しっかり学ぶ 数理最適化 (仮題)

モデルからアルゴリズムまで ―

梅谷 俊治*1

2020年4月10日

^{*1} 大阪大学大学院情報科学研究科

記号一覧

 $\delta(S)$

E(S)

実数全体の集合, 非負実数全体の集合 \mathbb{R}, \mathbb{R}_+ 整数全体の集合, 非負整数全体の集合 \mathbb{Z}, \mathbb{Z}_+ |S|集合 S の位数 (集合 S に含まれる要素数) $oldsymbol{x}^{ op},\,oldsymbol{A}^{ op}$ ベクトルxの転置ベクトル,行列Aの転置行列 $\det \boldsymbol{A}$ 正方行列 A の行列式 \boldsymbol{I} 単位行列 \widetilde{A} 正方行列 A の余因子行列 $\| oldsymbol{x} \|$ ベクトルxのユークリッドノルム $(\sqrt{x^{ op}x})$ o(x)ランダウの o-記法 オーダー記法 (ランダウの O-記法) O(x) $\lceil x \rceil$ x の切り上げ (x 以上の最小の整数) |x|x の切り下げ (x 以下の最大の整数) $\log x$ ネイピア数 e を底とする x の対数 クロネッカーのデルタ $(x = y \text{ ならば } 1, x \neq y \text{ ならば } 0 \text{ を取る関数})$ $\delta(x,y)$ G = (V, E) 頂点集合を V, 辺集合を E とするグラフ 頂点 u,v をつなぐ有向辺 e = (u, v)頂点 u,v をつなぐ無向辺 $e = \{u, v\}$ $\delta^+(v)$ 頂点 v を始点とする辺集合 頂点 v を終点とする辺集合 $\delta^-(v)$ 頂点 $v \in V \setminus S$ と頂点集合 S をつなぐ辺集合 $\delta(v,S)$

カット (頂点集合 $S と V \setminus S$ をつなぐ辺集合)

両端点 u,v がともに頂点集合 S に含まれる辺 (u,v) の集合

第1章

数理最適化入門

計算機の速度が3桁、アルゴリズムの速度が3桁、合わせて求解の速度が6桁向上することで、10年前には解くのに1年かかる問題が今では30秒もたたずに解けるようになった。もちろん、問題が解けるまで1年も待つ人はいないし、少なくとも私の周りにそんな人はいない。このような進歩が持つ本当の価値を実際に測ることは難しいが、それでも事実である。最適化アルゴリズムにより以前は求解が困難だと思われていた現実世界の問題が解けるようになったことで、まったく新しい分野への応用が拓かれたことは間違いない。

R. E. Bixby, Solving real-world linear programs: A decade and more of progress, *Operations Research* **50** (2002), 3–15.

数理最適化 (mathematical optimization)*1は、与えられた制約条件の下で目的関数の値を最小 (もしくは最大) にする解を求める最適化問題を通じて、現実社会における意思決定や問題解決を実現する手段である。本章では、数理最適化の概略をいくつかの例とともに説明する。

1.1 数理最適化とは

最適化問題 (optimization problem) は、与えられた制約条件の下で目的関数の値を最小 (もしくは最大) にする解を求める問題であり、産業や学術を始めとする幅広い分野における多くの重要な問題が最適化問題として定式化できる。数理最適化は、最適化問題を通じて現実社会における意思決定や問題解決を実現する手段であり、図 1.1 に示すように、(1) 最適化問題の定式化、(2) アルゴリズムによる求解、(3) 結果の検証、(4) 最適化問題とアルゴリズムの再検討という一連の手続きからなる*2.

^{*1} 数理計画 (mathematical programming) とも呼ぶ.

 $^{^{*2}}$ この一連の手続きが 1 回で終わることはまれで、妥当な解決策が得られるまで繰り返し再検討を行うことが多い。

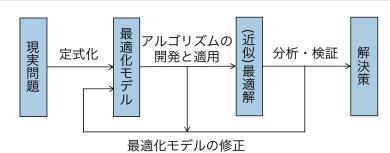


図 1.1 数理最適化の手続き

表 1.1 野菜ジュースの原料

	食物繊維	ビタミン C	鉄分	βカロチン	価格 (円)
トマト	10	15	2	5	400
にんじん	25	5	2	80	250
ほうれん草	30	35	20	40	1000
必要量 (単位)	50	60	10	40	

数理最適化を用いて現実問題を解決するためには、まず、現実問題を最適化問題に定式化する必要がある。最適化問題は、定数、変数、制約条件、目的関数の要素からなる。最適化問題を解くアルゴリズムをシステムとして捉えると、入力データ(既知)が定数に、出力データ(未知)が変数に該当する。制約条件はシステムの内部における変数間の関係を、目的関数は状態の良し悪しを表す。

具体的な例を通じて最適化問題を説明しよう。ある飲料メーカーでは、トマト、にんじん、ほうれん草を原料とする野菜ジュースを製造している。表 1.1 に示すように、野菜 1 kg に含まれる栄養素の単位数、野菜 1 kg 当たりの価格 (円)、野菜ジュース 2 L に含まれる栄養素の必要量 (単位) が与えられる。このとき、野菜ジュースに含まれる食物繊維、ビタミン C、鉄分、 β カロチンの必要量を満たしつつ、製造に要する原料費を最小にするには、どの野菜をどれだけ購入すれば良いのだろうか?

この問題を最適化問題に定式化しよう。トマト,にんじん,ほうれん草の購入量 (kg) を それぞれ変数 x_1,x_2,x_3 で表すと,原料費 (P) は $400x_1+250x_2+1000x_3$ と表せる。また,野菜ジュースに含まれる食物繊維の必要量を満たす条件は, $10x_1+25x_2+30x_3 \geq 50$ と表せる。ビタミン C,鉄分, β カロチンの必要量を満たす条件も同様に表せる。これらをまとめると,野菜ジュースの製造に要する原料費を最小にする野菜の購入量を求める

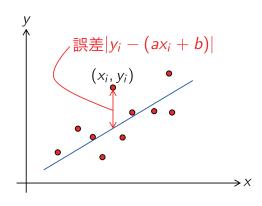


図 1.2 回帰問題の例

問題は以下の最適化問題に定式化できる.

最小化
$$400x_1 + 250x_2 + 1000x_3$$

条件 $10x_1 + 25x_2 + 30x_3 \ge 50$,
 $15x_1 + 5x_2 + 35x_3 \ge 60$,
 $2x_1 + 2x_2 + 20x_3 \ge 10$,
 $5x_1 + 80x_2 + 40x_3 \ge 40$,
 $x_1, x_2, x_3 \ge 0$. (1.1)

1 行目が目的関数, 2 行目以降が制約条件を表す. 最後の制約条件は, 野菜の購入量が負の値を取らないことを表す.

もう 1 つ別の例を考える. n 組のデータ $(x_1,y_1),(x_2,y_2),\dots,(x_n,y_n)$ が与えられるとき, x と y の関係を近似的に表す簡単な関数を求めたい. これは回帰問題 (regression problem) と呼ぶ. 例えば, x と y の関係を直線 y=ax+b で表すとき, その傾き a と切片 b の値をどのように決めれば良いだろうか?

図 1.2 に示すように,点 $(x_1,y_1),(x_2,y_2),\dots,(x_n,y_n)$ は同一直線上に並んでいるとは限らないので,各データ (x_i,y_i) に対する誤差 $z_i=|y_i-(ax_i+b)|$ をできるだけ小さくしたい.このとき,直線の傾き a と切片 b を変数とすると,平均 2 乗誤差 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n z_i^2$ を最小にする直線を求める問題は以下の最適化問題に定式化できる*3.

最小化
$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)^2$$
. (1.2)

このように、平均 2 乗誤差を最小化することで x と y の関係を近似的に表す関数を求める方法を最小 2 乗法 (least squares method) と呼ぶ.

