動的双対化に関する一考察

弘前大学 大学院 理工学研究科　金 正道 (Masamichi KON)
Graduate School of Science and Technology, Hirosaki University

秋田県立大学 システム科学技術学部　木村 寛 (Yutaka KIMURA)
Faculty of System Science and Technology, Akita Prefectural University

概要

本稿では、制約なし最適化問題に対する双対問題を与える動的双対化について考察する。

1　はじめに

双対問題は通常、制約付き凸計画問題に対して定義される（例えば、Boyd and Vandenberghe [1] 参照)。岩本 [2], Kimura, Ueno and Iwamoto [4] および 植野・木村・岩本 [5] において、目的関数が 2 次関数の和（平方和）である制約なし最適化問題に対する双対問題を与えるために動的双対化が提案されている。ただし、いくつかの具体的な形の問題のみが扱われている。そして、Kawasaki [3] において、目的関数が凸関数の和である制約なし最適化問題に対して、動的双対化が適用され、双対問題が導出されている。

動的双対化は、まず主問題に対して、新たな変数を導入し、元の変数の一部または全部を新たな変数に変数変換する。次に、変数変換における元の変数と新たな変数の間の関係式を等式制約として、主問題を新たな変数で表し、制約付き最適化問題に変形し、双対問題を導出する。ここでは、ラグランジュ関数を用いて双対問題を導出する。Kawasaki [3] における双対問題は変形した制約付き最適化問題のラグランジュ双対問題そのものであるが、本稿で提案する動的双対問題はそのラグランジュ双対問題にいくつかの等式制約が追加されたものであり、岩本 [2], Kimura, Ueno and Iwamoto [4] および 植野・木村・岩本 [5] における動的双対化を統一的に扱ったものである。

2　主問題

$f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i = 1, 2, \cdots, m$ を 2 次関数とする。ただし、2 次関数とは次数が 2 以下の関数という意味で用いている。例えば、1 次関数や定関数も 2 次関数とみなす。このと

き、主問題として、次の制約なし最小化問題を考える。

$$\text{(P)} \qquad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^{m} f_i(\boldsymbol{x})$$

(P) に対する双対問題を与えるために、岩本 [2], Kimura, Ueno and Iwamoto [4] および植野・木村・岩本 [5] において、動的双対化が提案されている。ただし、$f_i,\ i=1,2,\cdots,m$ として、いくつかの具体的な形のもののみが扱われている。

3 (P) に対する動的双対化

(P) に対する動的双対化は、まず

$$I \subset \{1,2,\cdots,m\}, \quad I \neq \emptyset$$

とし、新たな変数 $\boldsymbol{u}_i \in \mathbb{R}^n,\ i \in I$ を導入し、主問題 (P) を線形等式制約をもつ最小化問題

$$(\overline{\mathrm{P}}) \qquad \left|\begin{array}{ll} \min & \displaystyle\sum_{i\in I} f_i(A_i\boldsymbol{u}_i+\boldsymbol{b}_i)+\sum_{i\notin I} f_i(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} & \boldsymbol{x}-(A_i\boldsymbol{u}_i+\boldsymbol{b}_i)=\boldsymbol{0},\ i\in I \end{array}\right.$$

または

$$(\overline{\mathrm{P}})' \qquad \left|\begin{array}{ll} \min & \displaystyle\sum_{i\in I} f_i(A_i\boldsymbol{u}_i+\boldsymbol{b}_i)+\sum_{i\notin I} f_i(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} & A_i^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}_i)-\boldsymbol{u}_i=\boldsymbol{0},\ i\in I \end{array}\right.$$

に変形する。ここで、$A_i \in \mathbb{R}^{n\times n},\ i \in I$ は正則行列であり、$\boldsymbol{b}_i \in \mathbb{R}^n,\ i \in I$ である。$(\overline{\mathrm{P}})$ または $(\overline{\mathrm{P}})'$ は、主問題 (P) において、各 $f_i(\boldsymbol{x}),\ i \in I$ に対して

$$\boldsymbol{x} = A_i\boldsymbol{u}_i + \boldsymbol{b}_i$$

と変数変換し、変数変換の関係式を等式制約にした問題である。動的双対化では

$$\boldsymbol{v} = B\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}, \quad B \in \mathbb{R}^{q\times n},\ \boldsymbol{c} \in \mathbb{R}^q$$

