ラグランジュ緩和と双対問題

松井 知己

1　ラグランジュ緩和

本稿ではラグランジュ緩和を使って、双対問題と呼ばれる問題が自然に導かれることを示す。

まず最初に、ラグランジュ緩和の一般形について、次のような最適化問題用いて説明する。

$$\begin{array}{lll} \mathrm{P} & \text{minimize} & f(\boldsymbol{x}) \\ & \text{subject to} & g_i(\boldsymbol{x}) = b_i \ \ (i = 1, \ldots, k) \\ & & h_j(\boldsymbol{x}) \geq b_j \ \ (j = 1, \ldots, l) \end{array}$$

上記の問題がそのまま解けるような場合は、緩和問題を殊更取り上げる必要は（あまり）無い。上記の問題を解くのが困難な場合、これをもう少し簡単な問題に緩和して、この問題の手がかりを得るというアプローチが考えられる。

例えば、上記の問題の制約式をどれか取り除いてしまった問題は、制約が「緩和されている」ことから緩和問題と呼ばれる。しかしながら、制約を取り去ってしまうことは、緩和の度合が激し過ぎて、緩和問題の最適解が元の問題からかけ離れてしまうことが、しばしばある。では制約を取り去ってしまうより、もう少しましな緩和法はないだろうか？

そこで良く使われるのがラグランジュ緩和である。例えば等式制約 $g_i(\boldsymbol{x}) = b_i$ を適当な数値 α_i 倍して目的関数に繰り込んだ問題

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i (b_i - g_i(\boldsymbol{x})) \\ \text{subject to} & g_i(\boldsymbol{x}) = b_i \ \ (i = 1, \ldots, k) \\ & h_j(\boldsymbol{x}) \geq b_j \ \ (j = 1, \ldots, l) \end{array}$$

について考えよう。問題 P の任意の許容解 $\boldsymbol{x}$ に対し、上記の問題の目的関数値と問題 P の関数値は、変わらない。ゆえに、ある解が P の最適解である必要十分条件は、その解が上記の問題の最適解となることである。ここで、上記の問題から等式制約を取り除いた問題

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i (b_i - g_i(\boldsymbol{x})) \\ \text{subject to} & h_j(\boldsymbol{x}) \geq b_j \ \ (j = 1, \ldots, l) \end{array}$$

は、ラグランジュ緩和問題と呼ばれる。この問題が元の問題 P の緩和問題となっているのは明らかであろう。

問題 P の不等式制約を緩和することもできる。それには非負の数値 $\beta_j \geq 0$ を用いて以下のような問題を作れば良い。

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & f(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{k} \beta_j (b_j - h_j(\boldsymbol{x})) \\ \text{subject to} & g_i(\boldsymbol{x}) = b_i \ \ (i = 1, \ldots, k) \\ & h_j(\boldsymbol{x}) \geq b_j \ \ (j = 1, \ldots, l) \end{array}$$

上記の問題の目的関数値は、許容解ならば、その値は $f(\boldsymbol{x})$ より小さめに出ている。このことから、上記の問題は問題 P の緩和問題である。逆に言えば、この性質を保つために、 β_j は非負でなければならない。また目的関数の $\sum_{j=1}^{k} \beta_j(b_j - h_j(\boldsymbol{x}))$ の項は、この不等式制約を破る解については罰金という形で目的関数に反映していると見ることもできる。

上記の問題から不等式制約を取り除いてしまったもの

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & f(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{k} \beta_j(b_j - h_j(\boldsymbol{x})) \\ \text{subject to} \quad & g_i(\boldsymbol{x}) = b_i \ \ (i = 1, \ldots, k) \end{aligned}$$

が、ラグランジュ緩和である。この問題が P の緩和問題であることも明らかであろう。

もちろん、等式と不等式全てを同時にラグランジュ緩和してしまった問題も作ることができる。この場合は、制約式が存在しない問題となる。

ラグランジュ緩和問題を作る際に用いた係数 $\alpha_i,\ \beta_j$ をラグランジュ乗数と呼ぶ。ラグランジュ乗数の選び方によって、ラグランジュ緩和問題の性能は大きく変わる。そこで、できるだけ良いラグランジュ乗数を求めたいという欲求が出現する。例えば上記の、不等式制約をラグランジュ緩和した問題において、最も良いラグランジュ乗数を求める問題は

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & (\text{minimize}\{f(\boldsymbol{x}) + \sum_{j=1}^{k} \beta_j(b_j - h_j(\boldsymbol{x})) \mid g_i(\boldsymbol{x}) = b_i \ \ (i = 1, \ldots, k)\}) \\ \text{subject to} \quad & {\scriptstyle \beta_j \geq 0} \end{aligned}$$

という最適化問題となる。このように、最適なラグランジュ乗数を求める問題を、ラグランジュ双対問題と呼ぶ。

2 線形計画問題

この節では、線形計画問題のラグランジュ緩和問題を導入することによって、線形計画問題の双対問題が自然な形で導かれることを示そう。次のような線形計画問題について議論しよう。

$$\begin{aligned} \text{LP} \quad \text{minimize} \quad & \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{subject to} \quad & A\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b} \end{aligned}$$

この線形計画問題の制約全てを、ラグランジュ乗数ベクトル $\boldsymbol{y}$ を用いてラグランジュ緩和すると

$$\text{minimize} \quad \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}^T(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x})$$