次に、定式化された最適化問題を解く方法を考える。式 (1.2) は a,b を変数とする関数

 $^{*^3}$ 各データ (x_i, y_i) は定数であることに注意する.

なので f(a,b) と表す. 関数 f の値が最小となるためには,変数 a,b に関する偏微分係数

$$\frac{\partial f(a,b)}{\partial a} = -\frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \left(y_i - ax_i - b \right), \tag{1.3}$$

$$\frac{\partial f(a,b)}{\partial b} = -\frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)$$

$$\tag{1.4}$$

がともに0となる必要がある. そこで, 連立1次方程式

$$\begin{pmatrix}
\sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\
\sum_{i=1}^{n} x_i & n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
a \\
b
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
\sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
\sum_{i=1}^{n} y_i
\end{pmatrix}$$
(1.5)

を解けば変数 a,b の値は

$$a = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2},$$
(1.6)

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i - a \sum_{i=1}^{n} x_i}{n}$$
 (1.7)

と求められる*4.

最小 2 乗法の例では,2 変数の連立 1 次方程式を解けば,誤差の 2 乗和が最小となる変数 a,b の値を求められた.しかし,野菜ジュースの製造を始めとする多くの例では,最適化問題の解を直接に求める一般的な式を与えることは困難である.数理最適化では,数値の計算を繰り返して最適化問題の解を求める一般的な手続き,いわゆるアルゴリズムを与えることが主要な目的となる.

1.2 最適化問題

数理最適化で扱う最適化問題は以下のような一般的な形で表せる.

最小化
$$f(x)$$
 条件 $x \in S$. (1.8)

x は変数 (variable) もしくは決定変数 (decision variable),変数に割り当てられた値を解 (solution) と呼ぶ. 関数 f は目的関数 (objective function) と呼ぶ. 目的関数の値が最小となる解を求める問題を最小化問題 (minimization problem),最大となる解を求める問題を最大化問題 (maximization problem) と呼ぶ. 制約条件 (constraint) を満たす解は

 $^{^{*4}}$ f(a,b) が凸関数 (3.1.2 節) であることを示す必要があるが、ここでは省略する.

1.2 最適化問題 9

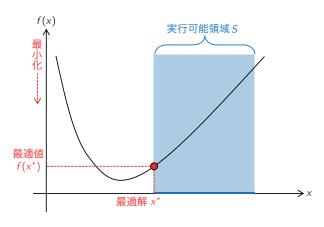


図 1.3 最適化問題の例

実行可能解 (feasible solution),その集合である S を実行可能領域 (feasible region) と呼ぶ.制約条件は不等式および等式で与えられる場合が多い.このように制約条件を持つ最適化問題を,制約つき最適化問題 (constrained optimization problem) と呼ぶ.また,制約条件を持たない最適化問題を,制約なし最適化問題 (unconstrained optimization problem) と呼ぶ.

最小化問題であれば、目的関数 f の値が最小となる実行可能解 $x^* \in S$,すなわち,任意の実行可能解 $x \in S$ に対して $f(x^*) \leq f(x)$ を満たす実行可能解 $x^* \in S$ を最適解 (optimal solution) と呼ぶ.また,最大化問題であれば,目的関数 f の値が最大となる 実行可能解 $x^* \in S$,すなわち,任意の実行可能解 $x \in S$ に対して $f(x^*) \geq f(x)$ を満たす実行可能解 $x^* \in S$ を最適解と呼ぶ.最適解 x^* における目的関数の値 $f(x^*)$ を最適値 (optimal value) と呼ぶ.図 1.3 に最適化問題の例を示す.特にことわりがなければ「最適化問題を解く」という表現は「最適解を 1 つ求める」ことを意味する.一般に,最適化問題では複数の最適解が存在する可能性があり,全ての最適解を求める問題は列挙問題 (enumeration problem) として扱われる.一方で,最適化問題では常に最適解が存在するとは限らない.最適化問題は,以下の 4 つの場合に分類できる.

- (1) 実行不能 (infeasible) 制約条件を満たす解が存在しない. つまり、実行可能領域が 空集合 $S=\emptyset$ である.
- (2) 非有界 (unbounded) 目的関数の値を限りなく改善できるため最適解が存在しない.
- (3) 有界であるが最適解が存在しない 目的関数の値は有限であるが最適解が存在しない.
- (4) 最適解が存在する 有限な最適値と最適解が存在する.

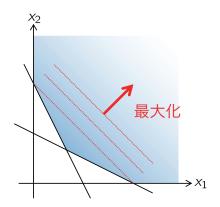


図 1.4 非有界な最適化問題の例

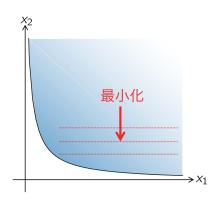


図 1.5 有界であるが最適解が存在しない最適化問題の例

例えば,以下の最適化問題を考える.

最大化
$$x_1 + x_2$$

条件 $2x_1 + x_2 \ge 1$, $x_1 + 2x_2 \ge 1$, $x_1, x_2 \ge 0$. (1.9)

この問題では、変数 x_1, x_2 の値を増加することで目的関数の値を限りなく増加できるので非有界である (図 1.4).

もう1つ別の最適化問題を考える.

最小化
$$x_2$$

条件 $x_1x_2 \ge 1$, $x_1, x_2 \ge 0$. (1.10)

この問題では、x の値を十分大きく取れば目的関数の値は 0 に近づく. しかし、目的関数の値が 0 となる実行可能解は存在しないため、有界であるが最適解は存在しない (図 1.5).

数理最適化の主要な目的は最適化問題の最適解を1つ求めることであるが、常に最適解が存在するとは限らないので、そのような場合には最適解が存在しないことを示す必要がある。また、最適解が存在しても、実際には最適解を求めることが困難な最適化問題

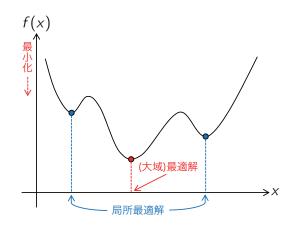


図 1.6 大域最適解と局所最適解の例

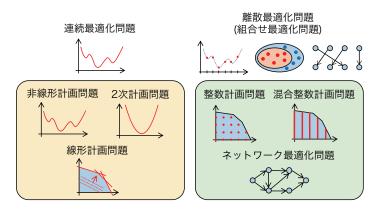


図 1.7 代表的な最適化問題

も少なくない.そのような最適化問題では,十分に小さい領域のなかで目的関数 f の値が最小となる実行可能解 $x^* \in S$,すなわち,近傍 (neighborhood) $N(x^*)$ 内の任意の実行可能解 $x \in S \cap N(x^*)$ に対して $f(x^*) \leq f(x)$ を満たす局所最適解 (locally optimal solution) を求めることを目的とする場合も多い.局所最適解と区別するため,本来の最適解を大域最適解 (globally optimal solution) と呼ぶことも多い.大域最適解は局所最適解であるが,局所最適解は必ずしも大域最適解にならない.図 1.6 に局所最適解と大域最適解の例を示す.

1.3 代表的な最適化問題

最適化問題はさまざまな観点に基づき分類できるが、変数、目的関数、制約条件の種類によっていくつかのクラスに分類する場合が多い。図 1.7 に代表的な最適化問題を示す.

これまでに説明した、変数が実数値のような連続的な値をとる最適化問題は、連続最適 化問題 (continuous optimization problem) と呼ぶ、ここで、実数値を取る変数を実数変数 (real variable) と呼ぶ、目的関数が線形関数で、全ての制約条件が線形の等式もしく は不等式で表された最適化問題は、線形計画問題 (linear programming problem; LP)*5と呼ぶ. 非線形関数で表された目的関数や制約条件を含む最適化問題を非線形計画問題 (nonlinear programming problem; NLP)と呼ぶ. 特に、目的関数が 2 次関数で、全ての制約条件が線形の等式もしくは不等式で与えられる非線形計画問題は、2 次計画問題 (quadratic programming problem; QP)と呼ぶ.

