特別研究報告書

Karush-Kuhn-Tucker 条件とメリット関数を用いた準変分不等式問題の解法

指導教員　　福嶋雅夫　教授

京都大学工学部情報学科
数理工学コース
平成 21 年 4 月入学

西村　卓馬

平成 25 年 1 月 31 日提出

特別研究報告書

Karush-Kuhn-Tucker 条件とメリット関数を用いた
準変分不等式問題の解法

指導教員　　　福嶋雅夫　教授

京都大学工学部情報学科
数理工学コース
平成 21 年 4 月入学

西村　卓馬

平成 25 年 1 月 31 日提出

摘要

均衡問題の中で最も基本的なものの一つに変分不等式問題がある. 変分不等式問題に対する研究は長い歴史をもち, 理論的側面からも応用的側面からも様々な研究が行われてきた. 変分不等式問題をより拡張した問題に準変分不等式問題がある. しかしながら, 変分不等式問題とは違い, 準変分不等式問題に関する研究はこれまであまり行われておらず, 数値的に解くアルゴリズムについても, いくつかが提案されているに過ぎない.

本報告書では, 準変分不等式問題の KKT 条件から定義されるメリット関数を利用して準変分不等式問題の解を求める手法を提案する. また, 適切な条件下でメリット関数の停留点が準変分不等式問題の解になることを示す. さらに, メリット関数に対する降下法で生成する点列が適切な条件のもとで有界となることを示す. そして, KKT 条件から導かれる方程式系に対する一般化ニュートン法とメリット関数に対する降下法を組み合わせたアルゴリズムを提案する. 提案した手法を計算機上で実装し, 数値実験によって準変分不等式問題の解を求めた. 具体例に対してランダムに作成した多数の初期点から準変分不等式問題の解を計算したところ, 準変分不等式問題の解集合に含まれる様々な解が得られることを確認した.

目 次

1 序論

均衡問題の中で最も基本的なものの一つに変分不等式問題 (VIP:Variational Inequality Problem) があり, 経済や, 工学, オペレーションズ・リサーチなどの分野において大いに応用されている. 変分不等式問題の研究には長い歴史があり, これを解く手法についても広範囲にわたって研究が進められてきた [13]. 数値的な解法についても, Newton 法など効率的なアルゴリズムが提案されてきた [13].

一方, 変分不等式問題を拡張した問題の一つに準変分不等式問題がある. 準変分不等式問題は Bensoussan と Lions によって提案され [1-3], のちに様々な均衡問題をモデル化するのに強力なツールであることが明らかにされてきた. 準変分不等式問題の応用として一般化 Nash 均衡問題 [11], 経済学 [15], 力学 [4] などがある.

しかしながら, 準変分不等式問題の数値解法についての研究はこれまであまり行われておらず, ペナルティ関数を用いた変換により得られる変分不等式を反復して解く手法 [5], 障壁関数を用いた変換により得られる変分不等式を逐次的に解く手法 [8], 正則化ギャップ関数を用いて最適化問題に再定式化する手法 [9], Karush-Kuhn-Tucker 条件 (以下 KKT 条件と記す) を用いて方程式系に変換し, 内点法を適用する手法 [6] などが提案されているにすぎない.

本報告書では, 準変分不等式問題の KKT 条件から定義されるメリット関数を利用して準変分不等式問題の解を求める手法を提案する. 具体的には, 準変分不等式問題の KKT 条件をメリット関数を用いて無制約最小化問題に再定式化する. そしてメリット関数に対して一般化ニュートン法に基づく降下法を適用する. また, 適切な条件下でメリット関数の停留点が準変分不等式問題の解になることを示す. さらに, メリット関数に対する降下法で生成する点列が適切な条件のもとで有界となることを示す. そして, KKT 条件から導かれる方程式系に対する一般化ニュートン法とメリット関数に対する降下法を組み合わせたアルゴリズムを提案する. 提案した手法を用いて数値実験を行い, その有効性を検証する.

本報告書の構成を以下に記す. まず第 2 節では本報告書で扱う準変分不等式問題を定式化し, 準変分不等式問題の基本的な性質を述べる. 第 3 節では, 準変分不等式問題の KKT 条件について述べ, その基本的な性質を述べる. 第 4 節では準変分不等式問題の KKT 条件をメリット関数を用いて, 等価な最小化問題に再定式化する方法を述べる. 第 5 節では, 準変分不等式問題に対するメリット関数の停留点が適切な条件のもとで, 準変分不等式問題の解になることを示す. 第 6 節では, メリット関数に対する降下法で生成する点列が有界となるための条件について考察する. 第 7 節では, 準変分不等式問題に対する一般化ニュートン法と降下法を組み合わせたアルゴリズムを述べる. 第 8 節では, 数値実験の結果を報告する. 最後に第 9 節で結論を述べる.

2　準変分不等式問題

まず, 変分不等式問題を定義する. 空でない閉凸集合 $\hat{K} \subseteq \mathbb{R}^n$ とベクトル値写像 $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ に対して, 次の不等式を満たすベクトル $x \in \hat{K}$ を求める問題を変分不等式問題 (Variational Inequality Problem) という.

$$(y - x)^T F(x) \geq 0, \quad \forall y \in \hat{K} \tag{1}$$

変分不等式問題 (1) の解の存在について次の定理が知られている [10].

