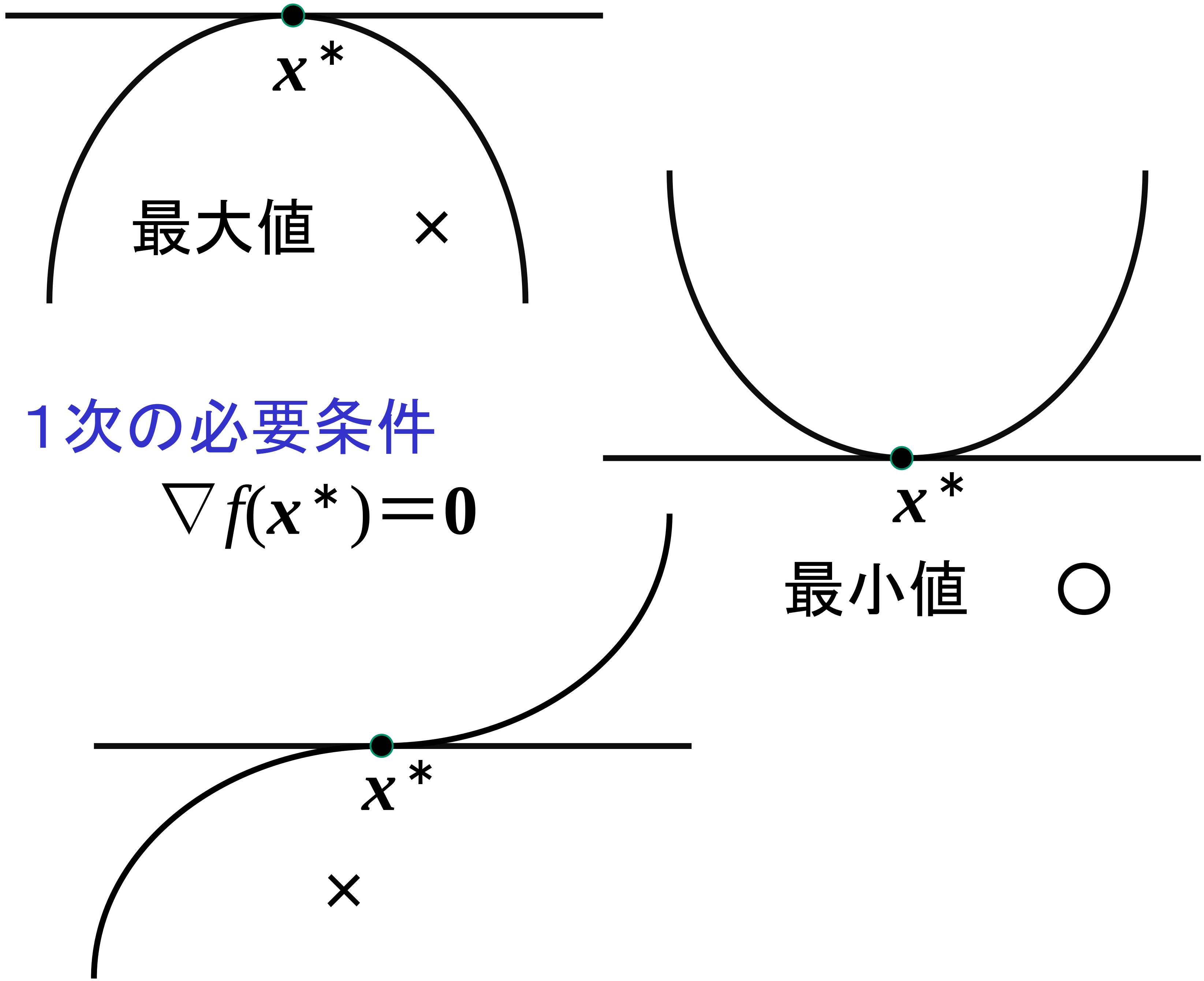
$\boldsymbol{x}^*$が局所的最適解であるための必要条件

$\boldsymbol{x}^*$: 関数fの停留点　　1次の必要条件

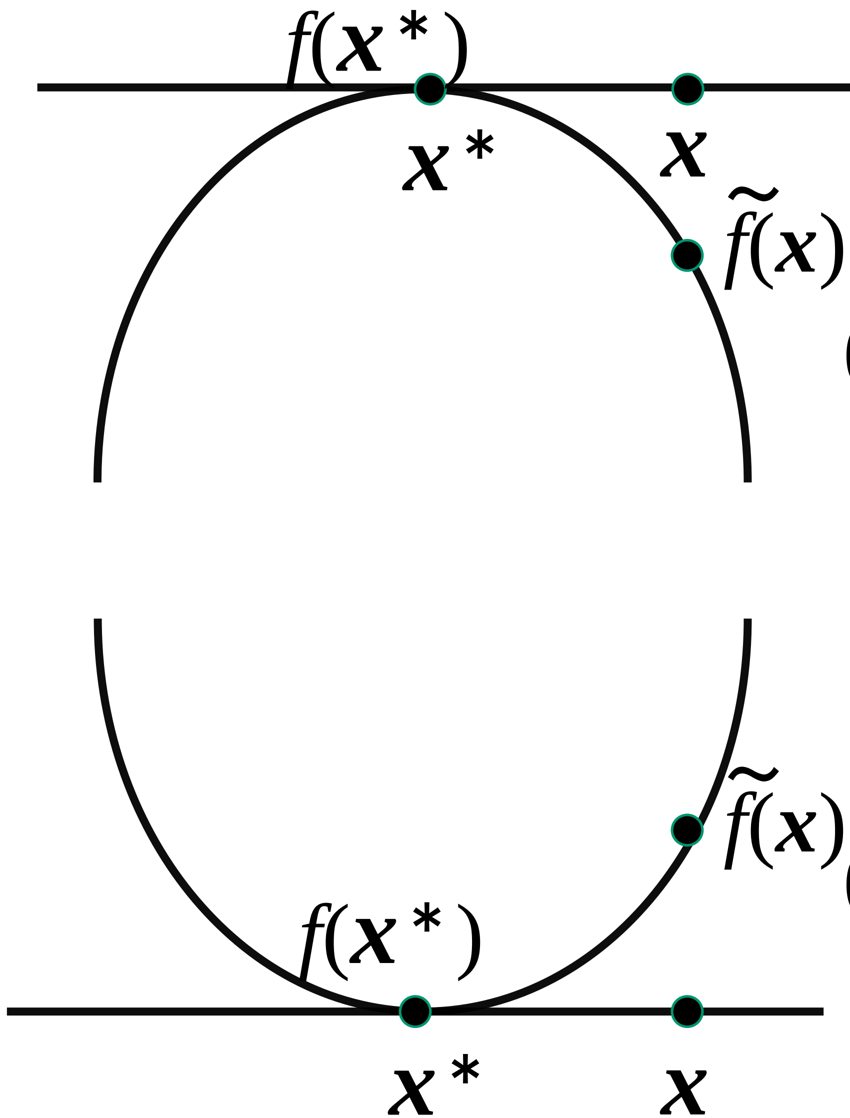
凸関数fの任意の停留点x^*は（大域的）最適解

1次の必要条件

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



$$f(\tilde{\boldsymbol{x}}) = f(\boldsymbol{x}^*) + \nabla f(\boldsymbol{x}^*)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)$$



$\tilde{f}(\boldsymbol{x}) < f(\boldsymbol{x}^*)$

$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*) < 0$

$\tilde{f}(\boldsymbol{x}) > f(\boldsymbol{x}^*)$

$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*) > 0$

$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$ は正定値

A：半正定値行列

$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \mathrm{A} \boldsymbol{x} \geqq 0$ （すべての$\boldsymbol{x}$について）

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

$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$ は半正定値

最適性の**2次の必要条件**

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

$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$ は正定値

最適性の**2次の十分条件**

例）

$$f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + 3x_2^2$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 6x_2 \end{bmatrix} \qquad \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6 \end{bmatrix}$$

