

群馬大学 正員 平田恭久
東京都立大学 正員 伊藤文人

1. 等式制約探索法の考え方

筆者らは以前から等式制約探索法と称する活性でかつ有利な制約面上で最適解を探索する方法について研究を進めてきたが、この方法と双対問題の解法との関連について以下の考察を行った。

等式制約探索法の考え方は次のとおりである。不等式制約付き最小化問題(1)式について変数、制約式を(2)式のように分ける。活性でかつ有利な制約面上で最適解を探索するため m 個の等式制約 g_m 及び制約変数 x_m を選び、 $g_m(x) = 0$ より制約変数 x_m の値を定め探索変数 x_e で最小値を探索する。このとき等式制約が具備すべき条件は(3)式であり、探索を進めていくにつれ(3)式を満足する等式制約は変化するので制約式及び変数の入れ換えが必要になる。Lagrange 関数 $L(x, \lambda) = f(x) + \lambda_m^T g_m(x)$ について Lagrange 乗数 λ_m (双対変数) を(4)式のように定めると $L(x, \lambda)$ は(5)式になり、活性でかつ有利な制約面上での $L(x, \lambda)$ は $f(x)$ に等しい。次に $L(x, \lambda)$ の x による微分は(6)式であり、(6)式第2項は等式制約に関するもののみになっている。(6)式を制約変数と探索変数とによる微分に分け、制約変数 x_m による微分について(7)式が成立するように λ_m を定め、探索変数 x_e による微分について(8)式が成立するような探索方向ベクトル Δx_e を求め探索を行う。なお Δx_e は(9)式より得られる。探索により(8)式が成立すると最適解であるための Kuhn-Tucker 必要条件(10)式を満足している。

2. 主問題及び双対問題の解法

主問題とその双対問題は(11)、(12)式で表わされる。鞍点が存在するならば鞍点 (x^*, λ^*) は(13)式を解くことにより得られる。(13)式より鞍点が存在するならば主問題の解=双対問題の解である。

1) 主問題を解くには(13)式の左辺について最初に $\max_{x \geq 0} L(x, \lambda)$ を行うが $\max_{x \geq 0} L(x, \lambda)$ となるような $g_i(x)$ と λ_i の組合せは(14)式になる。

$L(x, \lambda)$ は λ に関して線形であるので $\max_{x \geq 0} L(x, \lambda)$ となる λ を定めることはできないが、(14)式は $\max_{x \geq 0} L(x, \lambda)$ を満足するような $g_i(x)$ と λ_i の条件を与える。(14)式第2行と第3行は $\lambda_i^T g_i(x) = 0$ を意味しているので $L(x, \lambda) = f(x) + \lambda_i^T g_i(x) = f(x)$ になる。これと(14)式第1行の $g_i(x) \leq 0$ を合わせると $\max_{x \geq 0} L(x, \lambda)$ は制約式 $g_i(x) \leq 0$ 付きの $f(x)$ であり、これは(11)式の主問題である。

2) 双対問題を解くには(13)式の右辺について最初に $\min_{\lambda \geq 0} L(x, \lambda)$ を行うが、これは(15)式に示す双対関数 $\phi(\lambda)$ である。双対関数で

$$\begin{aligned} \min_x f(x) \quad & x: n \text{ 個の変数} \\ \text{subj. to } g_m(x) \leq 0 \quad & g_m: M \text{ 個の制約式} \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \text{制約変数 } x_m: m \text{ 個} \\ \text{探索変数 } x_e: n-m \text{ 個} \\ \text{等号で満足 } g_m(x) = 0: m \text{ 個} \\ \text{不等号で満足 } g_{M-m}(x) < 0: M-m \text{ 個} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \text{他の制約式に抵触しない: } g_{M-m}(x) < 0 \\ \text{有利な制約面: } \lambda_m \geq 0 \\ g_m(x) = 0 \text{ の解が存在: } \frac{\partial g_m}{\partial x_m} \text{ の rank} = m \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} g_m(x) = 0 \text{ では } \lambda_m \geq 0: m \text{ 個} \\ g_{M-m}(x) < 0 \text{ では } \lambda_{M-m} = 0: M-m \text{ 個} \end{aligned} \quad (4)$$

