単制約変換にもとづく双対性理論枠組みの試案

01205220　日本大学生産工学部　篠原正明
Nihon University　Shinohara Masaaki

1. はじめに

多重制約・単目的・多変数非線形計画問題（多重制約NLP）を単制約・単目的・多変数非線形計画問題（単制約NLP）に変換することにより、双対性などの構造が理解容易な単制約NLPの最適性条件を利用して、多重制約NLPの最適性条件を構成するアプローチ（試み）を提案する。

2. 単制約ＮＬＰの双対性

以下に示す一対の単制約NLP, 問題Aと問題B, を考える。

問題A

目的関数: $f(\mathbf{x}) \rightarrow$ 最小化　(1)
制約条件: $g(\mathbf{x}) = g_0$　(2)

問題B

目的関数: $g(\mathbf{x}) \rightarrow$ 最大化　(3)
制約条件: $f(\mathbf{x}) = f_0$　(4)

(5)式のラグランジュ関数L(x, λ)をxについて偏微分して、零と置くことにより問題Aの最適性必要条件(6)式を得る。

$$L(\mathbf{x},\lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda(g(\mathbf{x}) - g_0) \tag{5}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} + \lambda \frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{0} \tag{6}$$

同様に、問題Bの最適性必要条件は(7)式で与えられる。

$$\frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} + \mu \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{0} \tag{7}$$

従って、問題Aと問題Bの最適性条件は制約条件を除いて等価である。すなわち、問題Aを仮に主問題、問題Bを双対問題とすれば、「両問題の最適性条件が等しい」という意味での双対性が成立する。

3. 多重制約ＮＬＰの単制約ＮＬＰへの変換

次に示す多重制約NLP、問題C, を考える。

問題C

目的関数: $f(\mathbf{x}) \rightarrow$ 最小化　(8)
制約条件: $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \geq \mathbf{0}$　(9)

問題Cが問題Aと異なるのは、制約条件が多重（ベクトル）である点である。
(9)式の多重制約は次式で別表現される。

$$g_i(\mathbf{x}) \geq 0,\ \ i = 1,\dots,n \tag{10}$$

以下に、(9)式あるいは(10)式の多重制約を(11)式の単制約で表現する一変換法を考案する。

$$G(\mathbf{x}) \geq 0 \tag{11}$$

[Lp計量ノルムを用いた変換法]
(10)式の多重制約は(12)式と等価である。

$$\min_i \{g_i(\mathbf{x})\} \geq 0 \tag{12}$$

すなわち、

$$G(\mathbf{x}) = \min_i \{g_i(\mathbf{x})\} \tag{13}$$

(13)式をLp計量ノルムを用いて再表現すると、(14)式を得る。

$$G(\mathbf{x}) = \min_i \{g_i(\mathbf{x})\} = \lim_{p \to 0} \left(\sum_i (g_i(\mathbf{x}))^p \right)^{\frac{1}{p}} \tag{14}$$

ここで、(10)式の多重制約が充足されている領域では、$g_i(\mathbf{x}) \geq 0 (i = 1,\dots,n)$なので、(14)式は成り立つ。

4. 単制度変換 ＮＬＰの最適性条件

これ以外にも考えられるだろうが、3節で示した変換法を用いれば、問題Cは以下に示す単制約NLP, 問題D, に変換できる。

問題D

目的関数: $f(\mathbf{x}) \rightarrow$ 最小化　(15)
制約条件: $G(\mathbf{x}) \geq 0$　(16)

ここで、目的関数、制約条件の凸性などを仮定すれば、制約領域の等号領域で最適解が達成できるため、凸計画問題に限定して次の問題Eを考える。

問題E

目的関数: $f(\mathbf{x}) \rightarrow$ 最小化　(17)
制約条件: $G(\mathbf{x}) = 0$　(18)

この問題Eを単制約NLPの主問題 (問題A)と考えよう。最適性条件（制約条件を除く）は次式で与えられる。

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}+\lambda\frac{\partial G(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\mathbf{0} \tag{19}$$

従って、単制約変換NLPの最適性条件を評価するために、式(19)の中の$\partial G(\mathbf{x})/\partial \mathbf{x}$を評価する。
以下に、Lp計量ノルムを用いた変換法で$G(\mathbf{x})$を構成した場合について、$\partial G(\mathbf{x})/\partial \mathbf{x}$を評価する。すなわち、$G(\mathbf{x})$は(20)式で与えられる。

$$G(\mathbf{x})=\lim_{p\to 0}\left(\sum_i \left(g_i(\mathbf{x})\right)^p\right)^{\frac{1}{p}} \tag{20}$$

