1 Karush-Kuhn-Tucker 条件

次の制約つき最小化問題を考える．

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) = 0, \ \ i = 1, \ldots, \ell \\ & c_i(x) \le 0, \ \ i = \ell + 1, \ldots, m \end{aligned} \tag{1}$$

この問題の最適性の条件を与える前に，制約条件に関するいくつかの概念を定義しよう．不等式制約 $c_i(x) \ge 0$ が点 $x \in R^n$ において $c_i(x) = 0$ となるとき，その不等式制約は x で**効いている**という．効いている不等式制約の添字 i からなる集合 $A(x) = \{i \in \{\ell+1, \ldots, m\} \mid c_i(x) = 0\}$ を点 x における**有効集合**とよぶ．次に制約条件の“性質の良さ”を表す条件を定義する．

スレイター (Slater) の制約想定: 制約関数 $c_i, i = 1, \ldots, \ell$ は 1 次関数であり，$c_i, i = \ell+1, \ldots, m$ は凸関数である．さらに $c_i(x^0) = 0, i = 1, \ldots, \ell$ かつ $c_i(x^0) < 0, i = \ell+1, \ldots, m$ となる点 x^0 が存在する．

1 次独立制約想定: 実行可能解 x において，$\nabla c_i(x), i = 1, \ldots, \ell$ と $\nabla c_i(x), i \in A(x)$ は 1 次独立である．

制約想定は Constraint Qualification の日本語訳である．1 次独立制約想定は英語で Linearly Independent Constraint Qualification ということから，以下では **LICQ** と略すことにする．

スレイターの制約想定または LICQ が成り立つとき，問題 (1) の最適性の 1 次の必要条件は以下のように与えられる．

定理 1 点 x^* を問題 *(1)* の局所的最小解とする．スレイターの制約想定が成り立つか，あるいは x^* において *LICQ* が成り立つとき，次の等式と不等式を満たすベクトル $u^* \in R^m$ が存在する．

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} u_i^* \nabla c_i(x^*) = 0 \tag{2}$$

$$c_i(x^*) = 0, \ i = 1, \ldots, \ell \tag{3}$$

$$u_i^* \ge 0, \ \ c_i(x^*) \le 0, \ \ c_i(x^*) u_i^* = 0, \ \ i = \ell+1, \ldots, m \tag{4}$$

最適性の 1 次の必要条件 (2)-(4) を問題 (1) の **Karush-Kuhn-Tucker 条件**または **KKT 条件**とよぶ．(Karush, Kuhn, Tucker はこの条件を発見した研究者の名前である．) また条件 (4) を特に**相補性条件**とよぶ．KKT 条件を満たすベクトルの組 (x^*, u^*) を **KKT 点**とよぶ．

次に定義する関数 $L : R^{n+m} \to R$ を問題 (1) の**ラグランジュ関数**とよぶ．

$$L(x, u) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i c_i(x)$$

ラグランジュ関数を用いると，KKT 条件の (2) と (3) は

$$\nabla_x L(x^*, u^*) = 0,\ \ \nabla_u L(x^*, u^*) = 0$$

と書くことができる．u^* を**ラグランジュ乗数**とよぶ．

凸計画問題においては KKT 条件が最適性の十分条件になる．

定理 2 *f と $c_i, i = \ell + 1, \ldots, m$ は凸関数であり，$c_i, i = 1, \ldots, \ell$ は 1 次関数であるとする．そのとき，(x^*, u^*) が KKT 点であれば，x^* は問題 (1) の大域的最適解である．*

この定理より，凸計画問題では，KKT 点を求めることができれば，大域的最小解が得られる．

手計算による凸２次計画問題の解き方

手順 1: f, $c_i, i = 1, \ldots, m$ の勾配を計算する．

手順 2: KKT 条件を書く．

手順 3: 相補性条件 $(c_i(x)u_i = 0)$ を場合わけして考える．

例：不等式制約の数 $(m - \ell)$ が 2 のときは次の 4 つの場合になる．

$$c_{\ell+1}(x) \le 0,\ u_{\ell+1} = 0,\ c_{\ell+2}(x) \le 0, u_{\ell+2} = 0$$

$$c_{\ell+1}(x) \le 0,\ u_{\ell+1} = 0,\ c_{\ell+2}(x) = 0, u_{\ell+2} \ge 0$$

$$c_{\ell+1}(x) = 0,\ u_{\ell+1} \ge 0,\ c_{\ell+2}(x) \le 0, u_{\ell+2} = 0$$

$$c_{\ell+1}(x) = 0,\ u_{\ell+1} \ge 0,\ c_{\ell+2}(x) = 0, u_{\ell+2} \ge 0$$

一般に場合の数は $2^{m-\ell}$ である．

手順 4: 手順 3 の各場合に対して、KKT 条件をみたす (x^*, u^*) が存在するかどうか調べる．

手順 5: 手順 4 で KKT 条件を満たす点 (x^*, u^*) がみつかれば、その x^* が問題の解である．

次の問題を解いてみよう．

例題 1 *KKT* 条件を用いて，次の凸計画問題の大域的最小解を求めよ．

$$\begin{array}{ll} \min & x_1^2 + x_2^2 \\ \text{s.t.} & -x_1 - x_2 + 1 \leq 0 \end{array}$$

解答． この問題では $n = 2,\ \ell = 0,\ m = 1$ である．$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$, $c_1(x_1, x_2) = -x_1 - x_2 + 1$ とする．それぞれの勾配は

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{pmatrix},\ \ \nabla c(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

となるから，この問題の KKT 条件は

$$\begin{pmatrix} 2x_1^* - u_1^* \\ 2x_2^* - u_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$-x_1^* - x_2^* + 1 \leq 0,\ \ u_1^* \geq 0,\ \ u_1^*(-x_1^* - x_2^* + 1) = 0 \tag{6}$$

と書ける．

場合わけによる方法： 相補性条件 (6) より，次の 2 つの場合を考えればよい．

場合 1 ：$-x_1^* - x_2^* + 1 \leq 0$ かつ $u_1^* = 0$ のとき

$u_1^* = 0$ と式 (5) より，$x_1^* = x_2^* = 0$ となる．しかしながら，これは，$-x_1^* - x_2^* + 1 \leq 0$ に矛盾する．よって，この場合は KKT 点が存在しない．

場合 2：$-x_1^* - x_2^* + 1 = 0$ かつ $u_1^* \geq 0$ のとき

式 (5) より，$x_1^* = x_2^* = \frac{u_1^*}{2}$ である．これを $-x_1^* - x_2^* + 1 = 0$ に代入すると，$u_1^* = 1$ を得る．よって，$x_1^* = x_2^* = \frac{1}{2}$ となる．この $(x_1^*, x_2^*, u_1^*) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1)$ は KKT 条件を満たす．凸計画問題であるから，$(x_1^*, x_2^*) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ は大域的最適解である．

直接解く方法： この問題は簡単なので，以下のように直接解くこともできる．

式 (5) より，$x_1^* = x_2^* = \frac{u_1^*}{2}$ である．これを (6) に代入すると，

$$1 \leq u_1^*,\ \ u_1^* \geq 0,\ \ u_1^*(1 - u^*) = 0$$

となる．$u_1^* \geq 1$ であるから，3 番目の等式より $u_1^* = 1$ を得る．このとき，$(x_1^*, x_2^*, u_1^*) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1)$ となり，この点は KKT 条件を満たす．この問題は凸計画問題であるから，$(x_1^*, x_2^*) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ は大域的最適解である．