変数が整数値や $\{0,1\}$ の 2 値のような離散的な値をとる最適化問題や,最適解を含む解の集合が順列やネットワークなど組合せ的な構造を持つ最適化問題は,離散最適化問題 (discrete optimization problem) もしくは組合せ最適化問題 (combinatorial optimization problem) と呼ぶ.ここで,整数値のみを取る変数を整数変数 (integer variable), $\{0,1\}$ の 2 値のみを取る変数を 2 値変数 (binary variable) と呼ぶ.特に,全ての変数が整数値のみを取る線形計画問題は整数計画問題 (integer programming problem; IP),一部の変数が整数値のみを取る線形計画問題は混合整数計画問題 (mixed integer programming problem; MIP)*6と呼ぶ.また,全ての変数が 2 値のみを取る整数計画問題は 2 値整数計画問題 (binary integer programming problem; BIP) もしくは 0-1 整数計画問題(0-1 integer programming problem)と呼ぶ.また,ネットワークやグラフで表される最適化問題はネットワーク最適化問題 (network optimization problem) と呼ぶ.

1.4 本書の構成

2章では、線形計画問題を扱う、線形計画問題は最も基本的な最適化問題であり、大規模な問題例を効率的に解くアルゴリズムが開発されている。2章では、線形計画問題の定式化と、線形計画問題の代表的なアルゴリズムである単体法を説明した後に、数理最適化において最も重要な概念である双対問題と緩和問題を説明する。

3章では、非線形計画問題を扱う、非線形計画問題は適用範囲が非常に広い一方で、多様な非線形計画問題を効率的に解く汎用的なアルゴリズムを開発することは難しい、3章では、非線形計画問題の定式化と、効率的に解ける非線形計画問題の特徴を説明した後に、制約なし最適化問題と制約つき最適化問題の代表的なアルゴリズムを説明する.

4章では、整数計画問題と組合せ最適化問題を扱う。線形計画問題において変数が整数値のみを取る整数計画問題は、産業や学術の幅広い分野における現実問題を定式化できる汎用的な最適化問題の1つである。4章では、整数計画問題の定式化と、組合せ最適化問題の難しさを評価する計算の複雑さの理論の基本的な考え方を説明する。いくつかの特殊な整数計画問題の効率的なアルゴリズムと、整数計画問題の代表的なアルゴリズムである分枝限定法と切除平面法を説明した後に、任意の問題例に対して近似性能の保証

^{*&}lt;sup>5</sup> ここでは、programming は「計画を立てる」という意味である.

^{*6} 最近では, 混合整数非線形計画問題 (mixed integer nonlinear programming problem; MINLP) と 区別するために混合整数線形計画問題 (mixed integer linear programming problem; MILP) と呼ぶことも多い.

1.5 まとめ

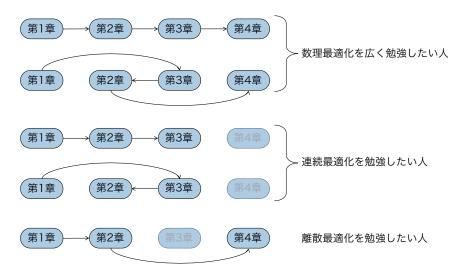


図 1.8 本書の学習順序の例

を持つ実行可能解を求める近似解法と、多くの問題例に対して質の高い実行可能解を求める局所探索法およびメタヒューリスティクスを説明する.

参考に図 1.8 に本書の学習順序の例を示す. 2 章「線形計画」と 3 章「非線形計画」の 内容はほとんど独立しているので、必ずしもこの順に読み進める必要はない. 特に、微積 分と線形代数を学んで間もない大学生などであれば、3 章「非線形計画」の方が数理最適 化の入門には良いかも知れない. 一方で、4 章「整数計画と組合せ最適化」は 2 章「線形 計画」の内容を前提としているので、先に 2 章を読むことを勧める.

1.5 まとめ

最適化問題 与えられた制約条件の下で目的関数の値を最小 (もしくは最大) にする解を求める問題.

実行可能解 制約条件を満たす解.

実行不能 制約条件を満たす解が存在しない.

非有界 目的関数の値を限りなく改善できるため最適解が存在しない.

大域最適解 実行可能領域の中で目的関数の値が最小(もしくは最大)となる解.

局所最適解 実行可能領域の中で目的関数の値がその近傍内で最小 (もしくは最大) となる解.

連続最適化問題 変数が実数値のような連続的な値をとる最適化問題.

線形計画問題 目的関数が線形関数で、全ての制約条件が線形の等式もしくは不等式で表 される最適化問題.

非線形計画問題 非線形関数で表される目的関数や制約条件を含む最適化問題.

2次計画問題 目的関数が 2次関数で、全ての制約条件が線形の等式もしくは不等式で表 される最適化問題. 離散最適化問題 (組合せ最適化問題) 変数が整数値や 2 値のような離散的な値をとる最適 化問題もしくは、最適解を含む解の集合が順列やネットワークなど組合せ的な構造を持 つ最適化問題.

整数計画問題 全ての変数が整数値のみを取る線形計画問題.

混合整数計画問題 一部の変数が整数値のみを取る線形計画問題.

ネットワーク最適化問題 ネットワークやグラフで表される最適化問題.

1.6 文献ノート

本書では、各章の最後に関連する文献を紹介する節を設けている。その章で説明した 内容について、より詳しい説明や発展的な話題を知りたい読者は、本節で紹介する文献を 参照していただきたい。ここでは、数理最適化の全般に関する文献をいくつか紹介する.

まず、数理最適化を初めて学ぶ人が手に取る入門書として、例えば、以下の5冊が挙げられる.

- 福島雅夫, 数理計画入門 (新版), 朝倉書店, 2011.
- 久野誉人, 繁野麻衣子, 後藤順哉, 数理最適化, オーム社, 2012.
- 加藤直樹, 数理計画法, コロナ社, 2008.
- 山下信雄, 福嶋雅夫, 数理計画法, コロナ社, 2008.
- 山本芳嗣 (編著), 基礎数学 ─ IV. 最適化理論, 東京化学同人, 2019.

数理最適化問題の定式化に関する書籍は少ないが, 例えば, 以下の1冊が挙げられる.

● H. P. Williams, *Model Building in Mathematical Programming* (5th edition), John Wiley & Sons, Ltd., 2013. (前田英次郎 (監訳), 小林英三 (訳), 数理計画モデルの作成法 (3 版), 産業図書, 1995.)

また、最適化の理論の入門書として、例えば、以下の書籍が挙げられる.

● 茨木俊秀, 最適化の数学, 共立出版, 2011.

数理最適化に関する専門的なトピックを幅広く集めたハンドブックは, 例えば, 以下の 2 冊が挙げられる.

- 久保幹雄, 田村明久, 松井知己 (編), 応用数理ハンドブック, 朝倉書店, 2002.
- G. L. Nemhauser, A. H. G. Rinnooy Kan and M. J. Todd (eds.), *Optimization*, Elsevier, 1989. (伊理正夫, 今野浩, 刀根薫 (監訳), 最適化ハンドブック, 朝倉書店, 1995.)