極限をとる対象となる関数は一様収束するので、limと$\dfrac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$を交換できる。

$$\frac{\partial G(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\lim_{p\to 0}\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\left\{\sum_i \left(g_i(\mathbf{x})\right)^p\right\}^{\frac{1}{p}} \tag{21}$$

$$=\lim_{p\to 0}\left\{\frac{1}{p}\left(\sum g_i^{\,p}\right)^{\frac{1}{p}-1}\left(\sum g_i'\,p g_i^{\,p-1}\right)\right\} \tag{22}$$

但し、$g_i=g_i(\mathbf{x}), g_i'=\dfrac{\partial g_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$で、範囲を明記していない$\sum$は$i=1,\ldots,n$について総和をとる。
(22)式を整理すると、

$$\frac{\partial G(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\min_i\{g_i\}\times\lim_{p\to 0}\frac{\sum g_i' g_i^{\,p-1}}{\sum g_i^{\,p}} \tag{23}$$

ここで、(23)式において、最小値演算$\min_i\{\ \}$の実現値をg_{min}、このg_{min}を与えるg_iの添字集合をM、g_{min}が$g_i(i\in M)$の凸結合で与えられるとする。

$$g_{min}=\sum_{i\in M}\lambda_i g_i \quad (24) \qquad \sum_{i\in M}\lambda_i=1, \quad (25) \qquad \lambda_i\geq 0, i\in M \quad (26)$$

(24)式を(23)式に代入し、整理すると次式を得る。

$$\frac{\partial G(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\left(\sum_{i\in M}\lambda_i g_i\right)\times\lim_{p\to 0}\frac{\sum\left(\dfrac{g_i'}{g_i}\right)g_i^{\,p}}{\sum g_i^{\,p}} \tag{27}$$

(27)式の右辺は、$p\to 0$で$i\in M$の項のみ残るため、

$$\frac{\partial G(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\left(\sum_{i\in M}\lambda_i g_i\right)\times\left(\frac{\sum_{i\in M}\dfrac{g_i'}{g_i}}{m}\right) \tag{28}$$

ここで、(28)式の右辺のg_j'に関する係数を整理する。但し、$m=|M|$。

$$(g_j'\text{の係数})=\left(\sum_{i\in M}\lambda_i g_i\right)\frac{1}{m g_j}, j\in M \tag{29}$$

さらに、問題Eを考えているため、$g_i\to 0(i\in M)$を考慮すると、式( )は式( )となる。

$$(g_j'\text{の係数})=\frac{1}{m}\lim_{\substack{g_i\to 0\\ i\in M}}\sum_{i\in M}\lambda_i\frac{g_i}{g_j}=\frac{1}{m}\sum_{i\in M}\lambda_i\frac{g_i'}{g_j'}, j\in M \tag{30}$$

(28)式に代入すると、次式を得る。

$$\frac{\partial G(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\sum_{j\in M}(g_j'\text{の係数})\times g_j'=\sum_{j\in M}\frac{g_j'}{m}\left(\sum_{i\in M}\lambda_i\frac{g_i'}{g_j'}\right)$$

$$=\frac{1}{m}\sum_{j\in M}\left(\sum_{i\in M}\lambda_i g_i'\right)=\sum_{i\in M}\lambda_i g_i' \tag{31}$$

式(31)を式(19)に代入し、$\lambda\lambda_i=u_i$と置くと、次の最適性条件を得る。

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}+\sum_{i\in M}u_i\frac{\partial g_i(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=\mathbf{0} \tag{32}$$

すなわち、目的関数$f(\mathbf{x})$と有効制約$g_i(\mathbf{x})(i\in M)$の勾配がつりあっているというKKT条件を得る。
ところで、問題Eを問題Aに対応させているので、問題Eの双対問題は次の問題F, あるいは凸性を仮定すれば、問題Gとなる。

問題F		
目的関数：	$\min_i\ g_i(\mathbf{x})\to$最大化	(33)
制約条件：	$f(\mathbf{x})=f_0$	(34)

問題G		
目的関数：	$\min_i\ g_i(\mathbf{x})\to$最大化	(35)
制約条件：	$f(\mathbf{x})\leq f_0$	(36)

5. おわりに

数理計画法の双対性理論に関しては、古くはLPの双対性、KKT条件、最近ではJohriのImplied制約など様々な定式化の枠組が提案されて来た。本アプローチは単制約NLPへの変換をベースに、目的関数と制約条件の間の役目交換という視点から、双対性(7)をとらえなおしてみた。LPでみられるような「主問題の最小値が双対問題の最大値に一致するという形式」での主、双対問題ではなく、さらに両問題の変数空間も等しいが、両問題の最適性条件が制約条件を除いて等しくなる。

単制約NLPへの変換法として、「Lp計量ノルムを用いた変換法」を採用したが、これ以外の変換法を採用すれば別表現の双対性が得られるだろう。例えば、多重制約条件を論理関数で表し、その論理関数をsigmoid関数で近似するアプローチなど。