など他のタイプの変数変換も扱えるのであるが、本稿では扱わないことにする。よって、本稿では動的双対化が適用できる範囲を限定して扱っていることになる。$(\overline{\mathrm{P}})$ に対するラグランジュ関数は

$$L(\boldsymbol{x},(\boldsymbol{u}_i)_{i\in I},(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) = \sum_{i\in I} f_i(A_i\boldsymbol{u}_i+\boldsymbol{b}_i)+\sum_{i\notin I} f_i(\boldsymbol{x})+\sum_{i\in I}\boldsymbol{\mu}_i^t(\boldsymbol{x}-(A_i\boldsymbol{u}_i+\boldsymbol{b}_i)) \quad (1)$$

となり、$(\overline{\mathrm{P}})'$ に対するラグランジュ関数は

$$L(\boldsymbol{x},(\boldsymbol{u}_i)_{i\in I},(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})=\sum_{i\in I}f_i(A_i\boldsymbol{u}_i+\boldsymbol{b}_i)+\sum_{i\notin I}f_i(\boldsymbol{x})+\sum_{i\in I}\boldsymbol{\mu}_i^t(A_i^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}_i)-\boldsymbol{u}_i) \tag{2}$$

となる。ここで、$\boldsymbol{\mu}_i\in\mathbb{R}^n,\ i\in I$ である。主問題 (P) の双対問題（$(\overline{\mathrm{P}})$ または $(\overline{\mathrm{P}})'$ のラグランジュ双対問題）は

$$(\mathrm{D}^L) \qquad \max_{\boldsymbol{\mu}_i\in\mathbb{R}^n,i\in I}\inf\{L(\boldsymbol{x},(\boldsymbol{u}_i)_{i\in I},(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}):\boldsymbol{x},\boldsymbol{u}_i\in\mathbb{R}^n,i\in I\}$$

となる。本稿で提案する動的双対問題は (D^L) そのものではなく、(D^L) にいくつかの等式制約を追加したものである。

定義 1 $\displaystyle\sum_{i=1}^m f_i$ が $\{(A_i,\boldsymbol{b}_i)\}_{i\in I}$ に対して**動的双対化可能関数**であるとは、次の条件 (i), (ii) および (iii) をみたすときをいう。

(i) (1) または (2) におけるラグランジュ関数が

$$\begin{aligned}L(\boldsymbol{x},(\boldsymbol{u}_i)_{i\in I},(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})=&\sum_{k=1}^p\{h_{1k}(\boldsymbol{x},(\boldsymbol{u}_i)_{i\in I},(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})\}^2+r((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})\\&+\sum_{j=1}^n x_jh_{2j}((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})+\sum_{i'\in I}\sum_{j=1}^n u_{i'j}h_{3i'j}((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}))\end{aligned} \tag{3}$$

と表せる。ここで、$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^t\in\mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{u}_i=(u_{i1},u_{i2},\cdots,u_{in})^t\in\mathbb{R}^n$, $i\in I$ であり、$h_{1k}(\boldsymbol{x},(\boldsymbol{u}_i)_{i\in I},(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})$, $k=1,2,\cdots,p$ は $\boldsymbol{x},\boldsymbol{u}_i,\boldsymbol{\mu}_i$, $i\in I$ の 1 次式であり、$h_{2j}((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}))$, $j=1,2,\cdots,n$ および $h_{3i'j}((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}))$, $i'\in I$, $j=1,2,\cdots,n$ は $\boldsymbol{\mu}_i$, $i\in I$ の 1 次式である。ただし、1 次式とは次数が 1 以下の式という意味で用いている。例えば、0 も 1 次式とみなす。

(ii) 線形方程式系

$$\left\{\begin{array}{l}h_{2j}((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})=0,\ j=1,2,\cdots,n\\ h_{3i'j}((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})=0,\ i'\in I,\ j=1,2,\cdots,n\end{array}\right. \tag{4}$$

の解 $\boldsymbol{\mu}_i\in\mathbb{R}^n$, $i\in I$ を任意に与えると、$\boldsymbol{x},\boldsymbol{u}_i$, $i\in I$ に関する線形方程式系

$$h_{1k}(\boldsymbol{x},(\boldsymbol{u}_i)_{i\in I},(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})=0,\quad k=1,2,\cdots,p \tag{5}$$