$$L(x, \lambda) = f(x) + \underbrace{\lambda_m^T}_{\text{IV}} \underbrace{g_m(x)}_0 + \underbrace{\lambda_{M-m}^T}_{\text{IV}} \underbrace{g_{M-m}(x)}_0 = f(x) \quad (5)$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x} = \frac{\partial f(x)}{\partial x} + \underbrace{\lambda_m^T}_{\text{IV}} \frac{\partial g_m(x)}{\partial x} + \underbrace{\lambda_{M-m}^T}_{\text{IV}} \frac{\partial g_{M-m}(x)}{\partial x} \quad (6)$$

$$= \frac{\partial f(x)}{\partial x} + \lambda_m^T \frac{\partial g_m(x)}{\partial x} \quad (6)$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_m} = \frac{\partial f(x)}{\partial x_m} + \lambda_m^T \frac{\partial g_m(x)}{\partial x_m} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_e} = \frac{\partial f(x)}{\partial x_e} + \lambda_m^T \frac{\partial g_m(x)}{\partial x_e} = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_e} \left[\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_e} \right] \Delta x_e = - \frac{\partial g_m(x)}{\partial x_e} \quad (9)$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x} = \frac{\partial f(x)}{\partial x} + \lambda_m^T \frac{\partial g_m(x)}{\partial x} = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial \lambda} = g_m(x) \leq 0$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial \lambda} \lambda_m = \lambda_m^T g_m(x) = 0, \lambda_m \geq 0$$

$$\begin{aligned} \text{主問題} \quad & \min_x f(x) \\ \text{Subj. to } g_i(x) \leq 0 \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \text{双対問題} \quad & \max_{\lambda \geq 0} \phi(\lambda) \\ \text{Subj. to } \lambda_i \geq 0 \end{aligned} \quad (12)$$

$$L(x^*, \lambda^*) = \min_x \max_{\lambda \geq 0} L(x, \lambda) = \max_{\lambda \geq 0} \min_x L(x, \lambda) \quad (13)$$

$$g_i(x) > 0 \text{ なら } L(x, \lambda) \text{ の max が定まらない}$$

$$\text{いので } g_i(x) \leq 0 \text{ とする}$$

$$g_i(x) < 0 \text{ なら } \lambda_i = 0 \text{ のときが max.}$$

$$g_i(x) = 0 \text{ なら } \lambda_i \geq 0 \text{ であればよい}$$

の λ はある λ に対して $\lambda = \lambda(\lambda)$ で表わされるが、 $L(\lambda, \lambda)$ が λ で微分可能であれば λ と λ の関係は(16)式になる。次に $\max_{\lambda \geq 0} f(\lambda)$ を行うがこれは(12)式の双対問題である。 λ で探索するときは $f(\lambda)$ の微分

$$f(\lambda) = \min_x L(\lambda, \lambda) \quad \lambda = \lambda(\lambda) : \lambda \text{ は } L(\lambda, \lambda) \text{ を最小にする} \quad (15)$$

$$\frac{\partial L(\lambda, \lambda)}{\partial \lambda} = \frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda} + \lambda \frac{\partial g(\lambda)}{\partial \lambda} = 0 \quad (16)$$

が必要であるが、 $f(\lambda)$ が λ で微分可能であれば微分は容易に求まり探索方向 $d\lambda$ は(17)式で示される。 $L(\lambda, \lambda)$ は λ に関し線形であるが、 $f(\lambda)$ は λ に関し上に凸の関数であり $\max f(\lambda)$ の点が存在する。これと $\lambda \geq 0$ の条件を合わせると探索が終了したときの λ による微分 $g_i(\lambda)$ は(18)式になる。

$$d\lambda = \begin{cases} \frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda_i} = g_i(\lambda) & \lambda_i > 0 \text{ のとき} \\ \max \{ 0, \frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda_i} \} = g_i(\lambda) & \lambda_i = 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (17)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda_i} = g_i(\lambda) = 0 : \lambda_i \geq 0 \text{ のとき} \\ \frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda_i} = g_i(\lambda) < 0 : \lambda_i = 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (18)$$

