第14回:1月13日(水)

14 第14回

最終回は、最小木問題を取り上げ、整数計画問題と緩和した線形計画問題の間のギャップについて勉強する.

14.1 整数計画問題と緩和した線形計画問題

離散最適化問題の多くは整数計画問題として定式化することができ、この場合、制約は通常、線形制約であるので、整数線形計画問題とも呼ばれる.整数線形計画問題は線形計画問題に変数の整数制約が課されたものと考えることができる.当然、一般には整数線形計画問題 IP と変数の整数制約を外した線形計画問題 LP では最適解が一致する保証はない.

スライド2では赤い線の枠で線形計画問題LPの例を示している。右の図にこの線形計画問題LPの最適解を赤い点で表してある。このLPに青い枠の変数の整数制約を課した問題を整数線形計画問題IPとしたとき、右の図ではこのIPの最適解を青い点で表してある。

直感的には、整数線形計画問題 IP の最適解と緩和した線形計画問題 LP の最適解はほぼ同じ値に思えるが、LP の最適解を単純に整数値へ丸めるだけでは整数線形計画問題 IP の最適解となる保証はない。すなわち、両者の最適値にはギャップがあることが多い。スライド 3 では線形計画問題 LP の最適解を赤い点で示してあるが、整数線形計画問題 IP の最適解である青い点は、赤い点の付近にある格子点からは遠く離れている。これは極端な例として作成したものであるが、一般に次元(変数の個数)が大きくなると、整数値への丸め方自体が膨大になる。

一方で、多項式時間で解くことのできる離散最適化問題の多くは整数線形計画問題 IP として定式化した際に、線形の目的関数をどのように変えても、緩和した線形計画問題 LP との間にギャップを持たないという良い性質がある。スライド4ではそのような線形計画問題 LP の実行可能領域を図示してある。ある目的関数に対する LP の最適解を赤い点で、IP の最適解を青い点で示してある。両者が格子点上で一致している。目的関数を変えても、両者が一致するということは線形計画問題 LP の実行可能領域の端点が格子点であることになる。このように都合の良い線形計画問題が存在するのかと思われるかもしれないが、これまで勉強した二部グラフの最大マッチング問題などの離散最適化問題はうまく整数線形計画問題 IP に定式化すれば、線形計画問題 LP との間にギャップが生じないようにできることが知られている。最終回の講義では最小木問題に対してこの性質を確かめる。

14.2 最小木問題の整数計画問題への定式化

グラフG = (V, E)の連結全域部分グラフ(V, T)で閉路を持たないものをGの全域木と呼ぶ。簡単のため、その枝集合Tだけで全域木と呼ぶ。

最小木問題

入力: 連結な単純無向グラフG=(V,E), 正の枝重み $w:V\to\mathbb{R}_+$.

出力: G の全域木 $T\subseteq E$ の中で重み和 $w(T)=\sum_{a\in T}w(a)$ を最小にするもの.

n=|V| とする.ここで,枝重みを正の値に限定しているのは一般性を失っていない.何故なら,全域木に含まれる枝の本数は n-1 であることから,枝の重みを一律の値 a だけ増加させても,全域木の重み和の変化は (n-1)a の一定の値であるため,問題の最適解の集合に変化がないからである.

重み和を最小にする全域木を最小木と呼ぶ. クラスカル法あるいはプリム法と呼ばれるアルゴリズムを使えば最小木問題は多項式時間で解くことができる.

最小木問題の整数計画問題への定式化1

最小木問題を整数線形計画問題として定式化してみよう. まず, 各枝 $e\in E$ を最小木の枝として選ぶか, 選ばないを決める 0,1-変数 x(e) を用意する. これで最小化すべき目的関数は $\sum_{e\in E}w(e)x(e)$ と決まる. 残るは, x(e)=1 となる枝 $e\in E$ の集合 F が全域木となるように線形の制約を導入するだけである. 枝の部分集合 $F\subset E$ が全域木であることの必要十分条件は

- (i) *F* が閉路を含まないこと;
- (ii) グラフのどの $2 \le u, v \in V$ も F の枝のパスでつながっていること

である. (i) については重みが正であるので (ii) さえ満たしていれば目的関数を最小化する際に、 閉路は生じなくなる. 何故なら、閉路があれば閉路上の任意の 1 本を除いてもグラフの 2 点間の 連結性は変わらないため.