は解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}((\boldsymbol{\mu}_{i'})_{i'\in I}),\boldsymbol{u}_i=\boldsymbol{u}_i((\boldsymbol{\mu}_{i'})_{i'\in I})$, $i\in I$ をもつ。

(iii) 線形方程式系 (4) のある解 $\boldsymbol{\mu}_i^0 \in \mathbb{R}^n,\ i \in I$ が存在し、$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_i,\ i \in I$ に関する線形方程式系

$$\begin{cases} h_{1k}(\boldsymbol{x}, (\boldsymbol{u}_i)_{i\in I}, (\boldsymbol{\mu}_i^0)_{i\in I}) = 0,\ k = 1, 2, \cdots, p \\ \boldsymbol{x} - (A_i \boldsymbol{u}_i + \boldsymbol{b}_i) = \boldsymbol{0},\ i \in I \end{cases} \tag{6}$$

は解 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}((\boldsymbol{\mu}_{i'}^0)_{i'\in I}), \boldsymbol{u}_i = \boldsymbol{u}_i((\boldsymbol{\mu}_{i'}^0)_{i'\in I}),\ i \in I$ をもつ。 □

$\displaystyle\sum_{i=1}^{m} f_i$ は $\{(A_i, \boldsymbol{b}_i)\}_{i\in I}$ に対して動的双対化可能関数であるとする。このとき、線形方程式系 (4) の各解 $\boldsymbol{\mu}_i \in \mathbb{R}^n,\ i \in I$ に対して

$$\begin{aligned} &\inf\{L(\boldsymbol{x}, (\boldsymbol{u}_i)_{i\in I}, (\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) : \boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_i \in \mathbb{R}^n, i \in I\} \\ &= \inf\left\{\sum_{k=1}^{p} \{h_k(\boldsymbol{x}, (\boldsymbol{u}_i)_{i\in I}, (\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})\}^2 + r((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) : \boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_i \in \mathbb{R}^n, i \in I\right\} \\ &= r((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) \end{aligned}$$

となるので、主問題 (P) の**動的双対問題**を

$$\text{(D)} \qquad \left|\begin{array}{ll} \max & r((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) \\ \text{s.t.} & h_{2j}((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) = 0,\ j = 1, 2, \cdots, n \\ & h_{3i'j}((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) = 0,\ i' \in I,\ j = 1, 2, \cdots, n \end{array}\right.$$

として提案する。動的双対化可能関数の定義の条件 (i) において、(1) または (2) におけるラグランジュ関数が

$$L(\boldsymbol{x}, (\boldsymbol{u}_i)_{i\in I}, (\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) = \sum_{k=1}^{p} \{h_{1k}(\boldsymbol{x}, (\boldsymbol{u}_i)_{i\in I}, (\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})\}^2 + r((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})$$

と表せるとき、主問題 (P) の動的双対問題 (D) は

$$\max_{\boldsymbol{\mu}_i \in \mathbb{R}^n, i \in I} r((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I})$$

となり、主問題 (P) の動的双対問題 (D) と主問題 (P) の双対問題 (D^L) （($\overline{\mathrm{P}}$) または ($\overline{\mathrm{P}}$)$'$ のラグランジュ双対問題）は一致する。

動的双対化可能関数の定義より、次の双対定理が得られる。

定理 1 $\displaystyle\sum_{i=1}^{m} f_i$ は $\{(A_i, \boldsymbol{b}_i)\}_{i\in I}$ に対して動的双対化可能関数であるとする。このとき、($\overline{\mathrm{P}}$) または ($\overline{\mathrm{P}}$)$'$ の任意の実行可能解 $(\boldsymbol{x}, (\boldsymbol{u}_i)_{i\in I}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{|I|n}$ および (D) の任意の実行

可能解 $(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I} \in \mathbb{R}^{|I|n}$ に対して

$$r((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) \le \sum_{i\in I} f_i(A_i\boldsymbol{u}_i + \boldsymbol{b}_i) + \sum_{i\notin I} f_i(\boldsymbol{x})$$