$\nabla f(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ $\nabla^2 f(\mathbf{0})$は正定値

最小点$x = \mathbf{0}$は最適性の２次の必要条件と十分条件を満たす

$$f(\boldsymbol{x}) = x_1{}^2 + x_2{}^4$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 4x_2{}^3 \end{bmatrix} \qquad \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 12x_2{}^2 \end{bmatrix}$$

$$\nabla f(\mathbf{0}) = \mathbf{0} \qquad \nabla^2 f(\mathbf{0}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$\nabla^2 f(\mathbf{0})$は半正定値だが正定値ではない

最小点$\boldsymbol{x}=\mathbf{0}$は最適性の２次の必要条件は満たすが，十分条件は満たさない

$$f(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + x_2^3$$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 3x_2^2 \end{bmatrix} \qquad \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6x_2 \end{bmatrix}$$

$$\nabla f(\boldsymbol{0}) = \boldsymbol{0} \qquad \nabla^2 f(\boldsymbol{0}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$\nabla^2 f(\boldsymbol{0})$は半正定値だが正定値ではない

$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$は最適性の２次の必要条件を満たすが，局所的最小点ではない

＜制約なし問題の解法＞

非線形計画問題の最適解を有限回の演算で厳密に求めることは困難

一般には，最適解に収束するような点列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ を次々と生成する反復法が用いられる.

最急降下法

＜最急降下法＞

(0) 出発点$\boldsymbol{x}^{(0)}$を選び，k:=0 とおく.

(1) $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})=\mathbf{0}$ ならば計算終了．さもなければ

$\boldsymbol{d}^{(k)} := -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ とおいてステップ(2)へ.

(2) ステップ幅$\alpha^{(k)}$を求め，次の点

$\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \boldsymbol{d}^{(k)}$ を定める.

k:= k +1とおいてステップ(1)へ戻る.

＜ステップ(2)の ステップ幅$\alpha^{(k)}$の求め方＞

$$f(\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha^{(k)}\boldsymbol{d}^{(k)}) \fallingdotseq \min_{\alpha \geqq 0} f(\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha\boldsymbol{d}^{(k)})$$ 直線探索

＜大域的収束性をもつ＞ 長所

出発点をどこに選んでも、なんらかの解に収束することが理論的に保証されている

＜1次収束＞ 収束の速さはあまり優れない

局所最適解にほぼ一定の比率で収束

$\lambda_{max(min)}$: $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*)$の最大(最小)固有値, $\boldsymbol{x}^*$:収束点