という制約の無い問題となる。このときラグランジュ乗数が非負でなければならないことは、前節で述べた通りである。

さてこの問題は、制約の無い線形目的関数の最小化という非常に特殊な問題である。どのように特殊かというと、目的関数ベクトルに非ゼロの係数が一つでも存在するならば、この問題の最適値はマイナス無限大となってしまう。目的関数値がマイナス無限大となってしまうのでは、緩和問題として用をなさない。これを阻止するには、上記の緩和問題の目的関数ベクト

ルをゼロベクトルにするしかない。上記の問題の目的関数を整理すると $(\boldsymbol{c}^T - \boldsymbol{y}^T A)\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{b}$ となっている。このことから、ラグランジュ乗数 $\boldsymbol{y}$ としては、 $\boldsymbol{c}^T - \boldsymbol{y}^T A = \boldsymbol{0}^T$ を満たすものを選ぶのが望ましい。このとき、上記のラグランジュ緩和問題の最適値は $\boldsymbol{y}^T \boldsymbol{b}$ そのものとなる。

以上より、もっとも良いラグランジュ乗数を求めるには、

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & \boldsymbol{y}^T \boldsymbol{b} \\ \text{subject to} & \boldsymbol{y}^T A = \boldsymbol{c}^T, \ \boldsymbol{y} \geq \boldsymbol{0} \end{array}$$

を解けば良いことが分かる。この問題こそが、線形計画問題 LP の双対問題に他ならない。

上記の双対問題について、同じ様にラグランジュ双対問題を作ることによって、再び問題 LP が得られることを、各自確かめられたい。

この双対問題が、元の問題と同じ最適値を持つという「双対定理」はまた別の話題であり、非常に大きな定理である。

3 最小包囲球問題

d 次元座標空間中の n 個の点 $\{\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n\}$ が与えられたとき、これらを含む球 (閉な超球) の中で半径最小のものを求めるのが、最小包囲球問題である。この問題を素直に定式化してみよう。

求める球の中心を $\boldsymbol{x}$ とし、半径を r とすると、この問題は

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & r^2 \\ \text{subject to} & ||\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{x}||^2 \leq r^2 \ \ (i = 1, 2, \ldots, n) \end{array}$$

と表すことができる。この問題は、制約式が全て 2 次式であり、解くことが非常に難しい問題に見える。

そこでこの問題の制約式を、非負のラグランジュ乗数ベクトル y_i を用いてラグランジュ緩和してみよう。すると上の問題は

$$\text{minimize} \qquad r^2 + \sum_{i=1}^{n} y_i (||\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{x}||^2 - r^2)$$

という制約無しの問題になる。目的関数を整理すると

$$(1 - \sum_{i=1}^{n} y_i) r^2 + \sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{x}||^2$$

となる。

上記のラグランジュ緩和問題の目的関数値がマイナス無限大にならないためには、まず r^2 の係数が非正でなければならない。すなわち $\sum_{i=1}^{n} y_i \geq 1$ であることが必要となる。では $\sum_{i=1}^{n} y_i > 1$ だったらどうなるだろう？当然 $r = 0$ であるが、後ろの項は $\sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{x}||^2$ となっており y_i の係数は全て非負である。すなわちベクトル $\boldsymbol{y}$ を定数倍して 1 になるようにすれば、上記のラグランジュ緩和問題の最適値を少し上げることができる。ゆえに最も良いラグランジュ乗数があったら、それは「 $\sum_{i=1}^{n} y_i = 1$ を満たすらしい」ことが分かる。では

「$\sum_{i=1}^{n} y_i = 1$ を満たす」場合に限定して話を続けましょう。すると目的関数中の r^2 の項は 0 となってしまい、抜いてもかまわないことが分かる。そのためラグランジュ双対問題は

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & (\text{minimize}\{\sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{x}||^2\}) \\ \text{subject to} \quad & \sum_{i=1}^{n} y_i = 1, \ \ y_i \geq 0 \end{aligned}$$

となる。この式は、何処かで見た感じがしますね。 y_i は非負で、足して 1 だから、確率みたいなもののようです。そうすると、目的関数の中の式は分散みたいですよね。とすると、分散は自乗平均から平均の自乗を引いたものですから、同じ変形ができそうです。すなわち

$$\sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{x}||^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{p}_i||^2 - 2(\sum_{i=1}^{n} y_i \boldsymbol{p}_i)^T \boldsymbol{x} + \sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{x}||^2$$

ここで $\sum_{i=1}^{n} y_i \boldsymbol{p}_i = \boldsymbol{d}$ と置くと、

$$\text{上式} = \sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{p}_i||^2 - 2\boldsymbol{d}^T \boldsymbol{x} + ||\boldsymbol{x}||^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{p}_i||^2 + ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{d}||^2 - ||\boldsymbol{d}||^2$$

となる。これを最小にする $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{d}$ であり、このとき上式はさらに

$$\text{上式} = \sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{p}_i||^2 - ||\boldsymbol{d}||^2$$

と変形される。

すなわちラグランジュ双対問題は

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & \sum_{i=1}^{n} y_i ||\boldsymbol{p}_i||^2 - ||\sum_{i=1}^{n} y_i \boldsymbol{p}_i||^2 \\ \text{subject to} \quad & \sum_{i=1}^{n} y_i = 1, \ \ y_i \geq 0 \end{aligned}$$

と書くことができる。

この問題は線形制約のもとで 2 次関数を最小化する凸 2 次計画であり、非常に解き易い問題であることが知られている。実はこの問題の最適値は、もとの問題の最小包囲球問題の最適値と一致するのだが、それを示すにはある種の双対定理が必要である。