3. 等式制約探索法と解法との関連

1) 等式制約探索法は(1)式に示すように主問題についての探索法である。 $\lambda_i \geq 0$ の制約式 $g_i(\lambda) = 0 : m$ 個
等式制約探索法での制約式と λ の条件は(2),(3),(4)式より $g_m(\lambda) \leq 0, g_{m-m}(\lambda) = 0$ の制約式 $g_i(\lambda) < 0 : M-m$ 個

(λ) <0 なら $\lambda_{m-m}=0, g_m(\lambda)=0$ なら $\lambda_m \geq 0$ であるが、これは主問題の解法での $\max_{\lambda \geq 0} L(\lambda, \lambda)$ を満足するような $g_i(\lambda)$ と λ_i となるように λ_m ($n-m$ 個)を定めるが、このときの条件(14)式と同じである。よって等式制約探索法での制約式と λ の条件は主問題の解法 $\max_{\lambda \geq 0} L(\lambda, \lambda)$ に相当している。

$$\begin{aligned} & \text{①探索変数}\lambda_m \text{で探索し } \frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda_m} + \lambda_m^T \frac{\partial g_m(\lambda)}{\partial \lambda_m} = 0 \\ & \text{となるように}\lambda_m \text{ } (n-m \text{ 個}) \text{ を定めるが、このとき} \\ & g_m(\lambda) = 0 \text{ となるように制約変数}\lambda_m \text{ } (m \text{ 個}) \\ & \text{を定め } \frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda_m} + \lambda_m^T \frac{\partial g_m(\lambda)}{\partial \lambda_m} = 0 \text{ となるように} \\ & \lambda_m \geq 0 \text{ } (m \text{ 個}) \text{ を定める (他の } M-m \text{ 個の } \lambda_{m-m} = 0) \\ & \text{②双対変数}\lambda_m \text{で探索し } g_m(\lambda) = 0 \text{ となるように} \\ & \lambda_m \geq 0 \text{ } (m \text{ 個}) \text{ を定めるが (他の } M-m \text{ 個の } \lambda_{m-m} \\ & = 0) \text{, このとき } \frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda} + \lambda_m^T \frac{\partial g_m(\lambda)}{\partial \lambda} = 0 \text{ となるよ} \end{aligned} \quad (20)$$

2) 双対問題の解法では λ による探索で鞍点が得られたとき $g_i(\lambda)$ は(18)式になっているが、これと等式制約探索法での $g_m(\lambda)$ とを対応させると(18)式は(19)式のように表わせる。すなわち λ による探索で $g_m(\lambda)=0$ となるような $\lambda_m \geq 0$ の

(m 個)が定まり、このとき他の $M-m$ 個の λ_{m-m} は $\lambda_{m-m}=0$ である。等式制約探索法と双対問題の解法とを対比させたのが(20)である。両者共 $\frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda} + \lambda_m^T \frac{\partial g_m(\lambda)}{\partial \lambda} = 0$ (n 個)及び $g_m(\lambda)=0$ (m 個)の式より λ (n 個)及び λ_m (m 個)の変数を定めているが、式と変数は同じでも式と変数の対応が異なっている。

3) 両者の関係を調べるため $L(\lambda, \lambda), f(\lambda)$ を図示する。等式制約探索法では $g_i(\lambda)$ と λ_i は $g_m(\lambda)=0$ 上と $\lambda_{m-m}=0$ 上のみに存在し、 $g_m(\lambda)=0$ 上では $\lambda_m \geq 0$ が、 $\lambda_{m-m}=0$ 上では $g_{m-m}(\lambda) \leq 0$ が許容領域である。 $g_i(\lambda)$ または λ_i が許容領域にないときは(21)で示す入換えにより許容領域に移行し探索により鞍点に到達する。これに対し双対問題の解法では $f(\lambda)$ の探索により鞍点に到達する。

4. まとめ

等式制約探索法と双対性との関連について考察を行ったが、①等式制約探索法での制約式と λ の条件が主問題の解法での鞍点 $L(\lambda, \lambda)$ を満足させる $g_i(\lambda)$ と λ_i の条件と同じである ②等式制約探索法と双対問題の解法とでは式と変数は同じでも式と変数の対応が異なっている ③等式制約探索法では許容領域でない $g_i(\lambda) > 0, \lambda_i < 0$ が生じたとき制約式及び変数の入換えにより許容領域に移行できる等が明らかになった。