第2章

線形計画

私の講演の後、座長が質疑応答をうながした.一瞬の静寂の後に手が挙がった.ホテリングだった.鯨のような大男は立ち上がると「だが、われわれはみな世界が非線形であると知っている」とだけ言って堂々と座った.私が必死に適切な回答を紡ぎ出そうとしていたら、聴衆の中から別の手が挙がった.フォン・ノイマンだった.「座長、座長、もし講演者が構わなければ、私が代わりに回答させていただきます.講演者はこの講演を線形計画法と名付け、慎重にその前提を示しました.もし、その前提を満たす応用があれば、それを使えば良いですし、そうでなければ、使わなければ良いでしょう」

G. B. Dantzig and M. N. Thapa, *Linear Programming 1: Introduction*, Springer, 1997.

線形計画問題は目的関数が線形関数で、全ての制約条件が線形の等式もしくは不等式で表された最適化問題であり、大規模な問題例を現実的な計算手間で解く効率的なアルゴリズムが開発されている。本章では、まず、線形計画問題の定式化と、線形計画問題の代表的なアルゴリズムである単体法を説明した後に、数理最適化において最も重要な概念である緩和問題と双対問題を説明する。

2.1 線形計画問題の定式化

線形計画問題は,目的関数が線形関数で,全ての制約条件が線形の等式もしくは不等式で与えられる最も基本的な最適化問題である.1.1 節で紹介した野菜ジュースの製造の例を一般化しよう.ある飲料メーカーでは,n 種類の野菜を原料とする野菜ジュースを製造している.このとき,野菜ジュースに含まれる m 種類の栄養素の必要量を満たしつつ製造に要する原料費を最小にするには,どの野菜をどれだけ購入すれば良いのだろうか?これは栄養問題 (diet problem) と呼ぶ.この問題を線形計画問題に定式化しよう.野菜j の単位量当たりに含まれる栄養素i の量を a_{ij} ,野菜j の単位量当たりの価格を c_j ,栄養素i の必要量を b_i とする.このとき,野菜j の購入量を変数 x_j で表すと,野菜の購入

量を決定する問題は以下の線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n$$

条件 $a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \ge b_1,$
 $a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \ge b_2,$
 \dots
 $a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n \ge b_m,$
 $x_1, x_2, \dots, x_n \ge 0.$ (2.1)

目的関数は原料費の合計を、制約条件の1行目から m 行目は栄養素 i の必要量を満た す条件を表す. 制約条件の最後の行は野菜jの購入量が負の値を取らないことを表し, 非負制約と呼ぶ.

線形計画問題は以下のように変数と制約条件をまとめて表す場合が多い.

最小化
$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$

条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \ge b_i, \quad i=1,\ldots,m,$ $x_j \ge 0, \qquad j=1,\ldots,n.$
を用いて $\min\{\boldsymbol{c}^{\top}\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \ge \boldsymbol{b}, \boldsymbol{x} \ge \boldsymbol{0}\}$ もしくは,

また、行列とベクトルを用いて $\min\{c^{\top}x \mid Ax \geq b, x \geq 0\}$ もしくは、

最小化
$$c^{\top}x$$

条件 $Ax \ge b$, (2.3)
 $x \ge 0$.

と表す場合も多い*1. ここで,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m,$$

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$
(2.4)

である*².

線形計画問題では線形関数のみを用いて目的関数と制約条件を表す必要があるため, 現 実問題を線形計画問題に定式化することは容易ではない、しかし、正確さを失うことな く現実問題を非線形計画問題に定式化できても最適解を求めることが困難な場合が多い. また、一見すると非線形に見える最適化問題でも変数の追加や式の変形により等価な線 形計画問題に書き換えられる場合も少なくない (2.1.3 節, 2.1.4 節). 現実問題を線形計 画問題に定式化する際には、与えられた現実問題を線形計画問題で正確に表せるか、また は満足できる程度に近似できるかを良く見極める必要がある。本節では、まず、線形計画

 $^{^{*1}}$ $\boldsymbol{c}^{ op}$ はベクトル \boldsymbol{c} の転置を表す.

^{*2} ℝ は実数全体の集合を表す.

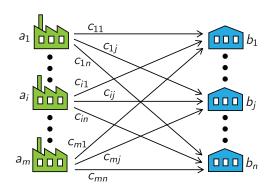


図 2.1 輸送計画問題の例

問題の例として,輸送計画問題,日程計画問題,事業効率の評価を紹介した後に,一見すると非線形に見える最適化問題を線形計画問題に定式化するいくつかの方法を紹介する.

2.1.1 線形計画問題の応用例

輸送計画問題 (transportation problem): ある企業ではある製品をmヶ所の工場からnヶ所の顧客に納入している*3. 各工場の生産量を超えない範囲で各顧客の需要を満たすように製品を輸送したい. このとき、輸送費の合計を最小化するためには、どの工場からどの顧客にどれだけの量の製品を輸送すれば良いのだろうか?

工場iの生産量の上限を a_i 、顧客jの需要量を b_j 、工場iから顧客jへの単位量当たりの輸送費を c_{ij} とする (図 2.1)。このとき、工場iから顧客jへの輸送量を変数 x_{ij} で表すと、輸送費の合計を最小にする工場と顧客との輸送量を求める問題は以下の線形計画問題に定式化できる。

最小化
$$\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} c_{ij} x_{ij}$$
条件
$$\sum_{j=1}^{n} x_{ij} \le a_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$\sum_{i=1}^{m} x_{ij} = b_{j}, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$x_{ij} \ge 0, \qquad i = 1, \dots, m, \ j = 1, \dots, n.$$

$$(2.5)$$

1 番目の制約条件は,工場 i から出荷される製品の量が生産量を超えないことを表す.2 番目の制約条件は,顧客 j に納入される製品の量が需要量と一致することを表す.

日程計画問題: ある企業ではn 個の作業からなるプロジェクトに取り組んでいる。図 2.2 のように、各作業の処理順序を表すネットワークが与えられ、各作業は先行する作業が全て完了しない限り開始できない。また、各作業は費用を余分にかければある程度まで処理日数を短縮できる。このとき、プロジェクト全体をT日以内に完了させた上で、費用

 $^{*^3}$ ここでは、簡単のため製品を1種類とする.

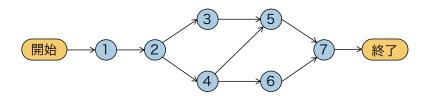


図 2.2 プロジェクトの処理順序を表すネットワーク

の合計を最小化するためには、各作業の開始日と処理日数をどのように定めれば良いのだろうか?このように、プロジェクトの各作業の処理順序を表すネットワークを用いて日程計画を立案・管理する手法を PERT (Program Evaluation and Review Technique)と呼ぶ。

作業iの標準の処理日数を u_i , その費用を c_i とする。作業iの実際の処理日数を変数 p_i で表す。作業iの処理日数を標準から1日短縮するたびに生じる追加費用を g_i とすると,作業iの費用は $c_i+g_i(u_i-p_i)$ となる。ただし,作業iの処理日数は l_i よりも短くはできないものとする。また,プロジェクトの始めに作業1が,最後に作業nが処理される。このとき,作業iの開始日を変数 s_i で表すと,費用の合計を最小にする作業の開始日と処理日数を求める問題は以下の線形計画問題に定式化できる*4.

最小化
$$\sum_{i=1}^{n} \{c_i + g_i(u_i - p_i)\}$$
 条件
$$s_i + p_i \le s_j, \quad i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, n, i \prec j,$$

$$l_i \le p_i \le u_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$s_1 \ge 0,$$

$$s_n \le T.$$

$$(2.6)$$

ここで、 $i \prec j$ は作業 i が作業 j に先行することを表す.1 番目の制約条件は,先行する作業 i の完了日が作業 j の開始日より早いことを表す.2 番目の制約条件は,作業 i の処理日数が l_i 以上 u_i 以下となることを表す.

事業効率の評価: ある企業ではn個の事業の経営効率を相対的に評価する方法を模索している。例えば、支出と収入の比である収支率は経営効率を測る指標であり、支出を収入を生み出すための入力、収入を支出より生み出された出力と考えれば「収入/支出」(収支率の逆数)の値が大きいほど経営効率が良いと評価できる。このように「同じ入力で多くの出力が得られる」もしくは「少ない入力で同じ出力が得られる」ならば、その事業は効率的であると考える。さらに、各事業は複数の入力と出力を持つため、各入力と各出力に適当な重みを付けて足し合わせたものを仮想的な入力と仮想的な出力と考える。このとき、全ての事業を公平に評価するためには、各入力と各出力の重みをどのように定めれば良いのだろうか?このように、複数の事業の相対的な効率を評価する手法を包絡分析法(data envelopment analysis; DEA)と呼ぶ。包絡分析法は、1978年にチャーンズ (Charnes)、クーパー (Cooper)、ローズ (Rhodes) により提案された。

^{*4} ここでは、簡単のため変数は実数値を取るものとする.