条件数$\gamma = \lambda_{max} / \lambda_{min}$, $(\gamma-1)/(\gamma+1)$の比率

γが1に近い:収束が速い　γが大きい:収束が遅い

$f(\boldsymbol{x}) = 5x_1^2 - 6x_1x_2 + 5x_2^2 - 10x_1 + 6x_2$ の等高線

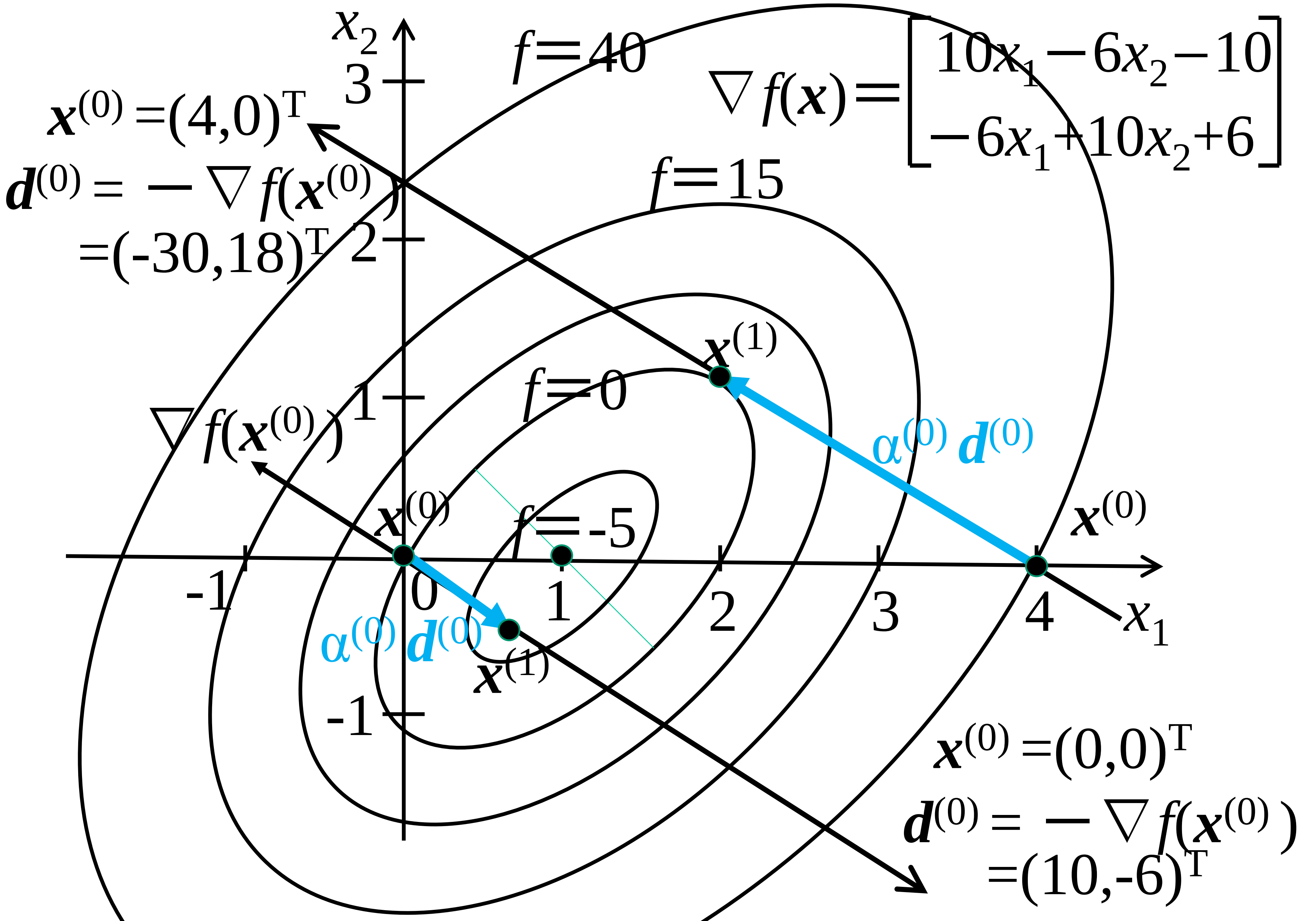


表 4.1　関数 (4.19) に対する最急降下法の計算結果

反復 k	$\boldsymbol{x}^{(k)}$	$f(\boldsymbol{x}^{(k)})$	$\|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\|$
0	$(0.00000, 1.00000)$	0.11000×10^{2}	0.20099×10^{2}
1	$(0.09988, 0.00115)$	0.81098×10^{0}	0.17737×10^{1}
2	$(0.36070, 0.02723)$	0.51452×10^{0}	0.20677×10^{1}
3	$(0.35167, 0.11761)$	0.42069×10^{0}	0.12174×10^{1}
4	$(0.44424, 0.12687)$	0.35853×10^{0}	0.14166×10^{1}
5	$(0.43824, 0.18689)$	0.31583×10^{0}	0.10381×10^{1}
10	$(0.57217, 0.28642)$	0.19981×10^{0}	0.82338×10^{0}
20	$(0.67723, 0.43291)$	0.11080×10^{0}	0.51716×10^{0}
30	$(0.73949, 0.52795)$	0.71432×10^{-1}	0.37970×10^{0}
40	$(0.78289, 0.59811)$	0.49328×10^{-1}	0.29770×10^{0}
50	$(0.81555, 0.65307)$	0.35472×10^{-1}	0.24213×10^{0}
100	$(0.90619, 0.81570)$	0.91002×10^{-2}	0.11011×10^{0}
200	$(0.96896, 0.93721)$	0.99136×10^{-2}	0.33934×10^{-1}
300	$(0.98869, 0.97691)$	0.13148×10^{-3}	0.12106×10^{-1}
400	$(0.99575, 0.99130)$	0.18520×10^{-4}	0.45109×10^{-2}
500	$(0.99838, 0.99669)$	0.26650×10^{-5}	0.17065×10^{-2}