(ii) はパスを確保する話なので、第8回の演習課題の解答例で用いたフローを利用した制約条件も考えられるが、ここでは、パスの双対の概念であるカットを基本とした制約条件を使うことにする.

枝の部分集合 $F \subseteq E$ がどこかの 2 点 $u,v \in V$ をパスでつないでいないときは,(V,F) は連結グラフではなく, 2 個以上の連結成分を持つ.このとき,一つの連結成分 $X \subseteq V$ を選ぶと,残りの点の集合 $V \setminus X$ と X の間には F の枝がない状況が発生しているはずである.この状況が起きないように制約を作ることを考える.

カットとはグラフの点の集合 V を空でない二つの部分集合 X と $V\setminus X$ に分割したときに,X と $V\setminus X$ の間にまたがっている枝の集合である.この枝の集合を $E(X,V\setminus X)$ と記す.そこで,グラフの点の集合 V の各部分集合 X (ただし $\emptyset\neq X\neq V$) に対して,カット $E(X,V\setminus X)$ の中

の少なくとも $1 \pm e$ の枝が選ばれる (x(e) = 1) となる)ように制約を作ると以下が得られる.

$$\sum_{e \in E(X, V \setminus X)} x(e) \ge 1, \ \forall X \subseteq V : \ \emptyset \ne X \ne V.$$
 (11)

(11) を制約式として用いた最小木問題を整数線形計画問題の定式化 IP1 をスライド 5 に示す. (11) が満足されていれば,グラフの点集合 V のどんな分割 X, $V\setminus X$ の間にも x(e)=1 なる枝が存在するので,x(e)=1 である枝の集合 F は連結な全域グラフを与える.定式化 IP1 は最小木問題を正しく表現している.

この定式化 IP1 を見て,(11) に現れる制約条件の個数が $2^{n-1}-1$ 程度あり,これは最小木問題の入力サイズ n=|V|, |E| の指数関数であることに気付くかもしれない.そのような整数線形計画問題や緩和線形計画問題は効率よく取り扱えないのではないかと思うであろう.確かに,この整数線形計画問題あるいは緩和線形計画問題を CPLEX などのソルバーで 1 回で解こうとすると指数関数個の制約条件をすべて書き下して与えなければならないので,n が少し大きくなると実行できなくなる.しかし,この定式化では,用意するべき制約はカットという概念から組織的に生成できるので,最初からすべての制約式を書き下さずに,反復して問題を解くアルゴリズムを考えることができる.毎回,問題を解いて得た解を分析して,最適解を得るために必要な制約を生成して追加することを繰り返す方法である.それと,今回の講義では整数線形計画問題と緩和線形計画問題の間にギャップがあるかどうかを議論するだけであるので,計算時間は直接は関係しない.

では,この整数線形計画問題 IP1 の整数制約を連続変数に緩和した線形計画問題 LP1 を考えよう.スライド 5 の左下の図を参照.LP1 では x(e) は 0.5 などの実数値を取ることができる.実は,IP1 と LP1 ではギャップが生じる.枝重みを $w(e)=1, e\in E$ とする.このとき,スライド 5 の右下の図のように,グラフが長さ 4 の閉路であるとする.この場合の最小木の重みは 3 本の枝を選ぶので,最適値が 3 になる.しかし,線形計画問題 LP1 の実行可能解として, $x(e_i)=0.5, i=1,2,3,4$ を選ぶことができる.何故なら,グラフの点集合 V のどんな分割 X, $V\setminus X$ の間の枝 e の変数 x(e) の和が 1 以上になっているため.このときの目的関数の値は $\sum_{e\in E} w(e)x(e)=0.5\times 4=2$ となり,IP1 の最適値より小さくなっている.IP1 と LP1 の間には最適値のギャップが存在する.

