(Version: 2015/11/6)

KKT 方程式

柏木 雅英

1 KKT 方程式

$f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $g_i:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $h_j:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ とし、

$$
\begin{array}{rl}
\text{minimize:} & f(x) \quad \text{(目的関数)} \\
\text{subject to:} & g_i(x) \le 0 \quad (1 \le i \le m) \quad \text{(不等式制約)} \\
& h_j(x) = 0 \quad (1 \le j \le l) \quad \text{(等式制約)}
\end{array}
$$

のような最適化問題を考える。これに対して、この問題の解であるためのある種の条件として、次のカルシュ・クーン・タッカー (Karush-Kuhn-Tucker) 条件がよく知られている (例えば [1])。

$$
\begin{array}{l}
f'(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i'(x) + \sum_{j=1}^{l} \mu_j h'(x) = 0 \\
\lambda_i \ge 0, \quad g_i(x) \le 0, \quad \lambda_i g_i(x) = 0 \quad (1 \le i \le m) \\
h_j(x) = 0 \quad (1 \le j \le l)
\end{array}
$$

λ_i, μ_j はいわゆるラグランジュ乗数 (Lagrange multiplier) である。この条件と元の最適化問題との関係は複雑だが、例えば f, g_i が微分可能な凸関数で h_j がアフィン関数ならば、x が元の問題の最適解であることと x が KKT 条件を満たすことは同値であることが知られている。

この条件を元に解を精度保証付きで計算することを考える。このとき、不等式制約が邪魔なので、これを除去することを考える。例えば [2] では、次のような除去方法を用いている。関数 $\alpha^+(x), \alpha^-(x)$ を、次のように定義する。

$$
\begin{array}{rcl}
\alpha^+(x) & = & \max(0, x)^r \\
\alpha^-(x) & = & \max(0, -x)^r
\end{array}
$$

ここで r は非負整数である。$r = 1$ でも良いが折れ線となってしまい計算しづらいので、$r = 3$ くらいで滑らかさを確保するのが良さそう。

この関数を用いて、KKT 条件と同値な方程式を次のように作成する。

$$
\begin{aligned}
&f'(x) + \sum_{i=1}^{m} \alpha^+(\beta_i) g_i'(x) + \sum_{j=1}^{l} \mu_j h'(x) = 0 \\
&\alpha^-(\beta_i) + g_i(x) = 0 \quad (1 \leq i \leq m) \\
&h_j(x) = 0 \quad (1 \leq j \leq l)
\end{aligned}
$$

すなわち、λ_i と $g_i(x)$ のどちらかが 0 であるという相補性を表現するのに、β_i という変数を使って、$\beta_i \geq 0$ なら $g_i(x) = 0$ で $\lambda_i = \beta_i^r$、$\beta_i \leq 0$ なら $\lambda_i = 0$ で $g_i(x) = -(-\beta_i)^r$ という関係になっている。つまり β_i が正ならその不等式制約は有効 (active)、負なら無効 (inactive) である。この式は制約の無い $n + m + l$ 変数の非線形方程式になっているので、Krawczyk 法などを用いて精度保証出来る可能性がある。

2 例題1

$$
\begin{aligned}
\text{minimize:} \quad & (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 3)^2 + (x_3 - 4)^2 \\
\text{subject to:} \quad & x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1 \leq 0 \\
& 4x_1 + x_2 + 2x_3 - 2 = 0
\end{aligned}
$$

この問題に対する KKT 条件は、

$$
\begin{aligned}
&2(x_1 - 2) + 2\lambda_1 x_1 + 4\mu_1 = 0 \\
&2(x_2 - 3) + 2\lambda_1 x_2 + \mu_1 = 0 \\
&2(x_3 - 4) + 2\lambda_1 x_3 + 2\mu_1 = 0 \\
&\lambda_1 \geq 0, \quad x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1 \leq 0, \quad \lambda_1(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1) = 0 \\
&4x_1 + x_2 + 2x_3 - 2 = 0
\end{aligned}
$$