ニュートン法と準ニュートン法

＜ニュートン法＞

(0) 出発点$\boldsymbol{x}^{(0)}$を選び，k:=0 とおく.

(1)$\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})=\mathbf{0}$ ならば計算終了．さもなければ

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

の解$\boldsymbol{d}^{(k)}$を求め，ステップ(2)へ.

(2) 次の点を $\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{d}^{(k)}$ とする.

k:= k +1とおいてステップ(1)へ戻る.

$$f(\tilde{\boldsymbol{x}}) = f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{T}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{(k)}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{(k)})^{T}\nabla^{2} f(\boldsymbol{x}^{(k)})\,(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{(k)})$$

$\boldsymbol{d} = (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{(k)})$ として

$$q^{(k)}(\boldsymbol{d}) = f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{T}\boldsymbol{d} + \frac{1}{2}\boldsymbol{d}^{T}\nabla^{2} f(\boldsymbol{x}^{(k)})\,\boldsymbol{d}$$

$$\nabla q^{(k)}(\boldsymbol{d}) = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{T} + \nabla^{2} f(\boldsymbol{x}^{(k)})\,\boldsymbol{d} = \boldsymbol{0}$$ 最小点

＜2次収束＞　収束が速い

誤差（局所最適解との差）の２乗がほぼ一定の比率で収束

＜局所的収束性をもつが，大域的収束性をもたない＞　短所

出発点を解の十分近くに選べば、その解への収束が保証される

$$f(\boldsymbol{x}) = 5x_1^2 - 6x_1x_2 + 5x_2^2 - 10x_1 + 6x_2$$

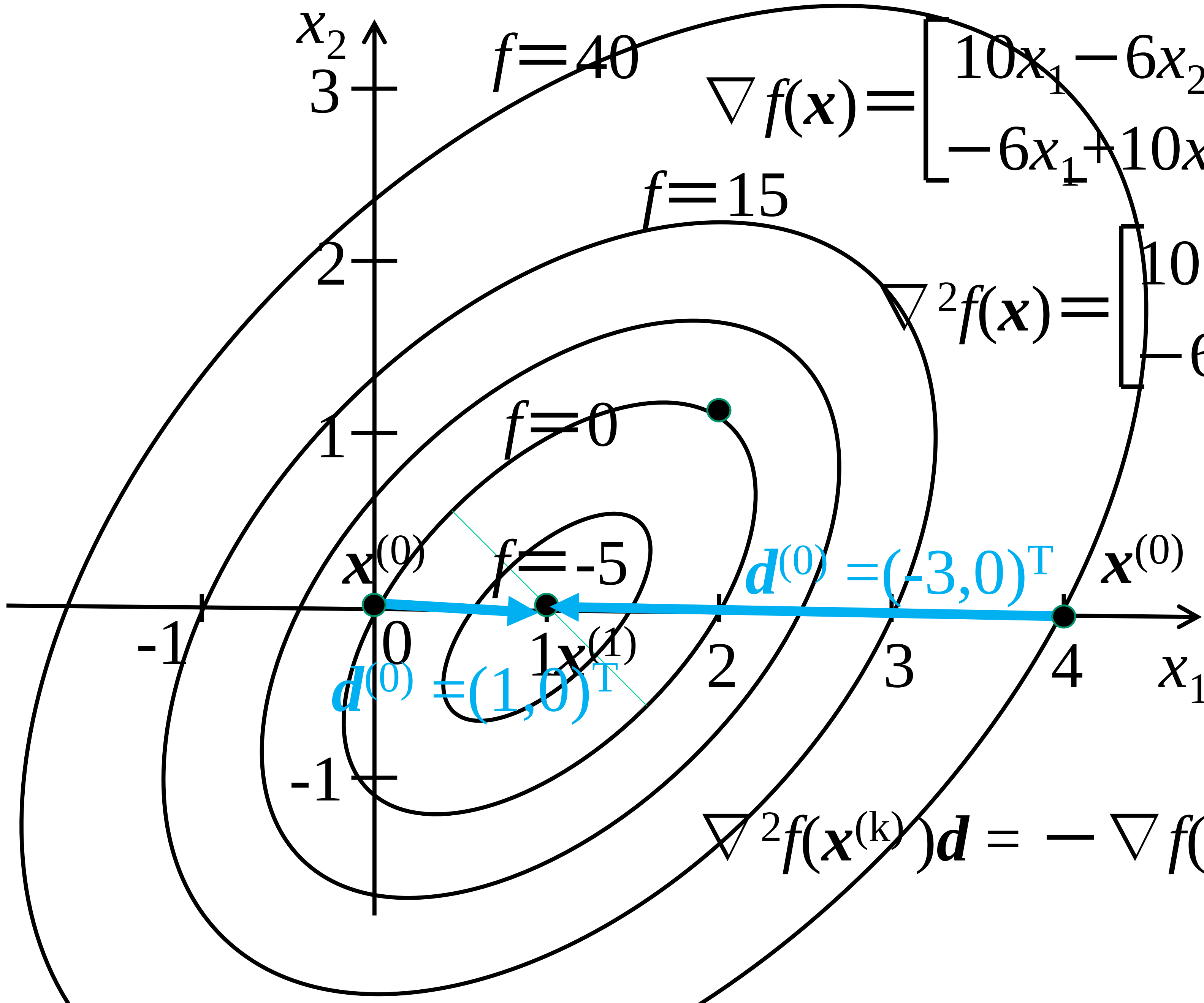
$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 10x_1 - 6x_2 - 10 \\ -6x_1 + 10x_2 + 6 \end{bmatrix} \qquad \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 10 & -6 \\ -6 & 10 \end{bmatrix}$$