最小木問題の整数計画問題への定式化2

整数線形計画問題 IP1 と緩和した線形計画問題 LP1 のギャップを縮めるにはどうしたらよいか. 制約式の本数はいま気にしなくてよい. スライド 5 の長さ 4 の閉路のグラフの例がもつ LP1 の実行可能解 $x(e_i)=0.5, i=1,2,3,4$ を排除するような制約を加えられないであろうか. この例では 4 個の点があるので,これらを連結につなぐには最低でも 4-1=3 個の枝が必要である. (11) の制約の意味はグラフの点集合を二つのグループに分けたら,その間の枝の中で 1 本は枝を選ばなくてはならないということである.そこで,単に点が 4 個のグラフではなく,一般に,グラフの点集合を 4 個のグループに分けたとすると,グループをまたがる枝の中で 3 本は枝を選ばなくてはならないことが分かる.

そこで,グループの個数を 2 個や 4 個に限らず,グラフの点集合 V の空でない部分集合への分割

$$\pi = \{X_1, X_2, \dots, X_k\}$$

(ここで $\emptyset \neq X_i \neq V, i = 1, 2, ..., k; \ X_i \cap X_j = \emptyset, 1 \le i < j \le k; \ \cup_{i=1, 2, ..., k} X_i = V$)

を考える.ここで π はあるひとつの分割を表す記号であるとし, $|\pi|$ で分割内のグループ数, $E(\pi)$ でグループをまたがる枝の集合を表すとする.スライド 6 の右の図参照. $\pi=\{X_1,X_2,\ldots,X_k\}$ であれば, $|\pi|=k$, $E(\pi)=\{uv\in E\mid u\in X_i,v\in X_j,1\leq i< j\leq k\}$ である.グラフの点集合 V のすべての分割 π の集合を Π と記す.

点集合 V の分割 $\pi \in \Pi$ に対し, π には $|\pi|$ 個のグループがあり,グループをまたがる枝の集合 $E(\pi)$ からグループ数マイナス 1 の $|\pi|-1$ 本の枝を選ばなくては $|\pi|$ 個のグループを連結にできない.そこで次の制約式を用意することができる.

$$\sum_{e \in E(\pi)} x(e) \ge |\pi| - 1, \ \forall \pi \in \Pi.$$

$$\tag{12}$$

(12) を制約式として用いた最小木問題の整数線形計画問題による定式化 IP2 をスライド 6 の左上の図に示す。これは (11) を特別な場合に含み,さらに多くの不等式制約を追加したものである。IP2 の変数の整数制約を緩和した線形計画問題 LP2 をスライド 6 の左下の図に示す。

定理 4. 整数線形計画問題 IP2 と緩和した線形計画問題 LP2 はギャップを持たない(同じ最適値をもつ).

14.3 定理4の証明

定理4を証明するための筋道を最初に示しておこう.

- 1. IP2 の最適な実行可能解x (重み最小の全域木T) をクラスカル法を用いて求める.
- 2. 1 で求めた全域木 $T=\{a_1,a_2,\ldots,a_{n-1}\}\subseteq E$ の枝の重み和 $\sum_{i=1,2,\ldots,n-1}w(a_i)$ を別の観点での和 $\sum_{i=1,2,\ldots,n-1}\Delta_i imes(n-1-i)$ に置き換える.
- 3. 線形計画問題 LP2 の双対線形計画問題 D を用意する. ここで f(x) を IP2 の解 x に対する目的関数, g(y) を D の解 y に対する目的関数とする. 定理 4 を証明するには

$$f(x) = g(y) \tag{13}$$

を満たす IP2 の実行可能解 x(全域木)と D の実行可能解 y の組の存在を示せば十分であることを確認する.

4. 双対問題 D の意味を解釈する.2 で求めた全域木 $T=\{a_1,a_2,\ldots,a_{n-1}\}$ の枝の重み和 $\sum_{i=1,2,\ldots,n-1}\Delta_i\times(n-1-i)$ に基づくと,(13) を満たす D の実行可能解 y が得られることを示す.

段階1.最小木問題を解くクラスカル法は簡単な貪欲法である. 枝を重みの小さい順に全域木の枝として選んでいき, 作りかけの森に選んだ枝を加えて閉路ができるときには加えずに破棄する. これを全域木が得られるまで繰り返す. こうして得られた全域木が重み最小であることも段階4で証明できる.

これからは,最小木問題を以下のように例えて,クラスカル法の計算の動きを考える.瀬戸内海にn個の島があり,これらをn-1本の橋でつなぎ全島間で往来できるようにしたい(二つの島は直接橋が架かっていなくても他の島を経由して到達可能であればよい).橋を架けることができる 2 島の組合せと建設費用は事前に分かっている.各島をグラフの点,橋を架けることができる 2 島間には枝を張り,その枝重みをその橋の建設費用とすれば,最小費用で全島間で往来できるように橋を架ける問題は最小木問題となる.