定理 2.1　F が連続で $\hat{K}$ がコンパクト集合ならば, 変分不等式問題 (1) は解をもつ.

変分不等式問題 (1) の解集合の性質についての定理を述べる前にベクトル値関数の単調性の概念を定義する.

定義 2.2

(a) 関数 F と空でない閉凸集合 $\hat{K}$ に対して, 次の式が成り立つとき F は $\hat{K}$ において単調であるという.

$$(x - y)^T [F(x) - F(y)] \geq 0, \quad \forall x,\ y \in \hat{K}$$

(b) 関数 F と空でない閉凸集合 $\hat{K}$ に対して, 次の式が成り立つとき F は $\hat{K}$ において狭義単調であるという.

$$(x - y)^T [F(x) - F(y)] > 0, \quad \forall x,\ y \in \hat{K},\ x \neq y$$

(c) 関数 F と空でない閉凸集合 $\hat{K}$ に対して, 次の式が成り立つとき F は $\hat{K}$ において係数 $\mu > 0$ の強単調であるという.

$$(x - y)^T [F(x) - F(y)] \geq \mu \|x - y\|^2, \quad \forall x,\ y \in \hat{K}$$

変分不等式問題 (1) の解集合に関してつぎの定理が知られている [10].

定理 2.3　F が連続で $\hat{K}$ において単調であれば, 変分不等式問題 (1) の解集合は閉凸集合であり, F が $\hat{K}$ において狭義単調であれば, 変分不等式問題 (1) の解は存在するならば唯一である. さらに, F が強単調であれば, 変分不等式問題 (1) は唯一の解をもつ.

次に準変分不等式問題を定義する. 変分不等式問題 (1) において, 閉凸集合 $\hat{K}$ が x に依存するとき, 準変分不等式問題 (Quasi-Variational Inequality Problem) という. すなわち準変分不

等式問題とは, 点-集合写像 $K : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ とベクトル値写像 $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ に対して, つぎの不等式を満たす $x \in K(x)$ を求める問題である.

$$(y-x)^T F(x) \geq 0, \quad \forall y \in K(x) \tag{2}$$

ここで, 点-集合写像の連続性を, 以下で定義する.

定義 2.4

(a) 点-集合写像 K が x において上半連続であるとは, 任意の $\epsilon > 0$ に対して x の開近傍 $\mathcal{N}$ が存在して

$$\bigcup_{y \in \mathcal{N}} K(y) \subseteq K(x) + \mathbb{B}(0, \epsilon)$$

が成立することである. ここで, $\mathbb{B}(0, \epsilon)$ は, 原点が中心で半径 $\epsilon > 0$ のユークリッド開球である.

(b) 点-集合写像 K が x において下半連続であるとは, $K(x) \cap \mathcal{U} \neq 0$ であるような任意の開集合 $\mathcal{U}$ に対して, x の開近傍 $\mathcal{N}$ が存在して

$$K(y) \cap \mathcal{U} \neq \phi, \quad \forall y \in \mathcal{N}$$

が成立することである.

(c) 点-集合写像 K が x において連続であるとは, 写像 K が点 x において上半連続かつ下半連続であることである.

(d) 点-集合写像 K が集合 T 上で連続であるとは, 点-集合写像 K が集合 $T \subseteq \mathbb{R}^n$ の任意の点において連続であることである.

準変分不等式問題 (2) の解の存在について次の定理が知られている [5].

定理 2.5　関数 F は連続であるとする. さらに次の (a), (b) を満たすコンパクトな凸集合 $T \neq \emptyset$ が存在するとする.

(a) 任意の $x \in T$ に対して $K(x)$ は空でない閉凸集合であり, $K(x) \subseteq T$ が成立する.

(b) 点-集合写像 K は, 集合 T 上で連続である.

このとき, 準変分不等式問題 (2) は解をもつ.

3　準変分不等式問題の KKT 条件

この節では, 準変分不等式問題の KKT 条件について述べる. まず, 点-集合写像 K は次式で与えられるものとする.

$$K(x) := \{y \in \mathbb{R}^n | g(y, x) \leq 0\} \tag{3}$$

ここで $g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ である. ベクトル値関数 g の第 i 成分関数を $g_i : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ とし, 以下の仮定を設ける.

仮定 3.1　任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対して, 関数 $g_i(\cdot, x)$, $i = 1, \ldots, m$, は連続的微分可能な凸関数である.

このとき, 準変分不等式問題 (2) に対する KKT 条件はある乗数ベクトル $\lambda \in \mathbb{R}^m$ を用いて次式で表される.

$$\begin{cases} F(x) + \nabla_y g(x, x)\lambda = 0 \\ \lambda \geq 0, \ g(x, x) \leq 0, \ \lambda^T g(x, x) = 0 \end{cases} \tag{4}$$

ここで $g(x, x) \leq 0$ は $x \in K(x)$ を意味している. (4) 式の KKT 条件は, 変分不等式問題に対する KKT 条件とも類似している. 準変分不等式問題の解と準変分不等式問題の KKT 条件との関係について以下の結果が示される.

定理 3.2　仮定 3.1 が成り立つとする. もし, ある点 x に対して, 乗数ベクトル λ が存在して KKT 条件 (4) が成り立つならば, x は準変分不等式問題 (2) の解である. 逆に, x が準変分不等式問題 (2) の解であり, 制約条件 $g(\cdot, x)$ が標準的な制約想定を満たすならば, ある乗数ベクトル λ が存在して, KKT 条件 (4) を満たす.