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$\boldsymbol{x}^{(0)} = (0,0)^T \qquad \begin{bmatrix} 10 & -6 \\ -6 & 10 \end{bmatrix} \boldsymbol{d} = \begin{bmatrix} 10 \\ -6 \end{bmatrix} \qquad \begin{aligned} \boldsymbol{d}^{(0)} &= (1,0)^T \\ \boldsymbol{x}^{(1)} &= \boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{d}^{(0)} \\ &= (1,0)^T \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{x}^{(0)} = (4,0)^T \qquad \begin{bmatrix} 10 & -6 \\ -6 & 10 \end{bmatrix} \boldsymbol{d} = \begin{bmatrix} -30 \\ 18 \end{bmatrix} \qquad \begin{aligned} \boldsymbol{d}^{(0)} &= (-3,0)^T \\ \boldsymbol{x}^{(1)} &= \boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{d}^{(0)} \\ &= (1,0)^T \end{aligned}$$

$f(\boldsymbol{x}) = 5x_1^2 - 6x_1x_2 + 5x_2^2 - 10x_1 + 6x_2$ の等高線



$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 10x_1 - 6x_2 - 10 \\ -6x_1 + 10x_2 + 6 \end{bmatrix}$$

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 10 & -6 \\ -6 & 10 \end{bmatrix}$$

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{d} = -\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

表 **4.2**　関数 (4.19) に対するニュートン法の計算結果

反復 k	$\boldsymbol{x}^{(k)}$	$f(\boldsymbol{x}^{(k)})$	$\|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\|$
0	$(0.00000, 0.00000)$	0.10000×10^{1}	0.20000×10^{1}
1	$(0.32341, 0.00000)$	0.56717×10^{0}	0.20919×10^{1}
2	$(0.73455, 0.46247)$	0.12990×10^{0}	0.23209×10^{1}
3	$(0.91297, 0.85632)$	0.12775×10^{-1}	0.11054×10^{1}
4	$(1.00450, 1.01041)$	0.39429×10^{-4}	0.54177×10^{-1}
5	$(0.99997, 0.99995)$	0.16624×10^{-8}	0.46482×10^{-3}
6	$(1.00000, 1.00000)$	0.39340×10^{-17}	0.17062×10^{-7}