スライド 7 に最小木問題の例として,四つの島 v_1, v_2, v_3, v_4 があり,橋を架けられる場所(枝)が 5 か所ある.枝の傍にある数値が建設費用(枝重み)である.

クラスカル法の1回目の反復で、四つの島の間にある最も重みの小さい枝 v_1v_4 が答えの最初の枝 a_1 として選ばれる.この枝の重みは $w(a_1)=w(v_1v_4)=1$ である.スライド 7 の [1] 参照.橋 $a_1=v_1v_4$ を架けたことで、島 v_1 と島 v_4 でひとつの島 $\{v_1,v_4\}$ になったと見なす.島の数は 3となった.

2回目の反復で、三つの島の間にある最も重みの小さい枝 v_1v_3 が答えの 2 番目の枝 a_2 として選ばれる.この枝の重みは $w(a_2)=w(v_1v_3)=2$ である.スライド 7 の [2] 参照.橋 $a_2=v_1v_3$ を架けたことで、島 $\{v_1,v_4\}$ と島 v_3 でひとつの島 $\{v_1,v_3,v_4\}$ になったと見なす.島の数は 2 となった.

3回目の反復で、二つの島の間にある最も重みの小さい枝 v_1v_2 が答えの 3 番目の枝 a_3 として選ばれる.この枝の重みは $w(a_3)=w(v_1v_2)=5$ である.スライド 7 の [3] 参照.橋 $a_3=v_1v_2$ を架けたことで、島 $\{v_1,v_3,v_4\}$ と島 v_2 でひとつの島 $\{v_1,v_2,v_3,v_4\}$ になったと見なす.島の数は 1 となった.すなわち $\{a_1=v_1v_4,a_2=v_1v_3,a_3=v_1v_2\}$ は全域木となり計算終了.スライド 7 の [4] 参照.かかった費用は $w(a_1)+w(a_2)+w(a_3)=1+2+5=8$ である.

以上がこの例題にクラスカル法を適用したときの動きである.

段階2.段階1で確認した動きをもう一度なぞる.問題を解く前には最終的な建設費用がどれだけかかるのか分からないとする.そして、計算の途中の段階で、最低限かかる費用を(その時点で判明した分だけ)できるだけ多く計上することにしよう.段階1ではその都度架けた橋の分しか必要な経費がかかっていないが、数学的洞察力を持った技師がいたら以下のように必要経費を算出するかもしれない.

クラスカル法の 1 回目の反復で、四つの島をつなぐには 3 本の橋が必要で、ひとつの橋の最低費用 Δ_1 は橋 $a_1=v_1v_4$ の費用 $w(a_1)=1$ であるから、3 本の橋を架けるには $\Delta_1\times 3=3$ の費用が最低でも掛かることが分かる。そこで、この時点で費用 $3=\Delta_1\times 3$ を計上する。スライド 8の [1] 参照。橋 $a_1=v_1v_4$ を架けたことで、島 v_1 と島 v_4 でひとつの島 $\{v_1,v_4\}$ になった。後の計

算で、ここで計上した費用が二重に計上されないように、4 島間の各橋の費用を Δ_1 だけ減じておく、スライド 8 の [2] 参照、

2回目の反復で,三つの島をつなぐには2本の橋が必要で,橋の最低費用 Δ_2 は橋 $a_2=v_1v_3$ の現在の費用で最小の $w(a_2)-\Delta_1=1$ であるから,2本の橋を架けるには $\Delta_2\times 2=2$ の費用が掛かることが分かる.そこで,この時点で費用 $2=\Delta_2\times 2$ を計上する.スライド 8 の [2] 参照.橋 $a_2=v_1v_3$ を架けたことで,島 $\{v_1,v_4\}$ と島 v_3 でひとつの島 $\{v_1,v_3,v_4\}$ になった.後の計算で,ここで計上した費用が二重に計上されないように,3 島間の各橋の費用を Δ_2 だけ減じておく.スライド 8 の [3] 参照.