KKT 条件 (4) は, 本報告書において提案する準変分不等式問題を解くためのアプローチにおいて中心的な役割を果たす. 定理 3.2 より, KKT 条件を満たす (x, λ) を求めることは, 準変分不等式問題の解を求めることと等価になる. したがって, KKT 条件を満たす (x, λ) を求めることができれば, 準変分不等式問題の解が得られる.

4 準変分不等式問題に対するメリット関数

この節では, 準変分不等式問題の KKT 条件に基づくメリット関数を提案する. メリット関数とは, ある均衡問題に対して, 点 x が問題の解であれば $f(x) = 0$ となり, そうでなければ $f(x) > 0$ であるような拡張実数値関数 f のことをいう. メリット関数を用いたアプローチは, 最適化問題や変分不等式問題などで広く使われてきた. ここで, KKT 条件 (4) を再定式化するために, 次の性質を持つ関数 $\phi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ を考える.

$$\phi(a,b) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad a \geq 0,\ b \geq 0,\ ab = 0$$

このような性質を持つ関数を NCP 関数と呼ぶ. 関数 $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ と $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ を

$$\begin{aligned} L(x,\lambda) &:= F(x) + \nabla_y g(x,x)\lambda, \\ h(x) &:= g(x,x) \end{aligned}$$

と定義すると, KKT 条件 (4) は以下の方程式系に再定式化される.

$$\begin{aligned} L(x,\lambda) &= 0 \\ \Phi(x,\lambda) &= 0 \end{aligned}$$

ただし, $\Phi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ は次式で定義される.

$$\Phi(x,\lambda) := \begin{pmatrix} \phi(\lambda_1, -h_1(x)) \\ \vdots \\ \phi(\lambda_m, -h_m(x)) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m$$

NCP 関数として多くのタイプの関数が考えられてきた. なかでも有名な NCP 関数は二つ存在ある. 一つは $\phi(a,b) := \min\{a,b\}$ で定義される関数であり, もうひとつは

$$\phi(a,b) := (a+b) - \sqrt{a^2+b^2}$$

で定義される Fischer-Burmeister 関数である. Fischer-Burmerster 関数は他の NCP 関数に比べ多くの利点を持つことが知られているので [13], 本報告書でも NCP 関数 ϕ として, Fischer-Burmeister 関数を採用する.

以上より, KKT 条件 (4) を満たす (x,λ) を求める問題は次式で定義されるメリット関数 Θ :

$\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ を最小化する問題に再定式化できる.

$$\Theta(x,\lambda) := \frac{1}{2}\left\| \begin{pmatrix} L(x,\lambda) \\ \Phi(x,\lambda) \end{pmatrix} \right\|^2 \tag{5}$$

すなわち (x,λ) が準変分不等式問題 (2) の KKT 条件 (4) を満たすなら, $L(x,\lambda)=0, \Phi(x,\lambda)=0$ より明らかに $\Theta(x,\lambda)=0$ となり, それは制約なし最小化問題

$$\min_{(x,\lambda)\in\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m} \Theta(x,\lambda) \tag{6}$$

の大域的最適解である.

5　準変分不等式問題に対するメリット関数の停留点と大域的最適解

この節では, メリット関数 Θ の停留点がどのような条件を満たすときに準変分不等式問題の解になるかについて考察する. まず, メリット関数は (5) 式で定義した. ここで, ベクトル値関数 F の第 i 成分関数を $F_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 行列 $\nabla_y g(x,x)$ の (i,j) 成分を $\nabla_{y_i} g_j(x,x)$, ベクトル値関数 h の第 j 成分関数を $h_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ とし, 次の仮定を設ける.

仮定 5.1　関数 $F_i(x)$,$\nabla_{y_i} g_j(x,x)$,$h_j(x)$ $i=1,\ldots,\ n,\ j=1,\ldots,\ m$ は任意の $x\in\mathbb{R}^n$ において連続的微分可能である.

ベクトル値関数 Φ は, ある i に対して, $\lambda_i = -h_i(x) = 0$ を満たす点 (x,λ) において微分可能でない. しかし, メリット関数 Θ は連続的微分可能である. メリット関数 Θ の勾配は, 簡単な計算をすることにより以下の形であらわされる.

$$\nabla\Theta(x,\lambda) = \begin{pmatrix} \nabla_x L(x,\lambda)^T & \nabla_y g(x,x) \\ -D_h(x,\lambda)\nabla_x h(x)^T & D_\lambda(x,\lambda) \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} L(x,\lambda) \\ \Phi(x,\lambda) \end{pmatrix} \tag{7}$$

ただし, 行列 D_λ と D_h は以下の形であらわされる.

$$D_\lambda(x,\lambda) := \mathrm{diag}(a_1(x,\lambda_1),\ldots,a_m(x,\lambda_m))$$
$$D_h(x,\lambda) := \mathrm{diag}(b_1(x,\lambda_1),\ldots,b_m(x,\lambda_m))$$

さらに, $a_i(x,\lambda_i), b_i(x,\lambda_i)$ は任意の $i=1,\ldots,m$ に対して以下の形であらわされる.

$$
(a_i(x,\lambda_i), b_i(x,\lambda_i)) = \begin{cases} (1,1) - \frac{(\lambda_i, -h_i(x))}{\sqrt{(\lambda_i)^2 + h_i(x)^2}} & (\lambda_i, -h_i(x)) \neq (0,0) \text{ のとき} \\ (1-\xi, 1-\eta) & (\lambda_i, -h_i(x)) = (0,0) \text{ のとき} \end{cases}
$$

ただし, (ξ,η) は $\xi^2+\eta^2 \leq 1$ をみたす実数の対である.