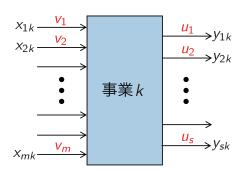


図 2.3 複数の入力と出力を持つ事業

包絡分析法では,全ての事業に対して同じ重み付けを行うのではなく,それぞれの事業kの効率が最大となる重み付けを行った上で,得られた「仮想的な入力/仮想的な出力」の値を比較する.図 2.3 に示すように.事業kはm個の入力 x_{1k},\ldots,x_{mk} とs 個の出力 y_{1k},\ldots,y_{sk} を持つとする.このとき,事業kの入力 x_{ik} に対する重みを変数 x_i ,出力 x_{ik} に対する重みを変数 x_i に対する重みを変数 x_i に対する重みを変数 x_i に対する重みを変数 x_i がある問題は以下の最適化問題に定式化できる.

最大化
$$\sum_{r=1}^{s} u_r y_{rk} / \sum_{i=1}^{m} v_i x_{ik}$$
条件
$$\sum_{r=1}^{s} u_r y_{rj} / \sum_{i=1}^{m} v_i x_{ij} \le 1, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$v_i > 0, \qquad i = 1, \dots, m,$$

$$u_r > 0, \qquad r = 1, \dots, s.$$
(2.7)

この問題は各事業 $k=1,\ldots,n$ に対して定義されるので,n 個の事業の効率を比較するためには n 個の線形計画問題を解く必要がある.目的関数は事業 k の効率を表す.1 番目の制約条件は,事業 k の入力 x_{ik} に対する重み v_{ik} と出力 y_{rk} に対する重み u_r をどの事業に適用しても目的関数の値が 1 以下となることを表す.目的関数の値が 1 ならば事業 k は効率的,目的関数の値が 1 よりも小さければ事業 k は非効率的であると呼ぶ.ここで, $\mu=1/\sum_{i=1}^m v_i x_{ik}$ として,新たな変数 $v_i'=\mu v_i$ と $u_r'=\mu u_r$ を導入すると,以下の線形計画問題に書き換えられる.

最大化
$$\sum_{r=1}^{s} u'_r y_{rk}$$

条件 $\sum_{i=1}^{s} v'_i x_{ik} = 1$, $\sum_{r=1}^{s} u'_r y_{rj} \leq \sum_{i=1}^{m} v'_i x_{ij}, \quad j = 1, \dots, n$, $u'_r \geq \varepsilon$, $r = 1, \dots, s$, $v'_i \geq \varepsilon$, $i = 1, \dots, m$.

ここで、 ε は十分に小さい正の定数である.

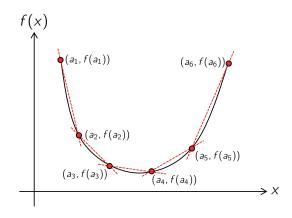


図 2.4 凸関数の区分線形関数による近似

2.1.2 凸な非線形関数の近似

20

凸計画問題 (3.1.2 節) は線形計画問題に近似できる*5. ここでは、図 2.4 に示すように、1 変数の凸関数 f(x) を区分線形関数 g(x) で近似的に表すことを考える.

凸関数 f(x) 上の m 個の点 $(a_1, f(a_1)), \ldots, (a_m, f(a_m))$ を適当に選んで線分でつなぐと区分線形関数 g(x) が得られる。この区分線形関数 g(x) は凸関数なので、各線分を表す線形関数を用いて、

$$g(x) = \max_{i=1,\dots,m-1} \left\{ \frac{f(a_{i+1}) - f(a_i)}{a_{i+1} - a_i} (x - a_i) + f(a_i) \right\}, \quad a_1 \le x \le a_m,$$
 (2.9)

と表せる.このとき,各線分に対応する線形関数の最大値を変数 z で表すと, $a_1 \le x \le a_m$ の範囲において区分線形関数 g の値を最小にする変数 x の値を求める問題は以下の線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$z$$

条件
$$\frac{f(a_{i+1}) - f(a_i)}{a_{i+1} - a_i}(x - a_i) + f(a_i) \le z, \quad i = 1, \dots, m - 1,$$
 (2.10)

2.1.3 連立1次方程式の近似解

全ての制約条件を同時には満たせない連立 1 次方程式に対して, できる限り多くの制 約条件を満たす近似解を求める問題を考える. 連立 1 次方程式

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i, \quad i = 1, \dots, m,$$
(2.11)

に対して,その誤差 $z_i = |\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j - b_i|$ をできる限り小さくする近似解 $x = (x_1, \ldots, x_n)$ を求める問題を考える.このとき,平均 2 乗誤差 $\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m z_i^2$,平均誤差 $\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m z_i$,最悪誤差 $\max_{i=1,\ldots,m} z_i$ などが評価基準として考えられる.

^{*5} 非凸な非線形計画問題は整数計画問題に近似できる (4.1.5 節を参照).

平均誤差を最小にする近似解xを求める問題は以下の制約なし最適化問題に定式化できる.

最小化
$$\sum_{i=1}^{m} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j - b_i \right|.$$
 (2.12)

これは一見しただけでは線形計画問題に見えないが、各制約条件に対する誤差を表す変数 z_i を導入すると以下の線形計画問題に書き換えられる *6 .

最小化
$$\sum_{i=1}^{m} z_{i}$$
条件
$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} - b_{i} \ge -z_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} - b_{i} \le z_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$z_{i} \ge 0, \qquad i = 1, \dots, m.$$
(2.13)

この方法で 1.1 節の回帰分析も実現できる。m 個のデータ $(x_1,y_1),\ldots,(x_m,y_m)$ が与えられる。これを n 次の多項式関数

$$y(x) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \dots + w_n x^n$$
 (2.14)

で近似的に表すことを考える。各データ (x_i,y_i) に対する平均誤差を最小にするパラメータ w_0,\ldots,w_n の値を求める問題は以下の制約なし最適化問題に定式化できる *7 .

最小化
$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \left| y_i - (w_0 + w_1 x_i + \dots + w_n x_i^n) \right|.$$
 (2.15)

データ (x_i, y_i) に対する誤差を表す変数 z_i を導入すると以下の線形計画問題に書き換えられる.

最小化
$$\sum_{i=1}^{m} z_{i}$$
 条件
$$y_{i} - (w_{0} + w_{1}x_{i} + \dots + w_{n}x_{i}^{n}) \geq -z_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$y_{i} - (w_{0} + w_{1}x_{i} + \dots + w_{n}x_{i}^{n}) \leq z_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$z_{i} \geq 0, \qquad \qquad i = 1, \dots, m.$$

$$(2.16)$$

最悪誤差を最小にする近似解xを求める問題も以下の制約なし最適化問題に定式化できる.

最小化
$$\max_{i=1,...,m} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j - b_i \right|.$$
 (2.17)

^{*6} 絶対値関数は線形関数ではない.

 $^{*^7}$ 各データ (x_i, y_i) は定数であることに注意する.

これも一見すると線形計画問題に見えないが、誤差の最大値を表す変数 z を導入すると以下の線形計画問題に書き換えられる.

最小化
$$z$$

条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} - b_{i} \ge -z, \quad i = 1, \dots, m,$
 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} - b_{i} \le z, \quad i = 1, \dots, m,$
 $z > 0.$ (2.18)

この方法で与えられた条件の下で限られた予算を n 個の事業にできるだけ公平に配分する問題も線形計画問題に定式化できる.予算の総額を B とする.このとき,事業 j への配分額を変数 x_j で表すと,理想的な配分額 B/n からの平均 2 乗誤差を最小にする予算の配分を求める問題は以下の最適化問題に定式化できる.

