日本オペレーションズ・リサーチ学会
2022年 秋季研究発表会

標準DC 2次計画問題に対するKKT列挙法を導入した分枝限定法

01704732　新潟大学　*山田 修司　YAMADA Syuuji

1.　はじめに

本研究では標準DC 2次計画問題に対するKKT点列挙法及びパラメトリック最適化手法を用いた分枝限定法を提案する.

2.　標準DC 2次計画問題

次の標準DC 2次計画問題を考える.

$$(\mathrm{QDC})\begin{cases}\text{minimize} & \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}\\ \text{subject to} & g_i(\boldsymbol{x}) \le 0 \ i=1,\ldots,m\\ & h(\boldsymbol{x}) \ge 0,\ \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n.\end{cases}$$

ただし, $A_1,\ldots,A_m$ は $n\times n$ 次正定値対称行列, $\boldsymbol{w},\boldsymbol{b}^1,\ldots,\boldsymbol{b}^m\in\mathbb{R}^n$ ($\|\boldsymbol{w}\|=1$), $c_1,\ldots,c_m,r\in\mathbb{R}$ ($r>0$), $\boldsymbol{w}^\top$ は $\boldsymbol{w}$ の転置ベクトルとし,

$$\begin{aligned}&g_i(\boldsymbol{x}) := \boldsymbol{x}^\top A_i\boldsymbol{x} - (\boldsymbol{b}^i)^\top\boldsymbol{x} - c_i,\\ &h(\boldsymbol{x}) := \boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{x} - r^2\end{aligned}$$

とする. ここで,

$$\begin{aligned}&g(\boldsymbol{x}) := \max\{g_i(\boldsymbol{x}) : i=1,\ldots,m\},\\ &G := \{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n : g(\boldsymbol{x})\le 0\},\\ &H := \{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n : h(\boldsymbol{x})\ge 0\}\end{aligned}$$

とおく. このとき, (QDC) の制約集合は $G\backslash\operatorname{int}H$ を表される. ただし, $\operatorname{int}H$ は集合 H の内部集合を表す. 制約集合が空でないことを仮定すると, 関数 g_i の定義から G はコンパクトな凸集合となり, $G\backslash\operatorname{int}H$ はコンパクト集合となる. したがって, (QDC) には最適解が存在する. また, 次を仮定する.

(A) $\arg\min\{\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{x} : \boldsymbol{x}\in G\}\subset\operatorname{int}H$

仮定 (A) から $n\ge 2$ のとき, G, H の境界集合の共通部分上に (QDC) の大域的最適解が存在することがわかる. さらに, 次の定理が成立する.

定理 2.1

$$\alpha_0 := \min_{x\in G}\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{x} \le \min(\mathrm{QDC}) \le r$$

ただし, min(QDC) は問題 (QDC) の最適値を表す.

3.　最適性条件

任意の $\alpha\in[\alpha_0,r]$ に対して, 次の2次計画問題を考える.

$$\begin{cases}\text{minimize} & g(\boldsymbol{x})\\ \text{subject to} & h(\boldsymbol{x})=0,\\ & \boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{x}=\alpha.\end{cases}\tag{1}$$

ここで, 行列 $D\in\mathbb{R}^{n\times(n-1)}$ は次を満たすものとする.

- $D=(\boldsymbol{d}^1,\ldots,\boldsymbol{d}^{n-1})$ ($\boldsymbol{d}^i\in\mathbb{R}^n$, $i=1,\ldots,n-1$)
- $\|\boldsymbol{d}^i\|=1$ for all $i=1,\ldots,n-1$
- $\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{d}^i=0$ for all $i=1,\ldots,n-1$

このとき, $\boldsymbol{x}$ を $D\boldsymbol{y}+\alpha\boldsymbol{w}$ ($\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^{n-1}$) に置き換えることで, 問題 (1) は次のように変換できる.

$$(\mathrm{QP}(\alpha))\begin{cases}\text{minimize} & \bar{g}(\boldsymbol{y};\alpha)\\ \text{subject to} & \bar{h}(\boldsymbol{y};\alpha)=0,\end{cases}$$

ただし,

$$\begin{aligned}&\bar{g}(\boldsymbol{y};\alpha) := \max\{\bar{g}_i(\boldsymbol{y};\alpha) : i=1,\ldots,m\},\\ &\bar{g}_i(\boldsymbol{y}:\alpha) := \boldsymbol{y}\bar{A}_i\boldsymbol{y} - \left(\bar{\boldsymbol{b}}(\alpha)^i\right)^\top\boldsymbol{y} - \bar{c}_i(\alpha),\\ &\bar{h}(\boldsymbol{y};\alpha) := \boldsymbol{y}^\top\boldsymbol{y} - r(\alpha)^2,\\ &\bar{A}_i := D^\top A_i D,\\ &\bar{\boldsymbol{b}}(\alpha)^i := D^\top\boldsymbol{b}^i - 2\alpha D^\top A_i\boldsymbol{w},\\ &\bar{c}_i(\alpha) := c_i - \alpha^2\boldsymbol{w}^\top A_i\boldsymbol{w} + \alpha\left(\boldsymbol{b}^1\right)^\top\boldsymbol{w},\\ &r(\alpha) := \sqrt{r^2-\alpha^2}.\end{aligned}$$

その上, 次の定理が成立する.