ここで

$$
H = \begin{pmatrix} \nabla_x L(x,\lambda)^T & \nabla_y g(x,x) \\ -D_h(x,\lambda)\nabla_x h(x)^T & D_\lambda(x,\lambda) \end{pmatrix} \tag{8}
$$

とおくと, ある i に対して, $\lambda_i = -h_i(x) = 0$ のとき, 行列 H は一意に定まらない. しかし, ある i に対して, $\lambda_i = -h_i(x) = 0$ のとき, ベクトル値関数 Φ の第 i 成分の値が 0 になる. したがって, ある i に対して, $\lambda_i = -h_i(x) = 0$ のときでもメリット関数 Θ の勾配はベクトル値関数 Φ のゼロ成分を右からかけることにより一意に決まる.

(7) 式に基づくと, メリット関数 Θ の停留点が準変分不等式問題の解であるための十分条件を示すことができる.

定理 5.2　$(\overline{x},\overline{\lambda}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ が関数 Θ の停留点で, かつ $\nabla_x L(\overline{x},\overline{\lambda})^T$ が正則であるとする. このとき

$$
M(\overline{x},\overline{\lambda}) := \nabla_x h(\overline{x})^T (\nabla_x L(\overline{x},\overline{\lambda})^{-1})^T \nabla_y g(\overline{x},\overline{x})
$$

が P_0 行列ならば, $\overline{x}$ は準変分不等式問題の解である.

証明　$\overline{x},\overline{\lambda}$ がメリット関数 Θ の停留点であれば, 以下の等式が成り立つ.

$$
\nabla_x L(\overline{x},\overline{\lambda}) L(\overline{x},\overline{\lambda}) - \nabla_x h(\overline{x}) D_h(\overline{x},\overline{\lambda}) \Phi(\overline{x},\overline{\lambda}) = 0 \tag{9}
$$

$$
\nabla_y g(\overline{x},\overline{x})^T L(\overline{x},\overline{\lambda}) + D_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda}) \Phi(\overline{x},\overline{\lambda}) = 0 \tag{10}
$$

$\nabla_x L(\overline{x},\overline{\lambda})$ が正則であるから (9) 式より,

$$
L(\overline{x},\overline{\lambda}) = \nabla_x L(\overline{x},\overline{\lambda})^{-1} \nabla_x h(\overline{x}) D_h(\overline{x},\overline{\lambda}) \Phi(\overline{x},\overline{\lambda})
$$

が得られる. これを, (10) 式に代入して,

$$
\begin{aligned}
\nabla_y g(\overline{x},\overline{x})^T \nabla_x L(\overline{x},\overline{\lambda})^{-1} \nabla_x h(\overline{x}) D_h(\overline{x},\overline{\lambda}) \Phi(\overline{x},\overline{\lambda}) + D_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda}) \Phi(\overline{x},\overline{\lambda}) \\
= [M(\overline{x},\overline{\lambda})^T D_h(\overline{x},\overline{\lambda}) + D_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda})] \Phi(\overline{x},\overline{\lambda}) = 0
\end{aligned} \tag{11}
$$

が得られる. ここで, $a_i(\overline{x},\overline{\lambda_i}),\ b_i(\overline{x},\overline{\lambda_i})$ は非負であり, 任意の i に対して, $(a_i(\overline{x},\overline{\lambda_i}),\ b_i(\overline{x},\overline{\lambda_i})) \neq (0,0)$ である. もし, $D_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda}), D_h(\overline{x},\overline{\lambda})$ が正定値行列であれば, $M(\overline{x},\overline{\lambda})$ は P_0 行列なので,

$M(\overline{x},\overline{\lambda})^T D_h(\overline{x},\overline{\lambda}) + D_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda})$ は正則である [13]. したがって, $\Phi(\overline{x},\overline{\lambda}) = 0$ がいえる. 次に, $a_i(\overline{x},\overline{\lambda_i})$ と $b_i(\overline{x},\overline{\lambda_i})$ のいずれかが 0 になる場合を考える. $a_i(\overline{x},\overline{\lambda_i})$ と $b_i(\overline{x},\overline{\lambda_i})$ のいずれかが 0 になるのは, $\phi(\overline{\lambda_i}, -h_i(\overline{x})) = 0$ になるときに限られる. さて, 行列 $M(\overline{x},\overline{\lambda})^T$, $D_h(\overline{x},\overline{\lambda})$, $D_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda})$ に対して, $\phi(\overline{\lambda_i}, -h_i(\overline{x})) = 0$ となる任意の i について, i 番目の行と i 番目の列を取り除いて, 行列 $M'(\overline{x},\overline{\lambda})^T$, $D'_h(\overline{x},\overline{\lambda})$, $D'_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda})$ を構成する. 次に, $\phi(\overline{\lambda_i}, -h_i(\overline{x})) = 0$ となる任意の i について, i 行目の $\Phi(\overline{x},\overline{\lambda})$ を取り除いて, $\Phi'(\overline{x},\overline{\lambda})$ を構成する. このとき次の等式が成り立つ.

