

対基底の理論と応用 (その5)

—KKT解法によるLP強相補最適解—

日大生産工 〇篠原 正明
情報システム研究所 篠原 健

1. はじめに

双対退化LPなどでは、強相補解が基底解として存在せず、従って、基底列挙法、単体法などの基底にもとづくアルゴリズムでは、強相補性を満たす最適解を求めることが困難である ([1]参照)。LPにおいては (適切に構成されたNLPでも、[2]参照)、強相補最適解が必ず存在することが知られており、「強相補最適解を定める活性制約式は、その定数パラメータ微小変動が最適値に影響を与える」という性格上、強相補最適解の求解は現実問題においても重要である (例えば、DEAのウェイト推定、等々)。

本論文では、KKT最適解の中に強相補最適解が存在する点に注目し、LP解にKKT解法を適用することにより、[1]の基底列挙法では困難であった強相補最適解を求めるアルゴリズムについて考察する。

2. LPのKKT条件

NLPに対するKKT条件については、[2]の2章「KKT条件」を参照し、以下にLPのKKT条件を説明する。

$$\text{LP : } z = \mathbf{c}^T \mathbf{x} \rightarrow \max \quad (1)$$

$$\mathbf{Ax} \leq \mathbf{b} \quad (2)$$

$$\mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (3)$$

[2]のNLP(1),(2)式の標準形に、上記LPを変形する。

$$\text{変形LP : } f(\mathbf{x}) = -\mathbf{c}^T \mathbf{x} \rightarrow \min \quad (4)$$

$$\mathbf{b} - \mathbf{Ax} \geq \mathbf{0} \quad (5)$$

$$\mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (6)$$

(5),(6)に対応する未定乗数ベクトルを $\mathbf{y}, \boldsymbol{\lambda}$ とすると、ラグランジュ関数 $L(\mathbf{x}; \mathbf{y}, \boldsymbol{\lambda})$ は(7)で与えられる。

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}; \mathbf{y}, \boldsymbol{\lambda}) &= f(\mathbf{x}) - \mathbf{y}^T (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x} \\ &= -\mathbf{c}^T \mathbf{x} - \mathbf{y}^T (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x} \end{aligned} \quad (7)$$

KKT条件は以下の通り。

$$L_{\mathbf{x}} = -\mathbf{c}^T + \mathbf{y}^T \mathbf{A} - \boldsymbol{\lambda}^T = \mathbf{0}^T \quad (8)$$

$$L_{\mathbf{y}} \leq \mathbf{0} \text{ より } \mathbf{b} - \mathbf{Ax} \geq \mathbf{0} \quad (9)$$

$$L_{\lambda_i} \leq \mathbf{0} \text{ より } \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (10)$$

$$\mathbf{y} \geq \mathbf{0} \quad (11)$$

$$\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0} \quad (12)$$

$$\mathbf{y}^T (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}) = 0 \quad (13)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{x} = 0 \quad (14)$$

$$(8) \text{より, } \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{A}^T \mathbf{y} - \mathbf{c} \quad (15)$$

(15)を(9)~(14)に代入すると、以下のKKT最適性条件(16)~(21)を得る。

$$\mathbf{Ax} \leq \mathbf{b} \quad (16)$$

$$\mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (17)$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{y} \geq \mathbf{c} \quad (18)$$

$$\mathbf{y} \geq \mathbf{0} \quad (19)$$

$$\mathbf{y}^T (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}) = 0 \quad (20)$$

$$\mathbf{x}^T (\mathbf{A}^T \mathbf{y} - \mathbf{c}) = 0 \quad (21)$$

3. KKT解法

[2]のNLP(1),(2)のKKT条件は以下(22)~(25)で与えられる。

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \sum \lambda_i \nabla g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (22)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) \geq \mathbf{0} \quad (23)$$

$$\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0} \quad (24)$$

$$\lambda_j g_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j=1, \dots, m \quad (25)$$

KKT条件(22)~(25)は、一般には非線形等号・不等号混合型連立方程式であり、以下の求解法が提案されている ([3]の第4章参照)

〔Ⅰ〕 未定乗数場合分け法

(a) $\lambda_j = 0$ と $\lambda_j > 0$ の場合 ($j=1, \dots, m$) に分岐する方法

(b) $\lambda_j = 0$ と $\lambda_j > 0$ の場合 ($j=1, \dots, m$) の組合せを列挙する方法

〔Ⅱ〕 制約式場合分け法

(a) $g_j(\mathbf{x}) = 0$ と $g_j(\mathbf{x}) > 0$ の場合 ($j=1, \dots, m$) に分岐する方法

(b) $g_j(\mathbf{x}) = 0$ と $g_j(\mathbf{x}) > 0$ の場合 ($j=1, \dots, m$) の組合せを列挙する方法