最小化
$$\sum_{j=1}^{n} \left(x_{j} - \frac{B}{n} \right)^{2}$$
 条件
$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$\sum_{j=1}^{n} x_{j} = B,$$

$$x_{j} \geq 0, \qquad j = 1, \dots, n.$$
 (2.19)

ここで、制約条件の 1 行目は与えられた条件を、2 行目は配分額の合計が予算の総額 B に等しいことを表す。この問題は 2 次計画問題であり、線形計画問題に比べると現実的な計算手間で解ける問題の規模はかなり小さくなる。また、得られた最適解において配分額が極端に小さくなる事業が全くないとは限らない。そこで、配分額の最小値を最大化することで公平な配分を実現する。新たに配分額の最小値を表す変数 z を導入すると以下の線形計画問題に定式化できる。

最大化
$$z$$

条件
$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} = b_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$\sum_{j=1}^{n} x_{j} = B,$$

$$x_{j} \geq z, \qquad j = 1, \dots, n,$$

$$z > 0.$$

$$(2.20)$$

また、この方法でk個の目的関数

$$\sum_{j=1}^{n} c_{1j} x_j, \sum_{j=1}^{n} c_{2j} x_j, \dots, \sum_{j=1}^{n} c_{kj} x_j$$
(2.21)

を同時に最小化する以下の多目的最適化問題 (multi-objective optimization problem)

も線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$\sum_{j=1}^{n} c_{1j}x_{j}, \dots, \sum_{j=1}^{n} c_{kj}x_{j}$$
条件
$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} \geq b_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$x_{j} \geq 0, \qquad j = 1, \dots, n.$$

$$(2.22)$$

例えば, これらの目的関数の合計

$$\sum_{j=1}^{n} c_{1j} x_j + \dots + \sum_{j=1}^{n} c_{kj} x_j$$
 (2.23)

を最小化する定式化が考えられる。しかし、最適解においていくつかの目的関数が極端に大きな値となる場合が少なくないため、全ての目的関数をバランス良く最小化することは容易ではない。そこで、新たに目的関数の最大値を表す変数 z を導入し、その値を最小化すると以下の線形計画問題に定式化できる。

最小化
$$z$$

条件 $\sum_{j=1}^{n} c_{hj}x_{j} \leq z$, $h = 1, ..., k$,
 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} \geq b_{i}$, $i = 1, ..., m$,
 $x_{j} \geq 0$, $j = 1, ..., n$.

2.1.4 比率の最小化

2つの関数の比を目的関数に持つ最適化問題は分数計画問題 (fractional programming problem) と呼ぶ. 以下の2つの線形関数の比を目的関数に持つ分数計画問題を考える.

銀下の2つの緑形関数の比を目的関数に持つ分数計画問題を考える。
最小化
$$\sum_{j=1}^n c_j x_j \bigg/ \sum_{j=1}^n d_j x_j$$

条件 $\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = b_i$, $i=1,\ldots,m$, $x_j \geq 0$, $j=1,\ldots,n$.

ただし、 $\sum_{j=1}^n d_j x_j > 0$ とする.ここで、新たな変数 $t = 1/\sum_{j=1}^n d_j x_j$ と $y_j = t x_j$ $(j=1,\ldots,n)$ を導入すると以下の線形計画問題に書き換えられる.

最小化
$$\sum_{j=1}^{n} c_{j}y_{j}$$
条件
$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}y_{j} - b_{i}t = 0, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$\sum_{j=1}^{n} d_{j}y_{j} = 1,$$

$$t \geq \varepsilon,$$

$$y_{j} \geq 0, \qquad j = 1, \dots, n.$$

$$(2.26)$$

ここで、 ε は十分に小さい正の定数である.

2.2 単体法

線形計画問題では効率的なアルゴリズムが開発されており、1947年にダンツィク (Dantzig) が単体法 (simplex method)**8を提案している。単体法は実用的には優れた性能を持つが、理論的には多項式時間アルゴリズム*9ではない。その後、1979年にカチヤン (Khachiyan) が初めての多項式時間アルゴリズムとなる楕円体法 (ellipsoid method)を、1984年にカーマーカー (Karmarkar) が実用的にも優れた性能を持つ内点法 (interior point method)を提案している。性能では内点法が優れているが、単体法は変数や制約条件を追加して問題を解き直す再最適化を効率的に実行できるため、現在では、単体法と内点法がともに実用的なアルゴリズムとして広く使われている。本節では、単体法の考え方と手続きをいくつかの例とともに説明する。

2.2.1 標準形

説明を簡単にするために、以降では標準形 (standard form) と呼ぶ以下の線形計画問題を考える *10 .

最大化
$$\sum_{j=1}^{n} c_{j}x_{j}$$

条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} \leq b_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$
 $x_{j} \geq 0, \qquad j = 1, \dots, n.$ (2.27)

標準形は以下の特徴を持つ線形計画問題である.

- (1) 目的関数の値を最大化する.
- (2) 全ての変数に非負制約が付く.
- (3) 非負制約を除く全ての制約条件で左辺の値が右辺の値以下となる*11.

どんな形の線形計画問題でも以下の手続きを適用すれば標準形に変形できる.

^{*8 1965} 年にネルダー (Nelder) とミード (Mead) が非線形計画問題に対して単体法と呼ばれるアルゴリズムを提案しているが、名前が同じというだけで全く異なるアルゴリズムである.

^{*9} 計算に要する手間が変数や制約条件の数など入力データの大きさを表すパラメータの多項式関数で表されるアルゴリズムを指す.

^{*10} 基準形 (canonical form) とも呼ぶ.

 $^{^{*11}}$ 「非負制約を除く全ての制約条件で左辺と右辺の値が等しい」と定義する場合も少なくない.

2.2 単体法 25

ullet 目的関数 $\sum_{j=1}^n c_j x_j$ の最小化ならば目的関数を -1 倍する *12 .

最大化
$$\sum_{j=1}^{n} (-c_j)x_j$$
 (2.28)

• 非負制約のない変数 x_j は、非負制約の付いた 2 つの変数 x_i^+, x_j^- を新たに導入し、

$$x_j = x_j^+ - x_j^- (2.29)$$

と置き換える。

• 等式制約 $\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = b_i$ を 2 つの不等式制約に置き換える.

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i, \quad \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \ge b_i$$
 (2.30)

ullet 不等号の向きが逆の制約条件 $\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \geq b_i$ ならば両辺を -1 倍する.

$$\sum_{i=1}^{n} (-a_{ij})x_j \le -b_i \tag{2.31}$$

得られた標準形の問題と元の問題では変数や制約条件の数が同じとは限らないが,実行可能解や最適解には1対1の対応があるため等価な問題と考えて差し支えない.

2.2.2 単体法の概略

まず、単体法を説明する前に線形計画問題の性質を説明する。例として以下の線形計画問題を考える。

最大化
$$x_1 + 2x_2$$

条件 $x_1 \ge 0$, $\rightarrow ①$
 $x_2 \ge 0$, $\rightarrow ②$
 $x_1 + x_2 \le 6$, $\rightarrow ③$
 $x_1 + 3x_2 \le 12$, $\rightarrow ④$
 $2x_1 + x_2 \le 10$. $\rightarrow ⑤$

図 2.5 にこの問題の実行可能領域を示す.この図では,実行可能領域は 5 本の直線に囲まれた凸多角形となる.また,目的関数の等高線は直線となるため,実行可能領域の凸多角形の頂点上に最適解が存在することが分かる.この性質から,実行可能領域の凸多角形の全ての頂点を列挙すれば最適解が得られることが分かる.

