数値的最適化特論 2011 年 講義資料 (6)

２次計画問題と内点法

水野 眞治

東京工業大学 大学院社会理工学研究科 経営工学専攻

http://www.me.titech.ac.jp/~mizu_lab/text/

2011 年 6 月 27 日

概要

線形関数で表された制約条件をみたし，２次の目的関数を最小化する解を求める問題を２次計画問題といい，さらに目的関数が凸関数である場合に凸２次計画問題という．ここでは，凸２次計画問題の最適解がみたす必要十分条件を解説し，その後に，双対問題を導入し，線形計画問題の場合と同じように，弱双対定理と双対定理が成り立つことを示す．さらに，凸２次計画問題を解く主双対内点法のパス追跡アルゴリズムについても解説する．

1　２次計画問題

1.1　制約のない凸 2 次計画問題

制約のない 2 次計画問題は，2 次関数の最小化問題であり，

$$\text{最小化} \quad f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \tag{1}$$

と表される．ここで，n を自然数するとき，$\boldsymbol{Q} \in \mathcal{R}^{n\times n}$ が定数行列，$\boldsymbol{c} \in \mathcal{R}^n$ が定数ベクトル，$\boldsymbol{x} \in \mathcal{R}^n$ が変数ベクトルである．この問題に対して，次の仮定を置く．

仮定 1.1 正方行列 $\boldsymbol{Q}$ が対称である．

仮定 1.2 正方行列 $\boldsymbol{Q}$ が半正定値である，すなわち，任意の $\boldsymbol{x} \in \mathcal{R}^n$ に対して $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} \geq 0$ が成立する．

任意の n 次の正方行列 $\boldsymbol{A}$ に対して，対称行列を $\boldsymbol{Q} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^T)$ とすれば，

$$\forall \boldsymbol{x} \in \mathcal{R}^n, \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}$$

となるので，仮定 1.1 は一般に成立するとしてもよい．仮定 1.2 より，目的関数 $f(\boldsymbol{x})$ が凸関数となるので，問題 (1) を制約のない凸２次計画問題と呼ぶ．

補足説明 1.3 ここで，関数 $f : \mathcal{R}^n \to \mathcal{R}$ が**凸関数** (convex function) であるとは，任意の $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2 \in \mathcal{R}^n$ と $\theta \in [0, 1]$ に対して

$$f(\theta\boldsymbol{x}_1 + (1-\theta)\boldsymbol{x}_2) \leq \theta f(\boldsymbol{x}_1) + (1-\theta)f(\boldsymbol{x}_2)$$

が成立することをいう．関数 $f : \mathcal{R}^n \to \mathcal{R}$ が 2 回連続微分可能なとき，$\nabla^2 f$(ヘッセ行列) が任意の点で半正定値ならば f は凸関数である．

$\boldsymbol{x}^* \in \mathcal{R}^n$ が制約のない凸 2 次計画問題 (1) の最適解である必要十分条件は，関数 f の勾配ベクトルがゼロとなること，すなわち条件

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{c} = \boldsymbol{0} \tag{2}$$

が成り立つことである．

1.2 線形等式制約のみを持つ凸２次計画問題

線形の等式制約のみを持つ 2 次計画問題は,

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \end{array} \tag{3}$$

と表される．ここで，m と n を自然数するとき，$\boldsymbol{Q} \in \mathcal{R}^{n\times n}$ と $\boldsymbol{A} \in \mathcal{R}^{m\times n}$ が定数行列，$\boldsymbol{b} \in \mathcal{R}^m$ と $\boldsymbol{c} \in \mathcal{R}^n$ が定数ベクトル，$\boldsymbol{x} \in \mathcal{R}^n$ が変数ベクトルである．前節と同じように，仮定 1.1 と 1.2 が成り立つとする．このとき，問題 (3) を線形等式制約のみを持つ凸 2 次計画問題と呼ぶ.

