

多変数関数, 最適化問題, 目的関数, 制約関数,
制約条件, 数理計画問題, 線形計画問題

補足資料 [1]

1 最適化問題

1.1 多変数関数

実数値多変数関数について考えてみる。まずは、関数とは何かから復習しよう。

一辺の長さが x である正方形の面積を y とすると、 $y = x^2$ という関係式が成立する。このように、2つの変数 x と y があって、 x の値を定めると、それに対応して y の値がただ一つ定まる時、 y は x の関数 (function) であるといい、 $y = f(x)$ で表す。中学校や高等学校では、これらの簡単な例として、次のような1次関数や2次関数を学習している。

$$f(x) = ax + b, \quad g(x) = ax^2 + bx + c$$

次に、正方形を長方形の場合にして考えてみる。各辺の長さが x と y である長方形の面積を z とすると、 $z = xy$ という関係式が成り立ち、 z は x と y の関数であることがわかる。このような関数を **2変数関数**といい、一般に $z = f(x, y)$ と表す。同様に、 z が $x_1, x_2, \dots, x_n$ の関数になっているとき **多変数関数**といい、 $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ と表す。例えば、2変数関数としての1次関数や2次関数は、

$$f(x, y) = c_1x + c_2y + d, \quad g(x, y) = a_1x^2 + 2bxy + a_2y^2 + c_1x + c_2y + d$$

となるが、ベクトルの内積 ($\langle \cdot, \cdot \rangle$) や行列の積を利用して次のようにも表せる。

$$f(x, y) = \left\langle \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right\rangle + d,$$

$$g(x, y) = \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & b \\ b & a_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \left\langle \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right\rangle + d.$$

さらに、 $\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$, $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} a_1 & b \\ b & a_2 \end{pmatrix}$ というように、ベクトルと行列の記号を

使って、次のように表すこともできる。ここで、 T は行列の転置記号である。

$$f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{c}, \mathbf{x} \rangle + d = \mathbf{c}^T \mathbf{x} + d, \quad g(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{c}^T \mathbf{x} + d.$$

ここで、 A は対称行列 ($A^T = A$) となっているが、もっと一般に、 $a_{12} + a_{21} = 2b$ となるような行列 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ を選んでも $g(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{c}^T \mathbf{x} + d$ と表せる。

2 次形式と 1 次形式

対称行列 A で表された $\mathbf{x}$ に関する 2 次式

$$\underbrace{\mathbf{x}^T A \mathbf{x}}_{\text{2 次形式}} + \underbrace{\mathbf{c}^T \mathbf{x}}_{\text{1 次形式}} + \underbrace{d}_{\text{定数項}}$$

において、2 次の項 $\mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ を **2 次形式** (quadratic form) といい、1 次の項 $\mathbf{c}^T \mathbf{x}$ を **1 次形式** (linear form) という。1 次形式だけからなる関数を線形関数 (linear function) と呼ぶ。

ここで、 n 変数の場合も同じように表すことができる。なお、 $3x^2 - 2xy + 3y^2$ のような展開された式も 2 次形式という。

1.2 最適化問題（数理計画問題）

以下の問題 (MP) を一般に**最適化問題** (optimization problem), または, **数理計画問題** (mathematical programming problem) という。通常は、(英語の命令文で) 「最小化せよ」は, “**Minimize**” と書くが, 短縮して “**Min**” と書いたりもする。また, 「最大化せよ」は, “**Maximize**” と書くが, 元の実数値関数を (-1) 倍することで, 「最小化せよ」に書き直すことができるので, 最小化問題だけを考えることで十分である。さらに, いくつかの条件を満足した上で最小化問題を考える時には, 「○○の条件の下で」あるいは「○○という制約の下で」を意味する “**subject to**” を, 最小化する関数の直後に書くが, 短縮して “**s.t.**” と表す¹。さらに, 先頭には問題の名前として, (MP) や (P) 等を書く。

$$\begin{array}{ll} \text{(MP)} & \text{Minimize } f(\mathbf{x}) \\ & \text{subject to } \mathbf{x} \in S. \end{array} \quad \text{あるいは} \quad \begin{array}{ll} \text{(P)} & \text{Min } f(\mathbf{x}) \\ & \text{s.t. } \mathbf{x} \in S. \end{array}$$