となり、等号が成り立つのは (5) がみたされるときに限る。ここで、$|I|$ は I の要素の個数である。 $\Box$

$\sum_{i=1}^{m} f_i$ は $\{(A_i, \boldsymbol{b}_i)\}_{i\in I}$ に対して動的双対化可能関数であるとする。$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ を (P) の任意の実行可能解とし、$(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I} \in \mathbb{R}^{|I|n}$ を (D) の任意の実行可能解とする。このとき、$\boldsymbol{x} = A_i\boldsymbol{u}_i + \boldsymbol{b}_i,\ i \in I$ とすると、$(\boldsymbol{x}, (\boldsymbol{u}_i)_{i\in I}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{|I|n}$ は $(\overline{\mathrm{P}})$ および $(\overline{\mathrm{P}})'$ の実行可能解となり、定理 1 より

$$r((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) \le \sum_{i=1}^{m} f_i(\boldsymbol{x})$$

となる。また、動的双対化可能関数の定義の条件 (iii) より、(D) のある実行可能解 $(\boldsymbol{\mu}_i^*)_{i\in I} \in \mathbb{R}^{|I|n}$ に対して、(6) をみたす $(\boldsymbol{x}^*, (\boldsymbol{u}_i^*)_{i\in I}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{|I|n}$ が存在する。このとき、$\boldsymbol{x}^*$ は (P) の実行可能解になり、$(\boldsymbol{x}^*, (\boldsymbol{u}_i^*)_{i\in I})$ は $(\overline{\mathrm{P}})$ および $(\overline{\mathrm{P}})'$ の実行可能解になる。さらに

$$r((\boldsymbol{\mu}_i^*)_{i\in I}) = \sum_{i=1}^{m} f_i(\boldsymbol{x}^*)$$

となるので、$\boldsymbol{x}^*$ は (P) の最適解になり、$(\boldsymbol{\mu}_i^*)_{i\in I}$ は (D) の最適解になり、(P) の最適値と (D) の最適値は一致する。以上より、次の双対定理が得られる。

定理 2 $\sum_{i=1}^{m} f_i$ は $\{(A_i, \boldsymbol{b}_i)\}_{i\in I}$ に対して動的双対化可能関数であるとする。$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ を (P) の任意の実行可能解とし、$(\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I} \in \mathbb{R}^{|I|n}$ を (D) の任意の実行可能解とする。このとき

$$r((\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) \le \sum_{i=1}^{m} f_i(\boldsymbol{x})$$

となる。さらに、(P) および (D) の最適解は存在し、(P) の最適値と (D) の最適値は一致する。 $\Box$

4 動的双対化可能関数の例

$n = 2,\ m = 3$ とし、$f_i : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R},\ i = 1, 2, 3$ を各 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)^t \in \mathbb{R}^2$ に対して

$$f_1(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + x_2^2, \quad f_2(\boldsymbol{x}) = x_1^2 + x_2^2, \quad f_3(\boldsymbol{x}) = (x_1 - x_2)^2$$

とする。このとき、主問題

$$\text{(P)} \qquad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^2} [f_1(\boldsymbol{x}) + f_2(\boldsymbol{x}) + f_3(\boldsymbol{x})]$$

に対して

$$I = \{1, 2\}, \quad \{(E, \mathbf{0})\}_{i\in I}$$

とし、新たな変数 $\boldsymbol{u}_i = (u_{i1}, u_{i2})^t \in \mathbb{R}^2,\ i = 1, 2$ を導入し

$$(\overline{\mathrm{P}}) \qquad \left|\begin{array}{ll} \min & f_1(\boldsymbol{u}_1) + f_2(\boldsymbol{u}_2) + f_3(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} & \boldsymbol{x} - \boldsymbol{u}_i = \mathbf{0},\ i = 1, 2 \end{array}\right.$$