定理 3.1 $\bar{\alpha}\in[\alpha_0,r]$ が次の条件 *(i),(ii)* の両方を満たし, $\bar{\boldsymbol{y}}$ は問題 (QP(α)) の最適解とする.

(i) $\min(\mathrm{QP}(\bar{\alpha}))=0$

(ii) $\min(\mathrm{QP}(\alpha))>0$ *for each* $\alpha\in]-r,\bar{\alpha}[$

このとき, $\bar{\alpha}$, $D\bar{\boldsymbol{y}}+\bar{\alpha}\boldsymbol{w}$ は問題 (QDC) の最適値, 最適解である.

単体 S を次のように定義する.

$$S := \left\{ \boldsymbol{s} \in \mathbb{R}^m : \sum_{i=1}^{m} s_i = 1,\ s_1, \ldots, s_m \geq 0 \right\}$$

このとき, $\bar{\boldsymbol{y}} \in \mathbb{R}^n$ が問題 (QP(α)) の最適解ならば, あるラグランジュ乗数 $\mu > 0$, $\boldsymbol{s} \in S$ が存在して次の KKT 条件が成立する.

(KKT1) $2\bar{A}(\boldsymbol{s})\bar{\boldsymbol{y}} - \bar{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{s}, \alpha) - 2\mu\bar{\boldsymbol{y}} = 0$

(KKT2) $\bar{h}(\bar{\boldsymbol{y}}; \alpha) = 0$

(KKT3) $s_i \bar{g}_i(\bar{\boldsymbol{y}}; \alpha) = 0,\ i = 1, \ldots, m$

ただし, $\bar{A}(\boldsymbol{s}) := \displaystyle\sum_{i=1}^{m} s_i \bar{A}_i$, $\bar{\boldsymbol{b}}(\bar{s}, \alpha) := \displaystyle\sum_{i=1}^{m} s_i \bar{\boldsymbol{b}}^i(\alpha)$.

$\bar{A}_i$ $(i = 1, \ldots, m)$ は正定値対称行列なので, 任意の $\boldsymbol{s} \in S$ に対して $\bar{A}(\boldsymbol{s})$ は $(n-1) \times (n-1)$ 正定値対称行列である. ここで, $\lambda_i(\boldsymbol{s}) \in \mathbb{R}$ $(i = 1, \ldots, n-1)$, $\boldsymbol{p}^i(\boldsymbol{s})$ $(i = 1, \ldots, n-1)$ は次の条件を満たすものとする.

$$\begin{aligned}
&\bar{A}(\boldsymbol{s})\boldsymbol{p}^i(\boldsymbol{s}) = \lambda_i(\boldsymbol{s})\boldsymbol{p}^i(\boldsymbol{s}),\ i = 1, \ldots, n-1, \\
&\|\boldsymbol{p}^i(\boldsymbol{s})\| = 1,\ i = 1, \ldots, n-1, \\
&\left(\boldsymbol{p}^i(\boldsymbol{s})\right)^\top \boldsymbol{p}^j(\boldsymbol{s}) = 0,\ i, j \in \{1, \ldots, n-1\}\ (i \neq j), \\
&0 < \lambda_1(\boldsymbol{s}) \leq \lambda_2(\boldsymbol{s}) \leq \cdots \leq \lambda_{n-1}(\boldsymbol{s}),
\end{aligned}$$

すなわち, $\lambda_i(\boldsymbol{s})$, $\boldsymbol{p}^i(\boldsymbol{s})$ は行列 $\bar{A}(\boldsymbol{s})$ の固有値と固有ベクトルである. ここで,

$$P(\boldsymbol{s}) := \left(\boldsymbol{p}^1(\boldsymbol{s}), \ldots, \boldsymbol{p}^{n-1}(\boldsymbol{s})\right) \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$$

とする. このとき, $P(\boldsymbol{s})$ は次を満たす直交行列である.

$$\begin{aligned}
&P(\boldsymbol{s})^\top \bar{A}(\boldsymbol{s}) P(\boldsymbol{s}) = \mathrm{diag}\left(\lambda_1(\boldsymbol{s}), \ldots, \lambda_{n-1}(\boldsymbol{s})\right) \\
&=: \Lambda(\boldsymbol{s})
\end{aligned}$$

$\boldsymbol{y}$ を $P(\boldsymbol{s})\boldsymbol{z}$ $(\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^{n-1})$ に置き換えることで KKT 条件は次のように書き換えられる.