3回目の反復で、二つの島をつなぐには 1 本の橋が必要で、橋の最低費用 Δ_3 は橋 $a_3=v_1v_2$ の現在の費用で最小の $w(a_3)-\Delta_1-\Delta_2=3$ であるから、2 本の橋を架けるには $\Delta_3\times 1=3$ の費用が掛かることが分かる。そこで、この時点で費用 $3=\Delta_3\times 1$ を計上する。スライド 8 の [3] 参照。橋 $a_3=v_1v_2$ を架けたことで、島 $\{v_1,v_3,v_4\}$ と島 v_2 でひとつの島 $\{v_1,v_2,v_3,v_4\}$ になった。後の計算で、ここで計上した費用が二重に計上されないように、2 島間の各橋の費用を Δ_3 だけ減じておく。スライド 8 の [4] 参照。

島の数は 1 となり $\{a_1=v_1v_4,a_2=v_1v_3,a_3=v_1v_2\}$ は全域木となり計算終了. 計上した費用の合計は 3+2+3=8 である. これは、段階 1 で選んだ枝の重み和 $w(a_1)+w(a_2)+w(a_3)=1+2+5=8$ と等しい、実際、計上した費用の合計は

$$\Delta_1 \times 3 + \Delta_2 \times 2 + \Delta_3 \times 1 = \Delta_1 + (\Delta_1 + \Delta_2) + (\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3) = w(a_1) + w(a_2) + w(a_3)$$

である.スライド 8 の例題は 4 個の点しかもたないが,一般に n 個の点のグラフの例題でも,クラスカル法が n-1 の枝 a_1,a_2,\ldots,a_{n-1} を選んだとき,これらの重み和 $w(a_1)+\cdots+w(a_{n-1})$ と各反復で計上された経費 $\Delta_i \times (n-1-i), i=1,2,\ldots,n-1$ の和は等しくなる.つまり

$$\sum_{i=1,2,\dots,n-1} w(a_i) = \sum_{i=1,2,\dots,n-1} \Delta_i \times (n-1-i).$$
(14)

段階3. スライド6の左下の図に示す最小化線形計画問題 LP2 は標準形であるので,前回の講義で復習したように,変数と制約式の役割を入れ替えた双対線形計画問題 D をスライド9の下の図のように得ることができる。 IP2 の実行可能解x, LP2 の最適解を x_{LP2}^* ,双対問題 D の最適解を y_{D}^* ,双対問題 D の実行可能解をy とすると,前回の講義で勉強したように常に以下の不等式が成り立つ。

$$f(x) \ge f(x_{\text{LP2}}^*) = g(y_{\text{D}}^*) \ge g(y).$$
 (15)

従って,(13) を満たす IP2 の実行可能解 x,双対問題 D の実行可能解を y の組が見つかれば,は さみうちにより $f(x)=f(x_{\rm LP2}^*)=g(y_{\rm D}^*)=g(y)$ が成り立ち, $f(x)=f(x_{\rm LP2}^*)$ から f(x) は IP2 の最適値, $f(x_{\rm LP2}^*)$ は LP2 の最適値となり,両者は同じ値であるので定理 4 が証明されたことに なる.

段階4.双対問題 D の意味を考えてみる.

変数:グラフの点集合 V の各分割 $\pi \in \Pi$ ごとに一つの非負実数変数 $y(\pi)$ が用意されている.膨大な個数の変数が導入されているが,実際に正の値を取る変数としては n-1 個しか使わないで済むことがこの後で分かる.

目的関数 $g(y):y(\pi)$ の値に応じて目的関数 g(y) では, $|\pi|-1$ (π のグループ数マイナス 1)の寄与がある.最大化問題 D であるので,グループ数の多い分割 π に対する実数 $y(\pi)$ の値を大きくするほど得になる.

制約条件:各実数変数 $y(\pi)$ を大きくしたいが、制約条件により制限されている。制約条件はグラフの各枝 $e \in E$ ごとに用意されており、枝 $e \in E$ に対する制約は

枝 e がグループ間に現れるような分割 $\pi \in \Pi$ (つまり $e \in E(\pi)$)に対応する変数 $y(\pi)$ の値の総和は w(e) 以下

である.ここで, $y(\pi)$ の値を δ にする場合には,この分割 π のグループ間に現れるどの枝 $e \in E(\pi)$ からも w(e) から一定量 δ の資源を消費すると考えることができる.同じ枝 e は異なる分割のグループ間にも現れるが,そのような分割 π により消費される量 $y(\pi)$ の総和は,供給できる資源の上限 w(e) を超えられないということである.