を考える。ここで、$E \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ は単位行列である。$(\overline{\mathrm{P}})$ に対するラグランジュ関数は

$$\begin{aligned}
&L(\boldsymbol{x}, (\boldsymbol{u}_i)_{i\in I}, (\boldsymbol{\mu}_i)_{i\in I}) \\
&= f_1(\boldsymbol{u}_1) + f_2(\boldsymbol{u}_2) + f_3(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\mu}_1^t(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{u}_1) + \boldsymbol{\mu}_2^t(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{u}_2) \\
&= u_{11}^2 + u_{12}^2 + u_{21}^2 + u_{22}^2 + (x_1 - x_2)^2 \\
&\quad + \mu_{11}(x_1 - u_{11}) + \mu_{12}(x_2 - u_{12}) + \mu_{21}(x_1 - u_{21}) + \mu_{22}(x_2 - u_{22}) \\
&= \left(u_{11} - \frac{\mu_{11}}{2}\right)^2 - \frac{\mu_{11}^2}{4} + \left(u_{12} - \frac{\mu_{12}}{2}\right)^2 - \frac{\mu_{12}^2}{4} + \left(u_{21} - \frac{\mu_{21}}{2}\right)^2 - \frac{\mu_{21}^2}{4} \\
&\quad + \left(u_{22} - \frac{\mu_{22}}{2}\right)^2 - \frac{\mu_{22}^2}{4} + (x_1 - x_2)^2 + x_1(\mu_{11} + \mu_{21}) + x_2(\mu_{12} + \mu_{22}) \\
&= \left\{\left(u_{11} - \frac{\mu_{11}}{2}\right)^2 + \left(u_{12} - \frac{\mu_{12}}{2}\right)^2 + \left(u_{21} - \frac{\mu_{21}}{2}\right)^2 + \left(u_{22} - \frac{\mu_{22}}{2}\right)^2\right. \\
&\quad \left. + (x_1 - x_2)^2\right\} + \left(-\frac{\mu_{11}^2}{4} - \frac{\mu_{12}^2}{4} - \frac{\mu_{21}^2}{4} - \frac{\mu_{22}^2}{4}\right) \\
&\quad + \{x_1(\mu_{11} + \mu_{21}) + x_2(\mu_{12} + \mu_{22})\}
\end{aligned}$$

となり、$f_1 + f_2 + f_3$ が $\{(E, \mathbf{0})\}_{i\in I}$ に対して動的双対化可能関数であることを容易に確かめることができる。ここで、$\boldsymbol{\mu}_i = (\mu_{i1}, \mu_{i2})^t \in \mathbb{R}^2,\ i = 1, 2$ である。よって、主問題 (P) の動的双対問題は

$$\text{(D)} \qquad \left|\begin{array}{ll} \max & -\dfrac{\mu_{11}^2}{4} - \dfrac{\mu_{12}^2}{4} - \dfrac{\mu_{21}^2}{4} - \dfrac{\mu_{22}^2}{4} \\ \text{s.t.} & \mu_{11} + \mu_{21} = 0 \\ & \mu_{12} + \mu_{22} = 0 \end{array}\right.$$

となる。一方、主問題 (P) の双対問題（$(\overline{\mathrm{P}})$ のラグランジュ双対問題）は

$$(\mathrm{D}^L) \qquad \left|\begin{array}{ll} \max & -\dfrac{\mu_{11}^2}{4} - \dfrac{\mu_{12}^2}{4} - \dfrac{\mu_{21}^2}{4} - \dfrac{\mu_{22}^2}{4} - \dfrac{(\mu_{11} + \mu_{21})^2}{4} \\ \text{s.t.} & \mu_{11} + \mu_{21} + \mu_{12} + \mu_{22} = 0 \end{array}\right.$$

となる。

5　結論

本稿では、制約なし最適化問題に対する双対問題を与える動的双対化について考察した。2 次関数の和に対する動的双対化可能関数を定義し、目的関数が 2 次関数の和である制約なし最小化問題に対して、その動的双対問題を提案した。

参考文献

[1] S. Boyd and L. Vandenberghe, Convex optimization, Cambridge University Press, 2004

[2] 岩本誠一, 最適化の数理 II ：ベルマン方程式, 知泉書館, 2013

[3] H. Kawasaki, Dynamic dualization in a general setting, Journal of the Operations Research Society of Japan, Vol. 60, 2017, pp.44–49

[4] Y. Kimura, T. Ueno and S. Iwamoto, Two duals of one primal, Bulletin of Informatics and Cybernetics, Vol. 48, 2016, pp.63–82

[5] 植野貴之, 木村寛, 岩本誠一, 7 つの双対問題, 数理解析研究所講究録 1990, 2016, pp.213–221