数値的最適化特論 (2)

2010 年 4 月 水野 眞治 (東京工業大学)

2 線形計画問題

2.1 線形計画問題とその例

- **例 2.1． 輸送問題**
- **例 2.2． 献立問題**
- **例 2.3． 割当問題**
- **例 2.4. L_1 近似問題**
- **等式標準形線形計画問題**

$$\begin{aligned} \text{目的：} \quad & c^T x \to \text{最小化}, \\ \text{条件：} \quad & Ax = b, \; x \geq 0. \end{aligned}$$

  任意の線形計画問題は、この等式標準形に変換できる.

- 線形計画問題の 3 つの場合
  - 実行可能解が存在しない.
  - 実行可能解は存在するが、最適解は存在しない.
  - 最適解が存在する.

2.2 双対問題

- 等式標準形線形計画問題の双対問題は次のようになる.

$$\begin{aligned} \text{目的：} \quad & b^T y \to \text{最大化}, \\ \text{条件：} \quad & A^T y \leq c. \end{aligned}$$

  スラック変数を導入すると

$$\begin{aligned} \text{目的：} \quad & b^T y \to \text{最大化}, \\ \text{条件：} \quad & A^T y + z = c, \; z \geq 0. \end{aligned}$$

  これを、双対等式標準形線形計画問題という.

- 双対問題の双対問題は主問題と一致する.

2.3　双対定理と相補性条件

- **定理 2.1. (弱双対定理)**

  1. x を主問題の実行可能解、(z, y) を双対問題の実行可能解とすれば
  $$c^T x \geq b^T y$$
  が成立する．このとき、等号が成立すれば、x は主問題の最適解、(z, y) は双対問題の最適解である．
  2. 主問題が実行可能であるが最適解を持たないならば、双対問題は実行不能である．

- 主問題と双対問題の目的間数値の差 $c^T x - b^T y$ を双対ギャップという。弱双対定理より、双対ギャップは 0 以上であり、0 ならば x と (z, y) はそれぞれの問題の最適解である。

- **定理 2.2. (双対定理)** 主問題が最適解を持つならば、双対問題も最適解を持ち、そのときの双対問題の最適値は主問題の最適値に等しい．

- **系 2.1．** 線形計画問題の主問題と双対問題に関する次の 4 つの条件はすべて同値である．
  - 主問題が最適解を持つ．
  - 双対問題が最適解を持つ．
  - 主問題と双対問題は、どちらも実行可能である．
  - 主問題と双対問題は、どちらも最適解を持つ．

- 主問題と双対問題の可能な組み合わせ

- **相補性条件**あるいは**相補スラック条件**

- **系 2.2.** 主問題の実行可能解 x と双対問題の実行可能解 (z, y) について、次の 4 つの条件はすべて同値である．
  - x と (z, y) は、それぞれ主問題と双対問題の最適解である．
  - $c^T x = b^T y$ が成立する．
  - $x^T z = 0$ が成立する．
  - $Xz = 0$ が成立する

  ここで、$X = \mathrm{diag}(x)$ はベクトル x の各要素を対角成分とする対角行列を表す．

2.4 最適解集合と強相補性条件

- **多面体**, **ファセット**, **面**, **稜** (一次元の面), **頂点**
- 面の**内部**, **境界**, **相対的内点**
- **強相補性条件：**相補性条件 + 相補ペアの片一方が正
- **定理 2.3.** 線形計画問題の主問題と双対問題が実行可能ならば、強相補性条件を満たす主問題の最適解と双対問題の最適解が存在する.
- **強相補解：** 強相補性条件を満たす解
- 強相補解 (x, z, y) において、$x_i = 0$ となっている添字の集合を N とし、$z_i = 0$ となっている添字の集合を B とする．このとき、次式が成立する.

$$N \cup B = \{1, 2, \cdots, n\} \quad \text{and} \quad N \cap B = \emptyset.$$

- **定理 2.4.** 強相補解を (x, z, y) とし、添字集合 N と B を上のように定める．このとき、$\Omega_P = \{x | Ax = b, x_N = 0, x_B \geq 0\}$ は主問題の最適解全体の集合であり．$\Omega_D = \{(z, y) | A^T y + z = c, z_B = 0, z_N \geq 0\}$ は双対問題の最適解の集合である.

2.5 線形計画問題の実行可能領域と最適解集合

2.5.1 等式標準形多面体と主問題の最適解集合

- **等式標準形多面体**

$$\Omega_P = \{\tilde{x} \in R^{\tilde{n}} | \tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}, \tilde{x} \geq 0\}.$$

- Ω_P が空でないとき、各非負変数 $\tilde{x}_i$ には次の 2 つの可能性がある.
  - Ω_P 上に $\tilde{x}_i > 0$ となるような要素 $\tilde{x}$ が存在する.
  - Ω_P 上では必ず $\tilde{x}_i = 0$ であり、$\tilde{x}_i > 0$ であるものは存在しない.