(KKT1) $2\Lambda(\boldsymbol{s})\boldsymbol{z} - \hat{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{s}, \alpha) - 2\mu\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}_{n-1}$

(KKT2) $\boldsymbol{z}^\top \boldsymbol{z} - r(\alpha)^2 = 0$

(KKT3) $s_i \bar{g}_i(P(\boldsymbol{s})\boldsymbol{z}; \alpha) = 0,\ i = 1, \ldots, m$

ただし, $\hat{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{s}, \alpha) := P(\boldsymbol{s})^\top \bar{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{s}, \alpha)$.

4. KKT 点列挙法

任意の $\alpha \in [\alpha_0, r]$, $\boldsymbol{s} \in S$, $\boldsymbol{z}(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{n-1}$, $\psi(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を次のように定義する.

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{z}(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha) &:= \frac{1}{2}(\Lambda(\boldsymbol{s}) - \mu I_{n-1})^{-1}\hat{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{s}, \alpha), \\
\psi(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha) &:= \boldsymbol{z}(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha)^\top \boldsymbol{z}(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha) - r(\alpha)^2 \\
&= \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{n-1} \frac{\hat{b}_i(\boldsymbol{s}, \alpha)^2}{(\lambda_i(\boldsymbol{s}) - \mu)^2} - r(\alpha)^2
\end{aligned}$$

ただし, I_{n-1} は単位行列とする. 任意の $\mu \in \mathbb{R}$ に対して, $\boldsymbol{z}(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha)$ は 条件 (KKT1) を満たす. また, $\psi(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha) = 0$ が成立するならば, $\boldsymbol{z}(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha)$ は (KKT2) を満たす. さらに, $\mathbb{R} \backslash \{\lambda_1(\boldsymbol{s}), \ldots, \lambda_{n-1}(\boldsymbol{s})\}$ 上で, 関数 ψ の二階導関数 $\dfrac{d^2}{d\mu^2}\psi(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha)$ は次を満たす

$$\frac{d^2}{d\mu^2}\psi(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha) = \frac{3}{2}\sum_{i=1}^{n-1} \frac{\hat{b}_i(\boldsymbol{s}, \alpha)^2}{(\lambda_i(\boldsymbol{s}) - \mu)^4} > 0 \tag{2}$$

ここで, 線分 $T_i(\boldsymbol{s})$ $(i = 1, \ldots, n(\boldsymbol{s}))$ を次のように定義する.

$$\begin{aligned}
&T_1(\boldsymbol{s}) :=]-\infty, \hat{\lambda}_1(\boldsymbol{s})[, \\
&T_i(\boldsymbol{s}) :=]\hat{\lambda}_{i-1}(\boldsymbol{s}), \hat{\lambda}_i(\boldsymbol{s})[,\ i = 2, \ldots, n(s) - 1, \\
&T_{n(s)}(\boldsymbol{s}) :=]\lambda_{n-1}(\boldsymbol{s}), +\infty[.
\end{aligned}$$

ただし, $\hat{\lambda}_1(\boldsymbol{s}), \ldots, \hat{\lambda}_{n(s)-1}$ は次を満たす.

- 任意の $i \in \{1, \ldots, n-1\}$ に対して, ある $j \in \{1, \ldots, n(\boldsymbol{s}) - 1\}$ が存在して $\lambda_i(\boldsymbol{s}) = \hat{\lambda}_j(\boldsymbol{s})$ を満たす.
- $0 < \hat{\lambda}_1(\boldsymbol{s}) < \hat{\lambda}_2(\boldsymbol{s}) < \cdots < \hat{\lambda}_{n(s)-1}(\boldsymbol{s})$.

このとき, (2) から, 関数 $\psi(\mu; \boldsymbol{s}, \alpha)$ は $T_i(\boldsymbol{s})$ 上で狭義の凸関数であることがわかる. したがって, 問題 (QP(α)) の KKT 点は非線形方程式に対するニュートン法等を用いて求めることができる.

5. おわりに

ラグランジュ乗数 $\boldsymbol{s}$ の領域 S に対する分枝限定法と問題 (QP(α)) の KKT 点列挙法を組合わせることで, 問題 (QDC) の大域的最適解の近似解を求めることができる.

参考文献

[1] S. Yamada, T. Tanaka, and T. Tanino, Successive Search Methods for Solving a Canonical DC Programming Problem, Optimization 63(3), pp. 371–384 (2014)