定理 1.4 $\boldsymbol{x}^* \in \mathcal{R}^n$ が凸 2 次計画問題 (3) の最適解である必要十分条件は，ある $\boldsymbol{y}^* \in \mathcal{R}^m$ が存在し

$$\begin{array}{rcl} \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}^* & = & \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^* & = & \boldsymbol{b} \end{array} \tag{4}$$

が成り立つことである．

上の定理の条件 (4) にある第 1 式 $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{c} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}^*$ は，目的関数の勾配ベクトルが実行可能領域を表す面に直交していると解釈することができる．

1.3 凸２次計画問題の最適条件

線形計画問題の目的関数あるいは制約条件式に現れる線形関数を非線形関数に一般化したものを**非線形計画問題** (nonlinear programming problem) という．２次計画問題は，線形計画問題を除くと，最も単純な非線形計画問題であり，目的関数が 2 次関数で，制約式が線形の等式と不等式で表される次の問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1 \\ & \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b}_2 \end{array} \tag{5}$$

である．ここで，m_1，m_2，n を自然数とするとき，$\boldsymbol{Q} \in \mathcal{R}^{n\times n}$，$\boldsymbol{A}_1 \in \mathcal{R}^{m_1\times n}$，$\boldsymbol{A}_2 \in \mathcal{R}^{m_2\times n}$ が定数行列，$\boldsymbol{b}_1 \in \mathcal{R}^{m_1}$，$\boldsymbol{b}_2 \in \mathcal{R}^{m_2}$，$\boldsymbol{c} \in \mathcal{R}^n$ が定数ベクトル，$\boldsymbol{x} \in \mathcal{R}^n$ が変数ベクトルである．正方行列 $\boldsymbol{Q}$ が対称かつ半正定値であるとする．また，変数の一部に非負制約がある場合には，不等式 $\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b}_2$ の一部によって表されていると考えることにより，任意の 2 次計画問題がこの形 (5) に表現できる．

定理 1.5 $\boldsymbol{x}^* \in \mathcal{R}^n$ が凸 2 次計画問題 (5) の最適解となる必要十分条件は，ある $\boldsymbol{y}_1 \in \mathcal{R}^{m_1}$ と $\boldsymbol{y}_2 \in \mathcal{R}^{m_2}$ が存在し，条件

$$\begin{array}{l} \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}^* \geq \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{A}_1^T\boldsymbol{y}_1 + \boldsymbol{A}_2^T\boldsymbol{y}_2 = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{y}_2^T(\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}_2) = 0 \\ \boldsymbol{y}_2 \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{6}$$

が成立することである．

系 1.6 n 個の変数と m 個の等式制約を持つ標準形の凸 2 次計画問題は

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \end{array}$$

と表される．$\boldsymbol{x} \in \mathcal{R}^n$ がこの凸 2 次計画問題の最適解となる必要十分条件は，ある $\boldsymbol{y} \in \mathcal{R}^m$ と $\boldsymbol{z} \in \mathcal{R}^n$ が存在し，条件

$$\begin{array}{l} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{z} = 0 \\ \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0}, \boldsymbol{z} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{7}$$

が成立することである．

1.4 凸 2 次計画問題の双対問題と双対定理

凸 2 次計画問題 (5) を再掲すると

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1 \\ & \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b}_2 \end{array}$$

である．次の問題

$$\begin{array}{ll} \text{最大化} & \boldsymbol{b}_1^T\boldsymbol{y}_1 + \boldsymbol{b}_2^T\boldsymbol{y}_2 - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}_1^T\boldsymbol{y}_1 + \boldsymbol{A}_2^T\boldsymbol{y}_2 = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c} \\ & \boldsymbol{y}_2 \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{8}$$

を上の凸 2 次計画問題の双対問題という．このとき，元の問題を主問題という．最小化問題とするために (8) の目的関数に -1 を乗ずると凸関数となるので，(8) は，凸 2 次計画問題である．これより，標準形の凸 2 次計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{9}$$

の双対問題は

$$\begin{array}{ll} \text{最大化} & \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{y} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c} \\ & \boldsymbol{z} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{10}$$

となる．

定理 1.7 (弱双対定理) 凸 2 次計画問題 (5)の任意の実行可能解$\boldsymbol{x}$とその双対問題 (8) の任意の実行可能解 $(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2)$ に対して

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b}_1^T\boldsymbol{y}_1 + \boldsymbol{b}_2^T\boldsymbol{y}_2 - \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}')^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}'$$

が成立する．

線形計画問題の場合と同様に，弱双対定理からいくつかの性質が得られる．たとえば，凸 2 次計画問題 (5) の実行可能解と双対問題の実行可能解で目的関数値が等しければ，それぞれの問題の最適解である．