  前者の変数の添字集合を B_0、後者の添字集合を N_0 とおき、$\tilde{x}$ の対応する要素からなる部分ベクトルを $\tilde{x}_{B_0}$, $\tilde{x}_{N_0}$ と記す.

- 任意の $i \in B_0$ に対して $\tilde{x}_i > 0$ となる点 $\tilde{x}$ が存在する．それを等式標準形多面体 Ω_P の**相対的内点**という.
- 等式標準形多面体 Ω_P の**相対的内部**

$$\{\tilde{x} \in R^{\tilde{n}} | \tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}, \tilde{x}_{B_0} > 0, \tilde{x}_{N_0} = 0\}.$$

- 等式標準形多面体 Ω_P の**接空間**

$$\{\Delta\tilde{x} \in R^{\tilde{n}} | \tilde{A}\Delta\tilde{x} = 0, \Delta\tilde{x}_{N_0} = 0\}.$$

この接空間の次元を等式標準形多面体 Ω_P の次元と定義する．

- 等式標準形多面体 Ω_P の**境界**、**面**、**ファセット**、**頂点**、**稜**.

- **実行可能基底解**と**実行可能内点解**

- **定理 2.5.** 等式標準形線形計画問題の最適解の集合は, もしそれが存在するとすれば実行可能領域の面であり、その中に必ず頂点 (実行可能基底解) となっているものが存在する．この面を**最適面**という.

2.5.2　双対等式標準形多面体と双対問題の最適解集合 (略)

2.5.3　等式標準形多面体と双対等式標準形多面体の関係 (略)

2.6　退化

- $\tilde{m} \times \tilde{n}$ 行列 $\tilde{A}$ に対して、等式標準形多面体

$$\Omega_P = \{\tilde{x} \in R^{\tilde{n}} | \tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}, \tilde{x} \geq 0\}.$$

を考える．$\tilde{x}$ を Ω_P の頂点とするとき、$B_0 = \{i | \tilde{x}_i > 0\}$ と定義する．このとき、B_0 に含まれる添字 i の数が $\tilde{m}$ より少ないならば、$\tilde{x}$ を**退化**した頂点という.

- 線形計画問題は、その実行可能領域の多面体が退化した頂点を有するとき、**退化**しているという.

2.7　単体法

- 線形計画問題の行列 A の第 i 列のベクトルを a_i とする．行列 A のランクが m であるとき、n 個のベクトル $a_i (i = 1, 2, \cdots, n)$ から一次独立な m 個のベクトルを選ぶことができ、その時の添字集合を

$$B = \{i_1, i_2, ..., i_m\}$$

とする．その他の $n - m$ 個のベクトルの添字集合を N とする．つまり、

$$B \cup N = \{1, 2, \cdots, n\} \quad \text{and} \quad B \cap N = \emptyset$$

となる．行列 A、ベクトル x と c の要素の順を入れ替え、

$$A = (A_B, A_N), \quad x = (x_B, x_N), \quad c = (c_B, c_N)$$

となっているとする．このとき、元の線形計画問題は

$$\begin{aligned} \text{目的：}\ & c_B^T x_B + c_N^T x_N \to \text{最小化}, \\ \text{条件：}\ & A_B x_B + A_N x_N = b,\ x = (x_B, x_N) \geq 0. \end{aligned}$$

と表せる．したがって、

$$x_B = A_B^{-1} b, \quad x_N = 0$$

とすれば、$x = (x_B, x_N)$ は等式条件を満たす．この x を基底解という．変数 $x_i (i \in B)$ を基底変数、$x_i (i \in N)$ を非基底変数、A_B を基底と呼ぶ．

- 基底解の数は高々$C_m^n = \frac{n!}{m!(n-m)!}$ である．

- 基底解 x が条件 $x \geq 0$ を満たすならば、実行可能基底解とよばれる．

- 同様に、$z = (z_B, z_N)$ とすれば、双対問題は

$$\begin{aligned} \text{目的：}\ & b^T y \to \text{最大化}, \\ \text{条件：}\ & A_B^T y + z_B = c_B, \\ & A_N^T y + z_N = c_N,\ z = (z_B, z_N) \geq 0. \end{aligned}$$

となる．したがって、

$$y = (A_B^T)^{-1} c_B, \quad z_B = 0, \quad z_N = c_N - A_N^T (A_B^T)^{-1} c_B$$

とすれば、$(z, y) = (z_B, z_N, y)$ は等式条件を満たす．この (z, y) を双対問題の基底解という．

- 同じ基底行列 A_B に対する、主問題の基底解 (x_B, x_N) と双対問題の基底解 (z_B, z_N, y) では

$$x^T z = x_B^T z_B + x_N^T z_N = 0$$

が成立する．したがって、これらの基底解がともに実行可能 (非負条件を満たす) ならば、それぞれの問題の最適解となる．

- **定理 2.8.** 主問題が最適解を持つ (したがって双対問題も最適解を持つ) ならば、ある基底に対して、主問題の基底解と双対問題の基底解が実行可能 (したがって最適解) となる．