$$[M'(\overline{x},\overline{\lambda})^T D'_h(\overline{x},\overline{\lambda}) + D'_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda})]\Phi'(\overline{x},\overline{\lambda}) = 0$$

P_0 行列の主小行列も P_0 行列より, 行列 $M'(\overline{x},\overline{\lambda})^T$ も P_0 行列である. また行列 $D'_h(\overline{x},\overline{\lambda})$, $D'_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda})$ は正定値行列だから, $D_\lambda(\overline{x},\overline{\lambda}), D_h(\overline{x},\overline{\lambda})$ が正定値行列のときと同様の議論より, $\Phi'(\overline{x},\overline{\lambda}) = 0$ が成り立つ. 逆に $\Phi'(\overline{x},\overline{\lambda}) = 0$ が成り立つとき, $a_i(\overline{x},\overline{\lambda_i})$ と $b_i(\overline{x},\overline{\lambda_i})$ のいずれかが 0 になる場合でも (11) 式は成り立つ. したがって, 行列 $M(\overline{x},\overline{\lambda})$ が P_0 行列ならば, $\Phi(\overline{x},\overline{\lambda}) = 0$ がいえる. よって, (9) 式と $\nabla_x L(\overline{x},\overline{\lambda})$ の正則性より, $L(\overline{x},\overline{\lambda}) = 0$ がいえる.

以上より題意は示された.

■

ここで, 次の問題例 [14] を考える.

例 1　関数 $F : \mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}^4$, 点-集合写像 $K : \mathbb{R}^4 \rightrightarrows \mathbb{R}^4$ をそれぞれ次のように定義する.

$$F(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 - x_2 + 1 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 + 1 \\ -x_2 + 2x_3 - x_4 + 1 \\ -x_3 + 2x_4 + 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} K(x) = \{ y = (y_1, y_2, y_3, y_4)^T \in \mathbb{R}^4 | & - y_1 - 2x_1 + x_2 - 1.5 \le 0\ , -y_2 + x_1 - 2x_2 + x_3 - 1.5 \le 0, \\ & -y_3 + x_2 - 2x_3 + x_4 - 1.5 \le 0,\ -y_4 + x_3 - 2x_4 - 1.5 \le 0 \} \end{aligned}$$

この問題の場合,

$$
\begin{aligned}
L(x,\lambda) &= F(x) + \nabla_y g(x,x)\lambda \\
&= \begin{pmatrix} 2x_1 - x_2 + 1 - \lambda_1 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 + 1 - \lambda_2 \\ -x_2 + 2x_3 - x_4 + 1 - \lambda_3 \\ -x_3 + 2x_4 + 1 - \lambda_4 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

だから, $\nabla_x L(x,\lambda)^T$ は

$$
\nabla_x L(x,\lambda)^T = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}
$$

とあらわされ, これは (x,λ) によらず正則である. 従って行列 $M(x,\lambda)$ を求めると,

$$
\begin{aligned}
M(x,\lambda) &= \begin{pmatrix} -3 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -3 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.8 & 0.6 & 0.4 & 0.2 \\ 0.6 & 1.2 & 0.8 & 0.4 \\ 0.4 & 0.8 & 1.2 & 0.6 \\ 0.2 & 0.4 & 0.6 & 0.8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1.8 & 0.6 & 0.4 & 0.2 \\ 0.6 & 2.2 & 0.8 & 0.4 \\ 0.4 & 0.8 & 2.2 & 0.6 \\ 0.2 & 0.4 & 0.6 & 1.8 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

となる. $M(x,\lambda)$ の主小行列式はすべて 0 以上になるので, 行列 $M(x,\lambda)$ は P_0 行列である. よって定理 5.2 より, この例 1 の問題の場合, メリット関数 Θ の停留点はすべて準変分不等式問題 (2) の解になることが保証される.

6 有界条件

前節では, メリット関数 Θ の停留点が準変分不等式問題の解となるための十分条件を示した. さて, メリット関数の値を減少させる適切なアルゴリズムを使ったとしよう. このとき, それぞれの集積点はメリット関数 Θ の停留点であり, 適切な仮定のもとで, 準変分不等式問題 (2) の解である.

この節では, メリット関数に対する降下法で生成する点列が有界となるための条件について考察する.

ここで, 4 節で定義したベクトル値関数 h に対して次の集合 X を定義する.

$$X := \{x \in \mathbb{R}^n | h(x) \leq 0\}$$

集合 X は関数 h の仮定より閉集合である. さらに, 集合 X の有界性を仮定することにより, 点列 $\left\{x^k\right\}$ の有界性を示す.

定理 6.1　関数 h_j が各 $j = 1, \ldots m$ に対して凸関数で, かつ集合 X が空でない有界な集合であるとする. さらに, 点列 $\left\{(x^k, \lambda^k)\right\}$ が任意の $k \in \mathbb{N}$ に対して, $\Theta(x^k, \lambda^k) \leq \Theta(x^0, \lambda^0)$ を満たしているとする. このとき点列 $\left\{x^k\right\}$ は有界である.