〔Ⅲ〕 未定乗数・制約式場合分け混合法

Ⅰ と Ⅱ を組み合わせた方法

〔Ⅰ a〕 の分枝限定法のイメージ図を図1に示す。文献[3]においては、〔Ⅰ b〕 の組合せ直接列挙法(explicit enumeration)に従って、KKT解法を説明した。図2には組合せ列挙法の解空間の構造を示す。この解空間に分枝限定法などを適用すれば、間接列挙法(implicit enumeration)になる。

例えば、状態(0 0 0)は「 $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 0, \lambda_3 = 0$ 」、状態(0 0 1)は「 $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 0, \lambda_3 > 0$ 」、状態(0 1 1)は「 $\lambda_1 = 0, \lambda_2 > 0, \lambda_3 > 0$ 」に対応する。

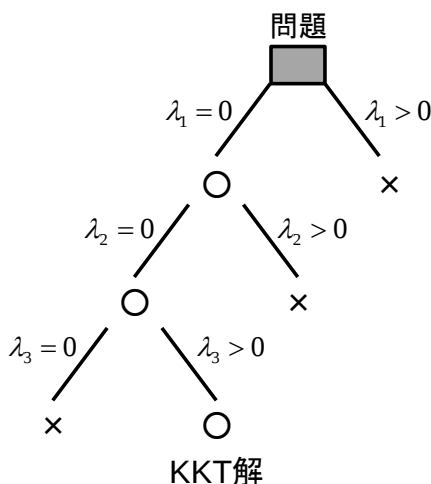


図1: $m=3$ 制約での乗数場合分け分枝限定法のイメージ図

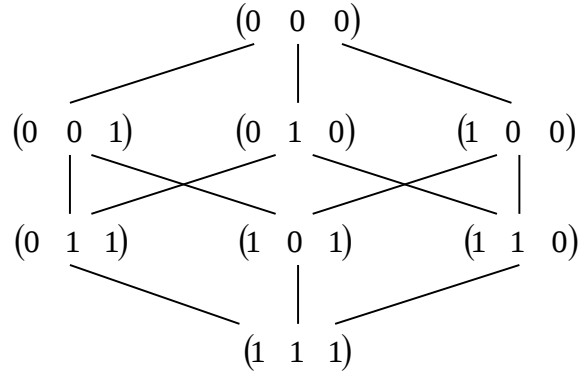


図2: $m=3$ 制約での乗数場合分けの解空間構造

4. KKT解法のLPへの適用

双対退化LPの例題に対して、2種類のKKT解法を適用することにより、いずれの場合も難易度の大小の差は存在するものの、強相補最適解が求まることを示す。なお、3章で説明した他のKKT解法でも同様に強相補最適解を求めることができるが、文献[1]に示した基底列挙法では強相補最適解は求めることが困難である。

〔双対退化のLPの例題〕

$$z = x_1 + 2x_2 \rightarrow \max \quad (26)$$

$$x_1 + 2x_2 \leq 2 \quad (27)$$

$$3x_1 + x_2 \leq 3 \quad (28)$$

$$x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0 \quad (29)$$

4.1. 制約式場合組合せ列挙法 (Ⅱb)

(27),(28),(29)の各不等式制約について、等号成立時と等号不成立時の場合 ($2^4 = 16$ 通り) について、KKT条件(16)~(21)の成立可否を調べる。

〔ケース1: $x_1 = 0, x_2 = 0, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 = 3$ 〕
解なし。

〔ケース2: $x_1 = 0, x_2 = 0, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 < 3$ 〕
解なし。

〔ケース3: $x_1 = 0, x_2 = 0, x_1 + 2x_2 < 2, 3x_1 + x_2 = 3$ 〕
解なし。

〔ケース4: $x_1 = 0, x_2 = 0, x_1 + 2x_2 < 2, 3x_1 + x_2 < 3$ 〕
 $y_1 = 0, y_2 = 0$ だが、 $y_1 + 3y_2 \geq 1, 2y_1 + y_2 \geq 2$ を満

足せず。

[ケース5: $x_1 = 0, x_2 > 0, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 = 3$]
解なし。

[ケース6: $x_1 = 0, x_2 > 0, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 < 3$]
 $y_1 + 3y_2 \geq 1, 2y_1 + y_2 = 2, y_1 \geq 0, y_2 \geq 0$ は、
「 $x_1 = 0, x_2 = 1, y_1 = 1, y_2 = 0$ 」のKKT解を持つ。