- **単体法**とは、異なる基底解を生成し、最適な基底解を得るまで反復を繰り返す方法である．

- **単体法のアルゴリズム**

  ステップ 0: 主問題の実行可能基底解をひとつ見つける．

  ステップ 1: 最適解ならば終了する．さもなければ、目的関数が増加しないように基底変数と非基底変数を一組入れ替え新しい実行可能基底解を求める．

  ステップ 2: ステップ 1 へ戻る．

- **2 段階単体法**、**主単体法**、**双対単体法**、**十文字法**

- 同じ基底解を 2 度以上生成しない工夫に**辞書式規則**や**最小添字規則**等がある．

2.8 内点法

- **内点法**は、線形計画問題の (実行可能) 内点を初期点として、最適解に収束する内点列を生成する方法である．

- **主内点法**、**双対内点法**、**主双対内点法**.

- **内点法のアルゴリズム**

  ステップ 0: 初期内点をひとつ見つける．

  ステップ 1: 最適解に十分近ければ終了する．さもなければ、内点を更新する．

  ステップ 2: ステップ 1 へ戻る．

- **中心パス**：$\nu > 0$ に対して、次の関数を最小化する点の集合

$$c^T x - \nu \sum_{i=1}^n \log x_i \quad (\text{主問題の場合})$$
$$-b^T y - \nu \sum_{i=1}^n \log z_i \quad (\text{双対問題の場合})$$

  ここで、関数 $-\sum_{i=1}^n \log x_i$ と $-\sum_{i=1}^n \log z_i$ は、それぞれの実行可能多面体の対数障壁関数と呼ばれる．

- 一般に多面体が有界で内点が存在するならば、対数障壁関数を最小化する点が存在し、それを**解析的中心**という．

- 内点法では、問題に次の同値な条件のうちの一つを仮定する．

  - 主問題には実行可能内点解が存在し、その最適解集合は有界である．
  - 双対問題には実行可能内点解が存在し、その最適解集合は有界である．
  - 主問題と双対問題には実行可能内点解が存在する．

- 初期点と人工問題

- **実行可能点列内点法**と**非実行可能点列内点法**

2.9 単体法と内点法

- 線形計画問題は組合せ的な性質と連続的 (解析的) な性質を持ち合わせている．(単体法と内点法)

- 線形計画問題の 5 つの最適条件

  (1) $Ax = b$

  (2) $x \geq 0$

(3) $A^T y + z = c$

(4) $z \geq 0$

(5) $Xz = 0$

- 次に示すアルゴリズムでは、左側に示した条件をみたす点列を生成し、右側の条件が成立したときに最適解を得る。左側の条件が多いアルゴリズムでは、初期点をいかに求めるかという問題がある。
  - 主単体法:(1)(2)(3)(5) → (4)
  - 双対単体法: (1)(3)(4)(5) → (2)
  - Criss-Cross 法: (1)(3)(5) → (2)(4)
  - 実行可能点列主双対内点法: (1)(2)(3)(4) → (5)
  - 非実行可能点列 (主双対) 内点法: (2)(4) → (1)(3)(5)

2.10 線形計画問題のサイズと計算複雑度の理論

- **計算複雑度：多項式オーダー**と**指数オーダー**
- **線形計画問題のサイズ** L:

$$L = \lfloor \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} \log_2(|a_{ij}| + 1) + \sum_{j=1}^{n} \log_2(|b_j| + 1) + \sum_{i=1}^{m} \log_2(|c_i| + 1) + \log_2(mn) \rfloor + 1.$$

- 任意の基底解は、分母と分子の大きさが高々$2^L/(mn)$ の分数で表すことができる.
- 2 つの基底解で目的関数値が異なるならば、その差は 2^{-2L} 以上である.
- **定理** **2.9.** 線形計画問題のサイズを L とするとき、最適解が存在するならば次の事実が成立する.
  - 最適値との差が 2^{-2L} 以下の近似最適解さえ得られれば、あとは $O(n^3)$ 回の四則演算で厳密な最適解が得られる.
  - 最適値の絶対値は 2^{2L} で押さえられ、その各座標の絶対値が 2^L で押さえられるような最適 (基底) 解が存在する.
- **命題** **2.1.** w を現在の点とし、w^+ をアルゴリズムで計算される次の点とする. n, m, L の関数 $f(n, m, L) > 1$ が存在し、任意の w に対し

$$\frac{g(w^+)}{g(w)} \leq 1 - \frac{1}{f(n, m, L)}$$

が成立するならば、$g(w)$ の値を 2^{L_1} から 2^{-L_2} まで減少させるのに必要な反復回数は高々 $f(m, n, L)(L_1 + L_2)$ である.