定理 1.8 (双対定理) $\boldsymbol{x}^*$ が凸 2 次計画問題 (5) の最適解ならば，ある $\boldsymbol{y}_1 \in \mathcal{R}^{m_1}$ と $\boldsymbol{y}_2 \in \mathcal{R}^{m_2}$ が存在し，$(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2)$ が双対問題 (8) の最適解となり，さらに双対問題 (8) の最適値と問題 (5) の最適値が等しい．

1.5 凸 2 次計画問題を解く主双対内点法

凸 2 次計画問題は，内点法で効率よく解くことができる．線形計画問題の場合と同様に，主問題を解く主内点法と主問題と双対問題を同時に解く主双対内点法がある．また，アルゴリズムとしても，線形計画問題の場合と同様に，パス追跡法，ポテンシャル減少法，アフィンスケーリング法などがある．ここでは，Monteiro and Adler [1] によって提案されたパス追跡法を初期の実行可能内点が既知であるという仮定のもとで解説する．そのような初期点が得られない場合には，線形計画問題のときと同様に，インフィージブル内点法を使うことができる．

標準形の凸 2 次計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{11}$$

とその双対問題

$$\begin{array}{ll} \text{最大化} & \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{y} - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c} \\ & \boldsymbol{z} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{12}$$

を解く内点法を解説する．これらの問題に対する最適条件

$$\begin{array}{l} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{X}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0}, \boldsymbol{z} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{13}$$

を満たす点 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$ を求める問題を主双対 2 次計画問題と呼ぶ．ここで，$\boldsymbol{X}$ は，ベクトル $\boldsymbol{x}$ の各成分を対角要素とする対角行列である．線形計画問題のときと同様に，$\boldsymbol{x} > \boldsymbol{0}$ かつ $\boldsymbol{z} > \boldsymbol{0}$ を満た

す点 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$ を問題 (13) の内点と呼び，さらに等式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ と $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}$ を満たす点 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$ を問題 (13) の実行可能内点と呼ぶ．ここで，次の仮定を置く．

仮定 1.9 問題 (13) の実行可能内点 $(\boldsymbol{x}^0, \boldsymbol{y}^0, \boldsymbol{z}^0)$ が既知である．

このとき，正の定数 $\mu > 0$ に対して，条件

$$\begin{array}{l} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{X}\boldsymbol{z} = \mu\boldsymbol{e} \\ \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0}, \boldsymbol{z} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{14}$$

を満たす点が唯一つ存在し，それを問題 (13) の解析的中心といい，$(\boldsymbol{x}(\mu), \boldsymbol{y}(\mu), \boldsymbol{z}(\mu))$ とあらわす．解析的中心の集合

$$P = \{(\boldsymbol{x}(\mu), \boldsymbol{y}(\mu), \boldsymbol{z}(\mu)) | \mu > 0\}$$

は，なめらかなパスとなり，中心パスと呼ばれる．

主双対内点法では，初期の実行可能内点から実行可能内点の列 $\{(\boldsymbol{x}^k, \boldsymbol{y}^k, \boldsymbol{z}^k)\}$ を生成する．したがって，k 反復目の実行可能内点 $(\boldsymbol{x}^k, \boldsymbol{y}^k, \boldsymbol{z}^k)$ が得られているという仮定のもと，次の点 $(\boldsymbol{x}^{k+1}, \boldsymbol{y}^{k+1}, \boldsymbol{z}^{k+1})$ の求め方を説明する．点 $(\boldsymbol{x}^k, \boldsymbol{y}^k, \boldsymbol{z}^k)$ において，$\mu_k = (\boldsymbol{x}^k)^T\boldsymbol{z}^k/n$ とし，定数 $\gamma \in (0, 1)$ に対して，

$$\mu = \gamma\mu_k$$

とする．この μ に対する解析的中心 $(\boldsymbol{x}(\mu), \boldsymbol{y}(\mu), \boldsymbol{z}(\mu))$ を求めるために，現在の点 $(\boldsymbol{x}^k, \boldsymbol{y}^k, \boldsymbol{z}^k)$ で方程式系 (14) にニュートン法を適用し，探索方向 $(\Delta\boldsymbol{x}, \Delta\boldsymbol{y}, \Delta\boldsymbol{z})$ を求める．それは，線形方程式系

$$\begin{array}{l} \boldsymbol{A}\Delta\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \\ -\boldsymbol{Q}\Delta\boldsymbol{x} + \boldsymbol{A}^T\Delta\boldsymbol{y} + \Delta\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{Z}_k\Delta\boldsymbol{x} + \boldsymbol{X}_k\Delta\boldsymbol{z} = -(\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{z}^k - \mu\boldsymbol{e}) \end{array} \tag{15}$$