証明　まず関数 $h_{\max}(x)$ を $h_{\max}(x) := \max\{h_1(x), \ldots, h_m(x)\}$ で定義する. 関数 $h_{\max}(x)$ は凸関数の最大値関数であるので, 関数 $h_{\max}(x)$ 自身もまた凸関数である. したがって任意の実数 $\gamma \in \mathbb{R}$ に対して, 以下の等価な関係が成り立つ

$$h_j(x) \leq \gamma \quad \forall j = 1, \ldots, m \Leftrightarrow \ h_{\max}(x) \leq \gamma$$

したがって, 集合 X は $X := \{x \in \mathbb{R}^n | h_{\max}(x) \leq 0\}$ と書きかえることができる. また, 関数 $h_{\max}(x)$ は一つの凸関数であるので, 集合 X の仮定と [16,Corollary8.7.1] より

$$X_\gamma := \{x \in \mathbb{R}^n | h_{\max}(x) \leq \gamma\} = \{x \in \mathbb{R}^n | h_j(x) \leq \gamma,\ \forall j = 1, \ldots, m\}$$

と定められる集合 X_γ もまた任意の $\gamma \in \mathbb{R}$ に対して有界である.

さて, 点列 $\left\{x^k\right\}$ が有界でない, すなわち $\|x^k\| \to \infty$ であるとする. 集合 X_γ は, 任意の $\gamma \in \mathbb{R}$ に対して有界であったので, 任意の $\gamma = k,\ k \in \mathbb{N}$ に対して, $x^{l(k)} \notin X_k$ となるような $l(k) \in \mathbb{N}$ が存在する. これは任意の $k \in \mathbb{N}$ に対して, $h_{j(k)}(x^{l(k)}) > k$ となるような $j(k) \in \{1, \ldots m\}$ と $l(k)$ が存在することを意味している.

さてこの事実に基づくと Fischer-Burmeister 関数の定義より 一般性を失うことなく, ある

$j \in \{1, \ldots, m\}$ に対して

$$\begin{aligned}\phi((\lambda^{l(k)})_j, -h_j(x^{l(k)})) &= (\lambda^{l(k)})_j - h_j(x^{l(k)}) - \sqrt{(h_j(x^{l(k)}))^2 + ((\lambda^{l(k)})_j)^2} \\ &\leq -h_j(x^{l(k)}) < -k\end{aligned}$$

が成り立つ.

以上より, $\Theta(x^{l(k)}, \lambda^{l(k)}) \geq \frac{1}{2}\phi((\lambda^{l(k)})_j, -h_j(x^{l(k)}))^2 > \frac{1}{2}k^2$ が得られる. したがって, $k \to \infty$ とすると $\Theta(x^{l(k)}, \lambda^{l(k)}) \to \infty$ を得る. ところがこれは $\Theta(x^k, \lambda^k) \leq \Theta(x^0, \lambda^0)$ に矛盾する. よって題意は示された.

■

ここで次の問題例を考える.

例 2　関数 $F : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$, 点-集合写像 $K : \mathbb{R}^2 \rightrightarrows \mathbb{R}^2$ がそれぞれ次のように与えられるとする.

$$F(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 + x_2 - 24.00 \\ x_1 + 2x_2 - 24.00 \end{pmatrix}$$

$$K(x) = \left\{ y = (y_1, y_2)^T \in \mathbb{R}^2 | 0 \leq y_1 \leq 11, 0 \leq y_2 \leq 11, y_1 + x_2 \leq 15, x_1 + y_2 \leq 15 \right\}$$

この問題の場合, ベクトル値関数 $h(x)$ は

$$h(x) = \begin{pmatrix} -x_1 \\ x_1 - 11 \\ x_1 + x_2 - 15 \\ -x_2 \\ x_2 - 11 \\ x_1 + x_2 - 15 \end{pmatrix}$$

で与えられる. 集合 X を

$$X = \left\{ x \in \mathbb{R}^2 \mid h(x) \leq 0 \right\}$$

とおくと, 集合 X は空でない有界な凸集合である. 従って, 任意の $k \in \mathbb{N}$ に対して, 点列 (x^k, λ^k) を $\Theta(x^k, \lambda^k) \leq \Theta(x^0, \lambda^0)$ を満たすようにとれば, 点列 $\left\{x^k\right\}$ は有界である.

7　アルゴリズム

この節では, メリット関数 Θ を用いて準変分不等式問題を解くアルゴリズムを提案する. 本報告書では一般化ニュートン法に基づく降下法を適用するものとする. 一般化ニュートン法とは, 必ずしも微分可能でない方程式系に対して, B 劣微分や一般化ヤコビ行列を導入することでニュートン法を適用できるように拡張した方法であり, 相補性問題などに応用されている [12].

さて， KKT 条件の再定式化に用いられるベクトル値関数 $G : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^{n+m}$ を

$$G(x, \lambda) := \begin{pmatrix} L(x, \lambda) \\ \Phi(x, \lambda) \end{pmatrix}$$

とおくと, ベクトル値関数 G に対して

$$G(x, \lambda) = 0 \tag{12}$$

となるような (x, λ) を求める必要がある.

方程式系 (12) に対する一般化ニュートン法では, 各反復においてニュートン方程式

$$H^k d = -G(x^k, \lambda^k) \tag{13}$$

を解いてベクトル

$$d^k = -(H^k)^{-1} G(x^k, \lambda^k)$$

を計算する. ただし, $H^k \in \partial_B G(x^k, \lambda^k)$ である. もし d^k が, メリット関数 $\Theta(x, \lambda)$ を十分減少させる方向であれば, d^k を探索方向として採用する. そうでなければ, 最急降下方向

$$d^k = -\nabla\Theta(x^k, \lambda^k)$$

を採用する. さらに, メリット関数 Θ に対する直線探索により適当なステップ幅 $t^k > 0$ を選択し, 次の反復点

$$x^{k+1} = x^k + t^k d_x^k,\ \lambda^{k+1} = \lambda^k + t^k d_\lambda^k$$

を生成する.