＜準ニュートン法＞

(0) 出発点$\boldsymbol{x}^{(0)}$と正定値対称行列$\mathrm{B}^{(0)}$を選び,

k:=0 とおく.

(1) $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})=\mathbf{0}$ ならば計算終了. さもなければ

$\boldsymbol{d}^{(k)} := -(\mathrm{B}^{(k)})^{-1}\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})$ を求めステップ(2)へ.

(2) ステップ幅$\alpha^{(k)}$を求め, 次の点

$\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\boldsymbol{d}^{(k)}$ を定める.

(3) BFGS公式により行列$\mathrm{B}^{(k+1)}$を定める.

k:= k +1とおいてステップ(1)へ戻る.

ニュートン法の改良版

＜超１次収束＞

１次収束と2次収束のあいだ．２次収束に近い．

＜ほぼ大域的収束性を保証＞

・目的関数fが凸関数の場合は証明済み

・目的関数が凸関数でない場合は証明されていないが、実際には工夫により可能

信頼性（大域的収束性）と計算効率（収束の速さ）の両面で非常に優れた方法。実際に広く用いられている。

表 4.3　関数 (4.19) に対する準ニュートン法 (BFGS 法) の計算結果

反復 k	$\boldsymbol{x}^{(k)}$	$f(\boldsymbol{x}^{(k)})$	$\|\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})\|$
0	$(0.00000, 1.00000)$	0.11000×10^{2}	0.20099×10^{2}
1	$(0.09988, 0.00115)$	0.81098×10^{0}	0.17737×10^{1}
2	$(0.32845, 0.00381)$	0.55927×10^{0}	0.20815×10^{1}
3	$(0.63413, 0.29092)$	0.25752×10^{0}	0.30512×10^{1}
4	$(0.64276, 0.41585)$	0.12769×10^{0}	0.78598×10^{0}
5	$(0.83666, 0.66037)$	0.42380×10^{-1}	0.12754×10^{1}
6	$(0.99543, 0.99483)$	0.17689×10^{-3}	0.18421×10^{0}
7	$(1.00116, 1.00249)$	0.16527×10^{-5}	0.58349×10^{-2}
8	$(0.99998, 0.99998)$	0.10160×10^{-8}	0.43471×10^{-3}
9	$(1.00000, 1.00000)$	0.54333×10^{-12}	0.33545×10^{-5}

制約つき問題の最適性条件

＜制約つき問題＞

目的関数：　$f(\boldsymbol{x}) \longrightarrow$ 最小

制約条件：　$c_i(\boldsymbol{x})=0 \quad (i=1,2,\cdots,l)$

$c_i(\boldsymbol{x}) \leqq 0 \ (i= l+1,\cdots,m)$

例）

目的関数：　$f(\boldsymbol{x})=(x_1-1)^2+(x_2-1)^2 \longrightarrow$ 最小

制約条件：　$c_1(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 2 \leqq 0$

$c_2(\boldsymbol{x}) = -x_1 + x_2 \leqq 0$

$c_3(\boldsymbol{x}) = -x_2 \leqq 0$

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{m} u_i^* \nabla c_i(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$$

$$\left.\begin{array}{ll} c_i(\boldsymbol{x}^*) = 0 & (i=1,2,\cdots,l) \\ \left.\begin{array}{l} c_i(\boldsymbol{x}^*) \leqq 0,\ \ u_i^* \geqq 0 \\ c_i(\boldsymbol{x}^*) < 0 \Rightarrow u_i^* = 0 \end{array}\right\} & (i = l+1,\cdots,m) \end{array}\right.$$