であり、KKT 方程式は

$$
\begin{aligned}
&2(x_1 - 2) + 2\alpha^+(\beta_1) x_1 + 4\mu_1 = 0 \\
&2(x_2 - 3) + 2\alpha^+(\beta_1) x_2 + \mu_1 = 0 \\
&2(x_3 - 4) + 2\alpha^+(\beta_1) x_3 + 2\mu_1 = 0 \\
&\alpha^-(\beta_1) + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1 = 0 \\
&4x_1 + x_2 + 2x_3 - 2 = 0
\end{aligned}
$$

となる。

α^+, α^- の r を $r=3$ とする。この方程式に対して Newton 法を実行したところ

$$
\begin{aligned}
x_1 &= -0.042942568928901338 \\
x_2 &= 0.64380803037857814 \\
x_3 &= 0.76398112266851359 \\
\beta_1 &= 1.4127165980054175 \\
\mu_1 &= 1.0820086014230621
\end{aligned}
$$

という近似解が得られ、Krawczyk 法を実行すると

$$
\begin{aligned}
x_1 &\in [-0.042942568928901602, -0.042942568928901039] \\
x_2 &\in [0.64380803037857692, 0.64380803037857948] \\
x_3 &\in [0.76398112266851248, 0.76398112266851459] \\
\beta_1 &\in [1.4127165980054161, 1.4127165980054189] \\
\mu_1 &\in [1.0820086014230609, 1.0820086014230633]
\end{aligned}
$$

のように精度保証された。

3　例題 2

線形計画問題にも適用可能なので、[3] の Example 1 に適用してみる。

$$
\begin{aligned}
\text{maximize:} \quad & 3x_1 + 2x_2 \\
\text{subject to:} \quad & -x_1 + 3x_2 \leq 12 \\
& x_1 + x_2 \leq 8 \\
& 2x_1 - x_2 \leq 10 \\
& x_1 \geq 0 \\
& x_2 \geq 0
\end{aligned}
$$

KKT 方程式を作って Newton 法を行うと、

$$
\begin{aligned}
x1 &= 6 \\
x2 &= 1.9999999999999998 \\
\beta_1 &= -2.2894284851066637 \\
\beta_2 &= 1.3263524026321305 \\
\beta_3 &= 0.69336127435063477 \\
\beta_4 &= -1.8171205928321397 \\
\beta_5 &= -1.2599210498948732
\end{aligned}
$$

という近似解が得られ、Krawczyk 法を実行すると

$$
\begin{aligned}
x_1 &\in [5.9999999999999982, 6.0000000000000018] \\
x_2 &\in [1.9999999999999991, 2.0000000000000014] \\
\beta_1 &\in [-2.2894284851066647, -2.2894284851066628] \\
\beta_2 &\in [1.3263524026321293, 1.3263524026321319] \\
\beta_3 &\in [0.69336127435063221, 0.69336127435063733] \\
\beta_4 &\in [-1.8171205928321402, -1.8171205928321392] \\
\beta_5 &\in [-1.2599210498948737, -1.2599210498948727]
\end{aligned}
$$

のように精度保証された。

(注意) 線形計画問題の場合 KKT 方程式に対して直接 Newton 法を適用すると極めて収束性が悪く、別の手段で近似解を得てから最後の精度保証の部分のみ Krawczk 法を使うべきであると思われる。

参考文献

[1] 福島 雅夫 : "非線形最適化の基礎", 朝倉書店 (2001).

[2] W. I. Zangwill, C. B. Garcia: "Equilibrium programming: The path following approach and dynamics", Mathematical Programming, Volume 21, Issue 1, pp 262-289 (1981).

[3] Shin'ichi Oishi and Kunio Tanabe: "Numerical Inclusion of Optimum Point for Linear Programming", JSIAM Letters Vol. 1, pp.5–8 (2009).