図 2.5 の直線 ③ は制約条件 $x_1 + x_2 \le 6$ を等号で満たす解の集合を表す. 2 次元空間内の凸多角形の頂点では少なくとも 2 本の直線が交差しているので、例えば、直線

 $^{^{*12}}$ 目的関数の値の正負が反転することに注意する.

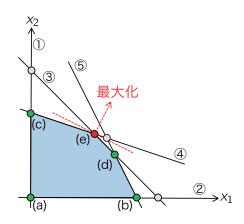


図 2.5 線形計画問題の例

③ と直線 ④ が交差する頂点 (e) に対応する解を求めようとすれば、連立 1 次方程式 $x_1+x_2=6$, $x_1+3x_2=12$ を解けば良いことが分かる。5 本の制約条件から 2 本を選ぶ 組合せは 10 通りあるので、それぞれについて連立 1 次方程式を解けば線形計画問題の解が得られる。ただし、これらの解候補は実行可能解であるとは限らないので、他の制約条件を満たすかどうか確認する必要がある。図 2.5 の例では、10 個の解の中の 5 個が実行可能解であることが分かる。

一般の線形計画問題の解も同じ手続きで列挙できる. 非負制約以外の制約条件がm本,変数がn個の標準形の線形計画問題では,実行可能領域はn次元空間内の凸多面体となる. また,最適解が存在するならば,少なくとも1つの最適解は実行可能領域の凸多面体の頂点上にある *13 . n次元空間内の凸多面体の頂点では少なくともn 枚の超平面が交差しているので,非負制約を含むm+n本の制約条件からn本を選び,制約条件の不等号を等号に置き換えて得られる連立1次方程式を解けば線形計画問題の解が得られる. ただし,m+n本の制約条件からn本を選ぶ組み合わせの数は,

$$\binom{m+n}{n} = \frac{(m+n)!}{m!n!} \tag{2.33}$$

であり、制約条件や変数の数の増加にしたがって急激に大きくなるため、全ての解を調べる方法は実用的ではない. そこで、ごく一部の解だけを探索して最適解を求める効率的なアルゴリズムが必要となる.

単体法は,実行可能領域の凸多面体のある頂点から出発し,目的関数の値が改善する隣接頂点への移動を繰り返すことで最適解を求めるアルゴリズムである (図 2.6). 凸多面体の各頂点では n 本の超平面が交差しているので,単体法は n 本の制約条件からなる連立 1 次方程式を解いて頂点に対応する実行可能解を求める.このとき,隣接する頂点

^{*13} ただし,実行可能領域が非有界ならば $\max\{x_1+x_2\mid x_1+x_2\leq 1\}$ のように凸多面体が頂点を持たな い場合もあるので注意する.

2.2 単体法 27

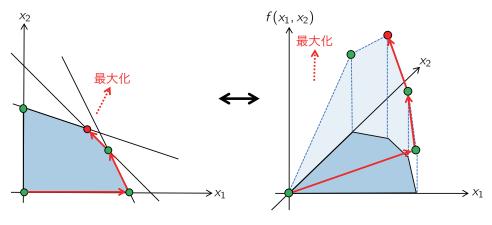


図 2.6 単体法の概略

ではちょうど 1 本の制約条件のみが入れ替わることを利用して、単体法はこれらの連立 1 次方程式を効率的に解く.

2.2.3 単体法の例

問題 (2.32) を用いて単体法の手続きを説明する. まず、非負変数 x_3, x_4, x_5 を導入して制約条件を等式に変形する.

最大化
$$x_1 + 2x_2$$

条件 $x_1 \ge 0$, $\rightarrow 0$
 $x_2 \ge 0$, $\rightarrow 2$
 $x_1 + x_2 + x_3 = 6$, $\rightarrow 3$
 $x_1 + 3x_2 + x_4 = 12$, $\rightarrow 4$
 $2x_1 + x_2 + x_5 = 10$, $\rightarrow 5$
 $x_3, x_4, x_5 \ge 0$. (2.34)

変数 x_1, \ldots, x_5 が制約条件 ①、、、⑤ に、それぞれ対応することに注意する.新たに導入した変数 x_3, x_4, x_5 はそれぞれ制約条件 ③、④、⑤ に対する余裕を表し、スラック変数 (slack variable) と呼ぶ.前節で示したように、2 次元空間内の凸多角形の頂点では少なくとも 2 本の直線が交差しているので、例えば、直線 ③、④ が交わる頂点に対応する解を求めようとすれば、対応するスラック変数の値を $x_3=0, x_4=0$ と固定し、制約条件を満たす変数 x_1, x_2, x_5 の値を求めれば良いことが分かる.

非負制約以外の制約条件がm本,変数がn個の標準形の線形計画問題において,非負制約を含むm+n本の制約条件からn本を選んで不等号を等号に置き換える手続きは,スラック変数を導入して制約条件を等式に変形した線形計画問題では,スラック変数を含むm+n 個の変数からn 個の変数を選んで値を0 に固定する手続きに対応する.n次元空間内においてn枚の超平面が交差する点は基底解 (basic solution) と呼ぶ.特に,実行可能領域の凸多面体の頂点は実行可能基底解 (basic feasible solution) と呼ぶ.また,基底解を定める際に値を0 に固定した変数は非基底変数 (nonbasic variable),それ以外の変数は基底変数 (basic variable) と呼ぶ.

さらに, 目的関数の値を表す変数 z を新たに導入して

$$z = x_1 + 2x_2 \tag{2.35}$$

と定義する. これらを用いて, 問題 (2.32) と等価な線形計画問題を定義する.

最大化
$$z = x_1 + 2x_2$$

条件 $x_3 = 6 - x_1 - x_2$,
 $x_4 = 12 - x_1 - 3x_2$,
 $x_5 = 10 - 2x_1 - x_2$,
 $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \ge 0$. (2.36)

この問題から単体法の手続きに必要な部分を取り出したものを辞書 (dictionary)* 14 と呼ぶ.

$$z = x_1 + 2x_2,$$

$$x_3 = 6 - x_1 - x_2,$$

$$x_4 = 12 - x_1 - 3x_2,$$

$$x_5 = 10 - 2x_1 - x_2.$$
(2.37)

辞書では基底変数が左辺に非基底変数が右辺に現れる.この例では, $x_1=x_2=0$ と固定すれば,直ちに $x_3=6, x_4=12, x_5=10$,目的関数値 z=0 が得られる.図 2.5 において,この実行可能基底解は直線 ①、② が交わる左下端の頂点 (a) に対応する.

次に,頂点 (a) から目的関数 z の値が改善する隣接頂点へ移動する手続きを考える.図 2.5 では頂点 (b), (c) が頂点 (a) の隣接頂点となる.頂点 (b) は直線 2, ⑤ が交差する頂点,頂点 (c) は直線 1, ④ が交差する頂点であり,凸多角形の頂点を定める直線に対応する制約条件を 1 本入れ替えれば隣接頂点が得られる.これは,辞書の上では基底変数と非基底変数を 1 つ入れ替える手続きに対応し,ピボット操作 (pivot operation) と呼ぶ.例えば,非基底変数の集合 $\{x_1,x_2\}$ を $\{x_2,x_5\}$ に入れ替えれば頂点 (b) に, $\{x_1,x_4\}$ に入れ替えれば頂点 (c) に移動できる.ここで,入れ替える基底変数と非基底変数の組合せは何でも良いわけではなく,制約条件を満たしつつ目的関数 z の値を改善する変数の組み合わせを見つける必要がある.