制約つき問題に対する最適性の**1次の必要条件**

キューン・タッカー条件

（カルーシュ・キューン・タッカー条件）

- 一般には最適性の十分条件ではない
- 凸計画問題に対しては（大域的）最適解

例）

目的関数： $f(\boldsymbol{x})=(x_1-1)^2+(x_2-1)^2 \longrightarrow$ 最小

制約条件： $c_1(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 2 \leqq 0$

$c_2(\boldsymbol{x}) = -x_1 + x_2 \leqq 0$

$c_3(\boldsymbol{x}) = -x_2 \leqq 0$

最適解$\boldsymbol{x}^* = (1,1)^T$

$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = (0,-2)^T$， $\nabla c_1(\boldsymbol{x}^*) = (2,2)^T$， $\nabla c_2(\boldsymbol{x}^*) = (-1,1)^T$

$u_i^* = 1/2$， $u_2^* = 1$ とすれば

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + u_1^* \nabla c_1(\boldsymbol{x}^*) + u_2^* \nabla c_2(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$$

＜制約つき問題の解法＞

制約なし問題に変換して，解を求める．

ペナルティ法

・制約条件の満足度を表す関数を新たに定義

・それを目的関数に加えた関数を最小化

例）

目的関数：　$f(x)=(x-2)^2 \longrightarrow$ 最小

制約条件：　$c_1(x) = x - 1 \leqq 0$

$c_2(x) = -x - 1 \leqq 0$

実行可能領域 S：閉区間[-1,1]

制約条件に対して

$$P_\rho(x)=\begin{cases}\rho(x-1), & x\geqq 1 \quad \text{のとき}\\ 0,\quad i=1 & -1\leqq x<1 \quad \text{のとき}\\ -\rho(x+1), & x<-1 \quad \text{のとき}\end{cases}$$

$F_\rho(x)= f(x) + P_\rho(x)$ ペナルティ関数

$$=\begin{cases}(x-2)^2+\rho(x-1), & x\geqq 1 \quad \text{のとき}\\ (x-2)^2, & -1\leqq x<1 \quad \text{のとき}\\ (x-2)^2-\rho(x+1), & x<-1 \quad \text{のとき}\end{cases}$$

＜一般の制約つき問題＞

$$P_\rho(x)=\rho\left(\sum_{i=1}^{l}|c_i(\boldsymbol{x})| + \sum_{i=l+1}^{m}\max\{0,\ c_i(\boldsymbol{x})\}\right)$$

$$F_\rho(x)= f(x) + P_\rho(x)$$

目的関数: $F_\rho(\boldsymbol{x}) \longrightarrow$ 最小

逐次2次計画法

＜逐次2次計画法＞

(0) 出発点$\boldsymbol{x}^{(0)}$と正定値対称行列$\mathrm{B}^{(0)}$を選び，k:=0 とおく.

(1) 下記の2次計画問題を解いて$(\boldsymbol{d}^{(k)}, \boldsymbol{v}^{(k)})$を求める.

$\boldsymbol{d}^{(k)} = \boldsymbol{0}$ ならば計算終了．さもなければステップ(2)へ.

(2) ステップ幅$\alpha^{(k)}$を求め，

$\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \boldsymbol{d}^{(k)} \qquad \boldsymbol{u}^{(k+1)} := \boldsymbol{v}^{(k)}$　とおく.

BFGS公式により行列$\mathrm{B}^{(k+1)}$を定める.

k:= k +1とおいてステップ(1)へ戻る.

目的関数：　$f(\boldsymbol{x}) = \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{d} + \frac{1}{2} \boldsymbol{d}^{\mathrm{T}} \mathrm{B}^{(k)} \boldsymbol{d} \longrightarrow$ 最小

制約条件：　$c_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) = \nabla c_i(\boldsymbol{x}^{(k)})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{d} = 0 \qquad (i = 1, 2, \cdots, l)$

$c_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) = \nabla c_i(\boldsymbol{x}^{(k)})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{d} \leqq 0 \qquad (i = l+1, \cdots, m)$