ここで, f は $\mathbf{x}$ を変数とする実数値関数で目的関数と呼ばれ, その変数 $\mathbf{x}$ の定義域は色々と考えることができる。1.1 節で取り上げた多変数関数を考える時には, その変数の数が n のとき, 定義域は $\mathbb{R}^n$ とすることが多い。この場合は, “ n 変数実数値関数” $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ を記号で $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ と表す。また, S は制約条件と呼ばれ, 変数 $\mathbf{x}$ の定義域の部分集合とすることが多い。つまり, $S \subset \mathbb{R}^n$ である。

次に, いくつかの関数によって制約条件 S が不等式や等式で表されている時 (これらの関数を制約関数と呼ぶ), つまり, 各制約関数 $g_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ と $h_j: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ によって,

$$S = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \left| \begin{array}{l} g_1(\mathbf{x}) \leq 0, \dots, g_m(\mathbf{x}) \leq 0, \\ h_1(\mathbf{x}) = 0, \dots, h_\ell(\mathbf{x}) = 0 \end{array} \right. \right\}$$

と表されているならば, 問題 (MP) は以下のように表され, **数理計画問題** と呼ばれる。さらに, それらの制約関数が線形関数とは限らないときには, **非線形計画問題** (Nonlinear Programming Problem) と呼ばれる。

$$\begin{array}{ll} \text{(MP)} & \text{Min } f(\mathbf{x}) \\ & \text{s.t. } \begin{array}{l} g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (i = 1, \dots, \ell) \\ h_j(\mathbf{x}) = 0 \quad (j = 1, \dots, m). \end{array} \end{array}$$

ここで, 目的関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ が線形関数で制約関数 $g_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ($i = 1, \dots, \ell$) および制約関数 $h_j: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ($j = 1, \dots, m$) が一次関数である場合を考察してみる。つまり,

¹ 数学の記号で, “**such that**” を短縮して, “**s.t.**” と表すこともあるので混同しないこと。

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n \in \mathbb{C},$$

$$h_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n - b_1$$

$$h_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n - b_2$$

• • • • •

$$h_m(x_1, x_2, \dots, x_n) = a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n - b_m$$

また、 $\ell = n$ で、 $g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = -x_i$ ($i = 1, \dots, n$) の場合 (変形すると、 $x_i \geq 0$ となるので、「変数が非負である」、あるいは、「非負条件がある」と呼ぶ) を考える。すると、数理計画問題 (MP) は、次のような形になる。

$$\begin{array}{ll}
 \text{(LP)} & \text{Min} \quad c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \\
 & \text{s.t.} \quad a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
 & \quad \quad a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\
 & \quad \quad \quad \vdots \\
 & \quad \quad a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \\
 & \quad \quad x_1 \geq 0, \dots, x_n \geq 0
 \end{array}$$

この形の問題を線形計画問題（Linear Programming Problem）と呼ばれ、英語の頭文字をとって、**(LP)** 問題ともいう。また、ベクトルや行列の積を使って、上記の問題 (LP) は以下の表記で表すことが可能である。

$$\begin{array}{ll} \text{(LP)} & \text{Min } \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ & \text{s.t. } \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \\ & \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{array}$$

ただし，ベクトルと行列はそれぞれ以下のように定める。

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

なお、 $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ の記号（ベクトルの大小記号）の意味については次のように考える。2つのベクトル $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して、次の大小関係を考える。

$$\begin{aligned} \mathbf{x} \geq \mathbf{y} &\iff x_i \geq y_i \quad \text{for } i = 1, \dots, n \\ \mathbf{x} > \mathbf{y} &\iff x_i > y_i \quad \text{for } i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

このとき、 $\mathbb{R}^n$ には、この大小関係で半順序が定まるといえる。 $x \geq y$ を $y \leq x$, $x > y$ を $y < x$ と表す。また、 $\mathbb{R}^n$ の 2 つのベクトルの内積に対して、次が成立する。

$$\begin{aligned} x \geq 0 \quad \text{かつ} \quad y \geq 0 &\implies x^T y \geq 0. \\ x \geq 0 \quad \text{かつ} \quad y \leq 0 &\implies x^T y \leq 0. \end{aligned}$$

$$x \geq 0 \quad \text{かつ} \quad x \neq 0 \quad \text{かつ} \quad y > 0 \implies x^T y > 0.$$