[ケース7: $x_1 = 0, x_2 > 0, x_1 + 2x_2 < 2, 3x_1 + x_2 = 3$]
解なし。

[ケース8: $x_1 = 0, x_2 > 0, x_1 + 2x_2 < 2, 3x_1 + x_2 < 3$]
 $y_1 + 3y_2 \geq 1, 2y_1 + y_2 = 2, y_1 \geq 0, y_2 = 0$ は矛盾。

[ケース9: $x_1 > 0, x_2 = 0, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 = 3$]
解なし。

[ケース10: $x_1 > 0, x_2 = 0, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 < 3$]
解なし。

[ケース11: $x_1 > 0, x_2 = 0, x_1 + 2x_2 < 2, 3x_1 + x_2 = 3$]
 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 \geq 2, y_1 = 0, y_2 \geq 0$ は矛盾。

[ケース12: $x_1 > 0, x_2 = 0, x_1 + 2x_2 < 2, 3x_1 + x_2 < 3$]
 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 \geq 2, y_1 = 0, y_2 = 0$ は矛盾。

[ケース13: $x_1 > 0, x_2 > 0, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 = 3$]
 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 = 2, y_1 \geq 0, y_2 \geq 0$ は、
「 $x_1 = 4/5, x_2 = 3/5, y_1 = 1, y_2 = 0$ 」のKKT解を持つ。
□。

[ケース14: $x_1 > 0, x_2 > 0, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 < 3$]
 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 = 2, y_1 \geq 0, y_2 = 0$ は、
「 $y_1 = 1, y_2 = 0$ 」を持ち、さらに「 $x_1 > 0, x_2 > 0, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 < 3$ 」の領域が「 $y_1 = 1, y_2 = 0$ 」と一緒にKKT解となる。

[ケース15: $x_1 > 0, x_2 > 0, x_1 + 2x_2 < 2, 3x_1 + x_2 = 3$]
 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 = 2, y_1 = 0, y_2 \geq 0$ は矛盾。

[ケース16: $x_1 > 0, x_2 > 0, x_1 + 2x_2 < 2, 3x_1 + x_2 < 3$]
 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 = 2, y_1 = 0, y_2 = 0$ は矛盾。

双対退化LPの図解を図3に示すが、ケース6のKKT解が端点I、ケース13が端点II、ケース14が辺(I, II)に対応している。ここで、端点I、IIは基底解であり強相補性不成立だが、辺(I, II) (両端点除く) 上の解が強相補最適解である。

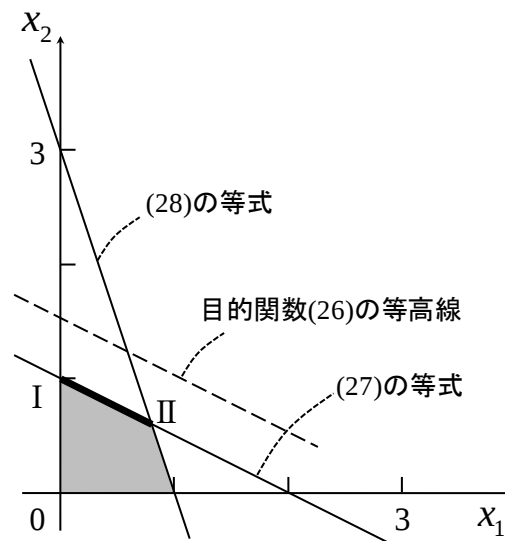


図3: 双対退化LPの図解

4.2. 変数(x, y) 場合組合せ列挙法 (Ⅲの一種)

x_1, x_2, y_1, y_2 の主変数、双対変数の各不等式制約について、零か正の場合 ($2^4 = 16$ 通り) について、KKT条件(16)~(21)の成立可否を調べる。

[ケース1: $x_1 = 0, x_2 = 0, y_1 = 0, y_2 = 0$]
 $y_1 + 3y_2 \geq 1, 2y_1 + y_2 \geq 2$ に矛盾。

[ケース2: $x_1 = 0, x_2 = 0, y_1 = 0, y_2 > 0$]
 $3x_1 + x_2 = 3$ に矛盾。

[ケース3: $x_1 = 0, x_2 = 0, y_1 > 0, y_2 = 0$]
 $x_1 + 2x_2 = 2$ に矛盾。

[ケース4: $x_1 = 0, x_2 = 0, y_1 > 0, y_2 > 0$]
 $x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 = 3$ に矛盾。