段階 1 で求められた全域木 $T=\{a_1,a_2,\ldots,a_{n-1}\}$ を整数線形計画問題 IP2 の実行可能解 x としたとき,(13) を満たす双対変数 $y(\pi),\pi\in\Pi$ を求めよう.

まず、スライド 8 の例を用いて説明する.この計算の過程で全域木 $T=\{a_1,a_2,a_3\}$ の構築に関わるような分割は以下の三つしかない.

$$\pi_1 = \{\{v_1\}, \{v_2\}, \{v_3\}, \{v_4\}\}, \ \pi_2 = \{\{v_1, v_4\}, \{v_2\}, \{v_3\}\}, \ \pi_3 = \{\{v_1, v_3, v_4\}, \{v_2\}\}.$$

 π_1 は反復 1 での青い四つの島に, π_2 は反復 2 での赤い三つの島に, π_3 は反復 3 での緑の二つの島にそれぞれ対応している.これらに対応する双対変数の値を

$$y(\pi_1) = \Delta_1 = 1, \ y(\pi_2) = \Delta_2 = 1, \ y(\pi_3) = \Delta_3 = 3$$

と定め、この他の双対変数の値は0とする.

一般にn 点を持つグラフの場合では、 π_i を反復i における島(グループ)に対応する分割とし、この双対変数 $y(\pi_i)$ の値を Δ_i と定める.この他の双対変数の値は0 とする.この双対変数y の定め方が双対問題 D の制約条件を満たすことを計算の反復 $i=1,2,\ldots,n-1$ に沿って示す.

すべての双対変数の値を 0 と初期化した後,反復 1 では,分割 π_1 のグループ間にある枝 $e \in E(\pi_1)$ の最小の重み $\Delta_1 = w(a_1)$ に対して,グループ間の枝 $e \in E(\pi_1)$ の重みを Δ_1 だけ減らす.これは $y(\pi_1) := \Delta_1$ と設定し, $y(\pi_1)$ を左辺に含む各制約式において,両辺から Δ_1 を引き算していること対応する.

一般にn 点を持つグラフの場合でも,以下同様に,反復i では,分割 π_i のグループ間にある枝 $e \in E(\pi_i)$ の(反復 $1,2,\ldots,i-1$ で消費した後の) 最小の重み $\Delta_i = w(a_i) - \Delta_1 - \Delta_2 \cdots - \Delta_{i-1}$ に対して,グループ間の枝 $e \in E(\pi_i)$ の重みを Δ_i だけ減らす.これは $y(\pi_i) := \Delta_i$ と設定し, $y(\pi_i)$ を左辺に含む各制約式において,両辺から Δ_i を引き算していること対応する.

すなわち,どの反復 i においても双対変数 $y(\pi_i)$ の値を定めるとき制約条件に違反しないように決めている.従って, $y(\pi_i)=\Delta_i, i=1,2,\ldots,n-1$ は非負であり,制約条件を満たしている. 性質 (14) を書き換えると

$$\sum_{i=1,2,\dots,n-1} w(a_i) = \sum_{i=1,2,\dots,n-1} y(\pi_i) \times (|\pi_i| - 1)$$

を得る. これは(13)のことである.

以上から、段階 1 でクラスカル法により求められた全域木 $T = \{a_1, a_2, \ldots, a_{n-1}\}$ は整数線形計画問題 IP2 の実行可能解 x であり、段階 2 、4 で求めた双対変数 $y(\pi_i) = \Delta_i, i = 1, 2, \ldots, n-1$ (これら以外の双対変数の値は 0) は非負であり、双対問題 D の制約条件を満たす。また、(13) が成り立つことから段階 3 の議論により定理 4 が証明された。

【課題14-1】スライド11で示した重み付きグラフに対しクラスカル法を適用し、その過程で緩和した線形計画問題 LP2の双対問題 Dの変数の値の決定される様子をスライド 10 と同様に図を描いて示せ、主問題と緩和した線形計画問題の双対問題の最適値が一致することを確認せよ、

第14回の講義は以上である.