すなわち, 一般化ニュートン法は速い収束を実現するために可能な限り方程式系 (12) に対するニュートン方向を採用するとともに, ニュートン方向ではあまりメリット関数の値が減少しない場合には最急降下方向を利用する探索法である [13]. 提案する一般化ニュートン法のアルゴリズムの詳細を以下に示す.

アルゴリズム (一般化ニュートン法)

Step0: 初期点 x^0 と初期乗数ベクトル $\lambda^0 = 0$, パラメータ $\rho > 0$, $p > 1$, $\gamma \in (0,1)$, $\epsilon > 0$ を選ぶ.
$k := 0$ とする.

Step1: もし $\|\nabla\Theta(x^k, \lambda^k)\| < \epsilon$ ならば解を出力して終了.

Step2: $\beta \equiv \left\{i : \lambda_i^k = 0 = -h_i(x^k)\right\}$ とおく. $i \notin \beta$ に対して,

$$a_i = \left(1 - \frac{\lambda_i^k}{\sqrt{(\lambda_i^k)^2 + (h_i(x^k))^2}}\right), \quad b_i = \left(1 - \frac{-h_i(x^k)}{\sqrt{(\lambda_i^k)^2 + (h_i(x^k))^2}}\right)$$

と定め, $i \in \beta$ に対して $a_i = 1,\ b_i = 1$ と定める.

Step3:

$$H^k = \begin{pmatrix} \nabla_x L(x^k, \lambda^k)^T & \nabla_y g(x^k, x^k) \\ -D_h(x^k, \lambda^k)\nabla_x h(x^k)^T & D_\lambda(x^k, \lambda^k) \end{pmatrix}, \quad G(x^k, \lambda^k) = \begin{pmatrix} L(x^k, \lambda^k) \\ \Phi(x^k, \lambda^k) \end{pmatrix}$$

を計算する.

Step4: Newton 方程式

$$H^k d = -G(x^k, \lambda^k)$$

を解いて, 探索方向 d^k を求める. もし

$$\nabla\Theta(x^k, \lambda^k)^T d^k \leq -\rho\|d^k\|^p$$

が成立しないならば,

$$d^k = -\nabla\Theta(x^k, \lambda^k)$$

とする.

Step5: 不等式

$$\Theta((x^k, \lambda^k) + 2^{-i^k} d^k) \leq \Theta(x^k, \lambda^k) + \gamma 2^{-i^k} \nabla\Theta(x^k, \lambda^k)^T d^k$$

を満たす最小の非負整数 i^k を求めて $t^k := 2^{-i^k}$ とする.

Step6: $x^{k+1} := x^k + t^k d_x^k,\ \lambda^{k+1} = \lambda^k + t^k d_\lambda^k$, $k := k+1$ として Step1 へ戻る.

8　数値実験

この節では, 準変分不等式問題の具体例に対して前節で提案したアルゴリズムを適用した数値実験の結果を報告する. 実験では, 関数 $F:\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$, 点-集合写像 $K:\mathbb{R}^2 \rightrightarrows \mathbb{R}^2$ はそれぞれ

$$F(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 + x_2 - 24.00 \\ x_1 + 2x_2 - 24.00 \end{pmatrix}$$

$$K(x) = \left\{ y = (y_1, y_2)^T \in \mathbb{R}^2 | 0 \le y_1 \le 11, 0 \le y_2 \le 11, y_1 + x_2 \le 15, x_1 + y_2 \le 15 \right\}$$

とした. なお, この問題の解集合は

$$\left\{ (x_1, x_2)^T | x_1 = t, x_2 = 15 - t, t \in [6, 9] \right\}$$

と表される.

数値実験では, CPU が 2.26GHz の計算機を用い, アルゴリズムは MATLAB7.10.0 上で実装した.

初期値 (x^0, λ^0) は x^0 の各成分を区間 (0,15) の一様乱数で生成し, 初期乗数ベクトル λ^0 の各成分を 0 とした. 一般化ニュートン法のパラメータを

$$\rho = 100,\ p = 2.1,\ \gamma = 10^{-4},\ \epsilon = 10^{-7}$$

とした.

初期点を 1000 回作成し, アルゴリズムを適用したところ 1000 回すべてで解を得た. 得られた解を x_1 を横軸, x_2 を縦軸にプロットしたものが図 1 である.

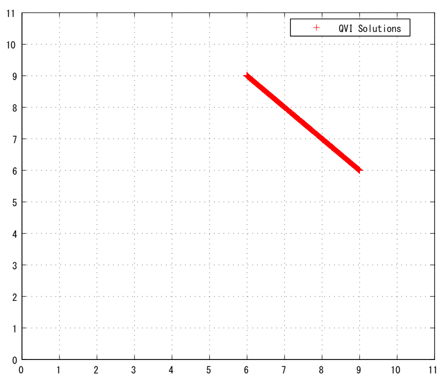

図 1: 提案アルゴリズムで得られた解

図 1 を見てみると, 多数の初期点をランダムに作成した場合, 準変分不等式問題の解集合上に広く分布する解が得られたことがわかる. また, メリット関数最小化問題 (6) の大域的最適解でない局所最適解に収束したものは一つもなく, すべて何らかの大域的最適解に収束した.