[ケース5: $x_1 = 0, x_2 > 0, y_1 = 0, y_2 = 0$]
 $2y_1 + y_2 = 2$ に矛盾。

[ケース6: $x_1 = 0, x_2 > 0, y_1 = 0, y_2 > 0$]
 $x_1 + 2x_2 \leq 2, 3x_1 + x_2 = 3$ に矛盾。

[ケース7: $x_1 = 0, x_2 > 0, y_1 > 0, y_2 = 0$]
 $x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 \leq 3, y_1 + 3y_2 \geq 1, 2y_1 + y_2 = 2$ は「 $x_1 = 0, x_2 > 0, y_1 = 1, y_2 = 0$ 」のKKT解を持つ。

[ケース8: $x_1 = 0, x_2 > 0, y_1 > 0, y_2 > 0$]
 解なし。

[ケース9: $x_1 > 0, x_2 = 0, y_1 = 0, y_2 = 0$]
 $y_1 + 3y_2 = 1$ に矛盾。

[ケース10: $x_1 > 0, x_2 = 0, y_1 = 0, y_2 > 0$]
 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 \geq 2$ に矛盾。

[ケース11: $x_1 > 0, x_2 = 0, y_1 > 0, y_2 = 0$]
 $x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 \leq 3$ に矛盾。

[ケース12: $x_1 > 0, x_2 = 0, y_1 > 0, y_2 > 0$]
 $x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 = 3$ に矛盾。

[ケース13: $x_1 > 0, x_2 > 0, y_1 = 0, y_2 = 0$]
 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 = 2$ に矛盾。

[ケース14: $x_1 > 0, x_2 > 0, y_1 = 0, y_2 > 0$]
 矛盾。

[ケース15: $x_1 > 0, x_2 > 0, y_1 > 0, y_2 = 0$]
 「 $x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 \leq 3, x_1 > 0, x_2 > 0, y_1 = 1, y_2 = 0$ 」のKKT解を持つ。

[ケース16: $x_1 > 0, x_2 > 0, y_1 > 0, y_2 > 0$]
 「 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 \geq 2, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 = 3$ 」より、「 $x_1 = 4/5, x_2 = 3/5, y_1 = 1, y_2 = 0$ 」を得るが、これはケース16の前提の $y_2 > 0$ と矛盾。
 解なし。

ケース7のKKT解が端点Ⅰ、ケース15が(両端点を除く) 辺(Ⅰ, Ⅱ)と端点Ⅱに対応している。ここで、ケース16では端点Ⅱに対応する解が計算過程では得られているが、ケース16の前提と矛盾しているので、結局はケース16は「解なし」である点に注意しよう。
 又、ケース15において、強相補性が成立する解(辺Ⅰ,

Ⅱ)と不成立の解(端点Ⅱ)が混在して得られた点も特徴的である。

5. おわりに

LPの強相補性最適解を含む最適解を求める系統的なアルゴリズムとして数種のKKT解法を例示した。
 なお、強相補性最適解のみを求めるならば、強制的に強相補性を満たすように場合分けすればよい。強制的に強相補性を課せば、4.1節のケース6は「 $y_1 + 3y_2 > 1, 2y_1 + y_2 = 2, y_1 \geq 0, y_2 = 0$ 」となり、「解なし」、ケース13も「 $y_1 + 3y_2 = 1, 2y_1 + y_2 = 2, y_1 > 0, y_2 > 0$ 」で、「解なし」となり、ケース14のみが強相補KKT解として残る。4.2節では、ケース7は「 $y_1 + 3y_2 > 1, 2y_1 + y_2 = 2, x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 < 3$ 」となり、「解なし」、ケース15も「 $x_1 + 2x_2 = 2, 3x_1 + x_2 < 3, x_1 > 0, x_2 > 0$ 」の強相補KKT解に変更される。なお、このアプローチはNLPに対しても適用できる。

4.1節のケース14ならびに4.2節のケース15のように、場合分けされた部分問題の連立方程式が、1点ではなく領域解を持つ場合もあるため、アルゴリズムの実装に当たっては、領域解の求解・表示法などが今後の課題となる。

参考文献

- [1] 篠原正明, 篠原健: 対基底の理論と応用 (その1) 一強相補性一, 第41回日本大学生産工学部 学術講演会 数理情報部会 講演概要(2008.12).
- [2] 篠原正明, 茂木渉: 非線形計画法におけるKKT条件・強相補性定理の幾何学, 第44回日本大学生産工学部 学術講演会 数理情報部会 講演概要 (2011.12).
- [3] 篠原正明: エクセル・数理計画法, 学部授業教材 (2011).