の解である．ここで，$\boldsymbol{X}_k$ と $\boldsymbol{Z}_k$ は，それぞれベクトル $\boldsymbol{x}^k$ と $\boldsymbol{z}^k$ の各成分を対角要素とする対角行列を表す．この方程式系の解は，順に

$$\begin{array}{l} \Delta\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{A}(\boldsymbol{Z}_k + \boldsymbol{X}_k\boldsymbol{Q})^{-1}\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{A}^T)^{-1}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{Z}_k + \boldsymbol{X}_k\boldsymbol{Q})^{-1}(\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{z}^k - \mu\boldsymbol{e}) \\ \Delta\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{Z}_k + \boldsymbol{X}_k\boldsymbol{Q})^{-1}(\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{A}^T\Delta\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}_k\boldsymbol{z}^k + \mu\boldsymbol{e}) \\ \Delta\boldsymbol{z} = \boldsymbol{Q}\Delta\boldsymbol{x} - \boldsymbol{A}^T\Delta\boldsymbol{y} \end{array} \tag{16}$$

と表すことができる．ここで，$\boldsymbol{Q}$ が半正定値行列で，$\boldsymbol{X}_k$ と $\boldsymbol{Z}_k$ が対角な正定値行列であるので，行列 $\boldsymbol{Z}_k + \boldsymbol{X}_k\boldsymbol{Q}$ は逆行列を持つ．また，行列 $\boldsymbol{A}$ のランクが m であるならば，行列 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{Z}_k + \boldsymbol{X}_k\boldsymbol{Q})^{-1}\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{A}^T$ も逆行列を持つ．このようにして求めた探索方向にステップサイズ α を使って進み，次の点を

$$\begin{array}{l} \boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha\Delta\boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{y}^{k+1} = \boldsymbol{y}^k + \alpha\Delta\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{z}^{k+1} = \boldsymbol{z}^k + \alpha\Delta\boldsymbol{z} \end{array} \tag{17}$$

とする．ここでステップサイズの決め方には，線形計画問題の場合と同様に様々な方法がある．理論的な収束性を保証する場合には，中心パスの近傍 N を使い，その近傍内にとどまるようにステッ

プサイズを定める方法がある．また，実際に効率よいと言われている方法では，次の点が実行可能であるための最大のステップサイズ

$$\hat{\alpha} = \max\{\alpha | \boldsymbol{x}^k + \alpha \Delta \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0}, \boldsymbol{z}^k + \alpha \Delta \boldsymbol{z} \geq \boldsymbol{0}\}$$

と定数 $\lambda \in (0, 1)$ を使い，$\alpha = \lambda \hat{\alpha}$ としている．以上をまとめると，主双対パス追跡法は，次のようになる．

アルゴリズム 1.10 凸 2 次計画問題に対する主双対パス追跡法は，次のステップから成る．

ステップ 0　初期実行可能内点を $(\boldsymbol{x}^0, \boldsymbol{y}^0, \boldsymbol{z}^0)$，$\gamma \in (0, 1)$，$k = 0$ とする．

ステップ 1　点 $(\boldsymbol{x}^k, \boldsymbol{y}^k, \boldsymbol{z}^k)$ において，$\mu_k = (\boldsymbol{x}^k)^T \boldsymbol{z}^k / n$，$\mu = \gamma \mu_k$ とし，式 (16) により探索方向 $(\Delta \boldsymbol{x}, \Delta \boldsymbol{y}, \Delta \boldsymbol{z})$ を計算する．

ステップ 2　中心パスの近傍を使うなどして，ステップサイズ α を定め，式 (17) により，次の点 $(\boldsymbol{x}^{k+1}, \boldsymbol{y}^{k+1}, \boldsymbol{z}^{k+1})$ を求める．反復回数 k を 1 増加し，ステップ 1 へ戻る．

参考文献

[1] R. D. C. Monteiro and I. Adler, Interior path following primal-dual algorithms: Part II: Convex quadratic programming, *Mathematical Programming*, 44, 43–66, 1989.