さて, この問題について, $L(x,\lambda)$ を計算すると,

$$\begin{aligned} L(x,\lambda) &= F(x) + \nabla_y g(x,x)\lambda \\ &= \begin{pmatrix} 2x_1 + x_2 - 24.00 - \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \\ x_1 + 2x_2 - 24.00 - \lambda_4 + \lambda_5 + \lambda_6 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

であるから, $\nabla_x L(x,\lambda)^T$ は

$$\nabla_x L(x,\lambda)^T = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

とあらわされ, これは (x,λ) によらず正則である. 従って $M(x,\lambda)$ を求めると,

$$\begin{aligned} M(x,\lambda) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & -1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる. $M(x,\lambda)$ の主小行列式はすべて 0 以上になるので, 行列 $M(x,\lambda)$ は P_0 行列である. よって定理 5.2 より, この問題の場合, メリット関数 Θ の停留点はすべて準変分不等式問題 (2) の解になることが保証される. 実際, 実験結果はメリット関数 Θ の停留点がすべて準変分不等式問題 (2) の解になることを数値的に実証している.

9 結論

本報告書では, 準変分不等式問題の KKT 条件を満たす解を求める問題をメリット関数を用いて最小化問題に再定式化した. 次に, メリット関数の停留点が適切な仮定の下で準変分不等式問題の解になることを示した. さらに, メリット関数に対する降下法で生成する点列が適切な仮定の下で有界なることを示した. そして, KKT 条件から導かれる方程式系に対する一般化ニュートン法とメリット関数に対する降下法を組み合わせたアルゴリズムを提案した.

提案したアルゴリズムを計算機上で実装し, 数値実験によって準変分不等式問題の解を求めた. 具体例に対して, ランダムに生成した多数の初期点から準変分不等式問題の解を計算した. 提案した手法で, 準変分不等式問題の解集合に含まれる様々な解が得られることを確認した.

謝辞

日頃から御教授くださり，本報告書の作成にあたっては細部に至るまで様々な御指摘と適切な御指導を頂いた福嶋雅夫教授に深く感謝の意を表します．また，日頃よりお世話になっている山下信雄准教授, 林俊介助教, ならびに本研究を進めるに当たり数々の助言を頂いた博士課程の奥野貴之さんをはじめとする福嶋研究室の皆様に厚く御礼申し上げます.

参考文献

[1] A. Bensoussan, J.J. Lions, *Contrôle impulsionnel et inéquations quasi-variationnelles stationnaires*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. A 276, pp.1279-1284, 1973.

[2] A. Bensoussan, J.J. Lions, *Nouvelle formulation de problèmes de contrôle impulsionnel et applications*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. A 276, pp.1189-1192, 1973.

[3] A. Bensoussan, J.J. Lions, *Nouvelle méthodes en contrôle impulsionnel*, Appl. Math. Optim. 1, pp.289-312, 1975.

[4] C. Baiocchi, A. Capelo, *Variational and Quasi-Variational Inequalities. Applications to Free Boundary Problems*, Wiley, New York, 1984.

[5] J.-S Pang, M. Fukushima, *Quasi-variational inequalities, generalized Nash equilibria, and multi-leader-follower games*, Comput. Manag. Sci. 2, pp.21-56, 2005.

[6] F. Facchinei, C. Kanzow, S. Sagratella, *Soling quasi-variational inequalities via their KKT-conditions*, Preprint305, Institute of Mathematics, University of Würzburg, Würzburg, Germany, January 2012.

[7] A. Dreves, F. Facchinei, C. Kanzow, S. Sagratella, *On the solution of the KKT conditions of generalized Nash equilibrium problems*, SIAM J. Optim. 21, pp.1082-1108, 2011.

[8] 鍋谷 昴一, 準変分不等式問題に対する内点ペナルティ法と一般化 Nash 均衡問題への応用, 京都大学工学部情報学科数理工学コース 特別研究報告書, 2006 年 1 月.

[9] 久保田 雄統, 準変分不等式に対するギャップ関数と一般化 Nash 均衡問題への応用, 京都大学工学部情報学科数理工学コース 特別研究報告書, 2007 年 1 月.

[10] 福島雅夫, 非線形最適化の基礎, 朝倉書店, 2001.

[11] P. T. Harker, *Generalized Nash games and quasi-variational inequalities*, Eur. J. Oper. Res. 54, pp.81-94, 1991.

[12] T. De Luca, F. Facchinei, C. Kanzow, *A semismooth equation approach to the solution of nonlinear complementarity problems* Math. Program. 75 pp.407-439, 1996.

[13] F. Facchinei, J.-S Pang, *Finite-Dimentional Variational Inequalities and Complementarity Problems*, Springer, New York, 2003.

[14] J.V. Outrata, J. Zowe, *A Newton method for a class of quasi-variational inequalities*, Comput. Optim. Appl. 4, pp.5-21, 1995.

[15] T. Ichiishi, *Game Theory for Economic Analysis*, Academic Press, New York, 1983.

[16] R.T. Rockafellar, *Convex Analysis*, Princeton University Press, Princeton, 1970.