目的関数 z における変数 x_1,x_2 の係数はいずれも正なので、いずれかの変数の値を増加すれば目的関数 z の値を改善できる。例えば、 $x_1=0$ を保ちつつ x_2 の値を増加すると、基底変数と目的関数の値は

$$z = 2x_2,$$

 $x_3 = 6 - x_2,$
 $x_4 = 12 - 3x_2,$
 $x_5 = 10 - x_2$

$$(2.38)$$

となる.ここで,変数 x_3, x_4, x_5 は非負制約を満たす必要があるので,変数 x_2 の値は 4 までしか増加できないことが分かる. $x_2=4$ にすると同時に $x_4=0$ となり基底変数 x_4 と非基底変数 x_2 が入れ替わる.このとき, $x_3=2$, $x_5=6$,z=8 となり,図 2.7 に示すように頂点 (a) から隣接する頂点 (c) への移動が実現できる.

 $^{^{*14}}$ 実際には各変数の係数および右辺の定数を書き出した単体表 (simplex tableau) が良く用いられる.

2.2 単体法 29

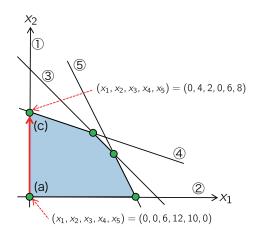


図 2.7 単体法の手続き

非基底変数が $\{x_1,x_4\}$,基底変数が $\{x_2,x_3,x_5\}$ と入れ替わったので、基底変数が左辺に非基底変数が右辺に現れるように辞書を更新する必要が生じる。新たに基底変数になった x_2 を x_1,x_4 により表す式は辞書の3行目から容易に得られる。

$$x_2 = 4 - \frac{1}{3}x_1 - \frac{1}{3}x_4. (2.39)$$

この式を辞書の右辺に現れる x_2 に代入すれば辞書を更新できる.

$$z = 8 + \frac{1}{3}x_1 - \frac{2}{3}x_4,$$

$$x_3 = 2 - \frac{2}{3}x_1 + \frac{1}{3}x_4,$$

$$x_2 = 4 - \frac{1}{3}x_1 - \frac{1}{3}x_4,$$

$$x_5 = 6 - \frac{5}{3}x_1 + \frac{1}{3}x_4.$$
(2.40)

辞書は非基底変数の値を 0 に固定して得られる連立 1 次方程式の解を表し、辞書を更新する手続きは制約条件を 1 本入れ替えて連立 1 次方程式を解き直す手続きに対応する. 上記の例では代入法を用いたが、掃き出し法*¹⁵を用いて辞書を更新しても構わない.

更新した辞書では目的関数 z の変数 x_4 の係数は負なので,その値を増加しても目的関数 z の値は改善できない.一方で,変数 x_1 の係数は正なので,その値を増加すれば目的関数 z の値を改善できる.そこで, $x_4=0$ に保ちつつ x_1 の値を増加すると,基底変数と目的関数の値は

$$z = 8 + \frac{1}{3}x_{1},$$

$$x_{3} = 2 - \frac{2}{3}x_{1},$$

$$x_{2} = 4 - \frac{1}{3}x_{1},$$

$$x_{5} = 6 - \frac{5}{3}x_{1}$$
(2.41)

となる. 変数 x_2,x_3,x_5 の非負制約を満たす必要があるので、変数 x_1 の値は 3 までしか増加できないことが分かる. $x_1=3$ にすると同時に $x_3=0$ となり基底変数 x_3 と非基底

^{*15} ガウス (Gauss) の消去法とも呼ぶ.

30 第 2 章 線形計画

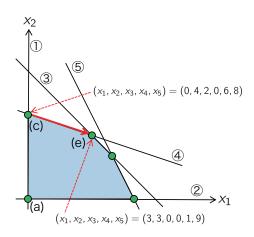


図 2.8 単体法の手続き

変数 x_1 が入れ替わる.このとき, $x_2=3$, $x_5=1$,z=9 となり,図 2.8 に示すように頂点 (c) から隣接する頂点 (e) への移動が実現できる.

新たに基底変数になった x_1 を x_3, x_4 により表す式は辞書の 2 行目から容易に得られる.

$$x_1 = 3 - \frac{3}{2}x_3 + \frac{1}{2}x_4. (2.42)$$

この式を辞書の右辺に現れる x_1 に代入すれば辞書を更新できる.

$$z = 9 - \frac{1}{2}x_3 - \frac{1}{2}x_4,$$

$$x_1 = 3 - \frac{3}{2}x_3 + \frac{1}{2}x_4,$$

$$x_2 = 3 + \frac{1}{2}x_3 - \frac{1}{2}x_4,$$

$$x_5 = 1 + \frac{5}{2}x_3 - \frac{1}{2}x_4.$$
(2.43)

更新した辞書では,目的関数 z の変数 x_3, x_4 の係数はいずれも 0 以下なので,それらの値を増加しても目的関数 z の値は改善できない.したがって,この実行可能基底解は最適解であると分かる.以上より,最適解 $(x_1, x_2) = (3,3)$ と最適値 z=9 が求められる.もう 1 つ別の例として以下の線形計画問題を考える.

最大化
$$2x_1 + x_2$$

条件 $x_1 \ge 0$, $\rightarrow ①$
 $x_2 \ge 0$, $\rightarrow ②$
 $x_1 - 2x_2 \le 4$, $\rightarrow ③$
 $-x_1 + x_2 \le 2$. $\rightarrow ④$

この問題の実行可能領域を図 2.9 に示す.スラック変数 x_3, x_4 と目的関数の値を表す変数 z を導入して辞書を作ると

$$z = 2x_1 + x_2,$$

$$x_3 = 4 - x_1 + 2x_2,$$

$$x_4 = 2 + x_1 - x_2$$
(2.45)

2.2 単体法 31

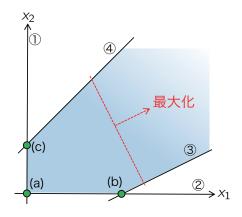


図 2.9 線形計画問題の例

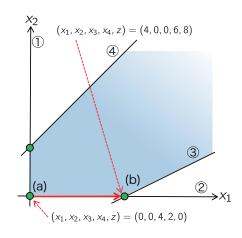


図 2.10 単体法の手続き

となり、 $x_1=x_2=0$ と固定すれば、直ちに $x_3=4$, $x_4=2$, 目的関数値 z=0 が得られる。図 2.9 において、この実行可能基底解は直線 ①、② が交差する左下端の頂点 (a) に対応する.

目的関数 z における変数 x_1, x_2 の係数はいずれも正なので、いずれかの変数の値を増加すれば目的関数 z の値を改善できる。例えば、 $x_2=0$ を保ちつつ x_1 の値を増加すると、基底変数と目的関数の値は

$$z = 2x_1,$$

 $x_3 = 4 - x_1,$
 $x_4 = 2 + x_1$

$$(2.46)$$

となる.ここで,変数 x_3, x_4 の非負制約を満たす必要があるので,変数 x_1 の値は 4 までしか増加できないことが分かる. $x_1=4$ にすると同時に $x_3=0$ となり基底変数 x_3 と非基底変数 x_1 が入れ替わる.このとき, $x_4=6, z=8$ となり,図 2.10 に示すように頂点 (a) から隣接する頂点 (b) への移動が実現できる.

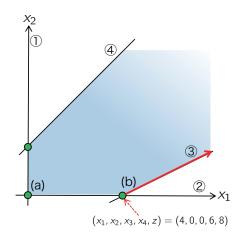


図 2.11 単体法の手続き

新たに基底変数になった x_1 を x_2, x_3 により表す式は辞書の 2 行目から容易に得られる.

$$x_1 = 4 + 2x_2 - x_3. (2.47)$$

この式を辞書の右辺に現れる x_1 に代入すれば辞書を更新できる.

$$z = 8 + 4x_2 - 2x_3,$$

$$x_1 = 4 + 2x_2 - x_3,$$

$$x_4 = 6 + x_2 - x_3.$$
(2.48)

更新した辞書では,目的関数 z の変数 x_2 の係数は正なので,その値を増加すれば目的 関数 z の値を改善できる.そこで, $x_3=0$ を保ちつつ x_2 の値を増加すると,基底変数 と目的関数の値は

$$z = 8 + 4x_2,$$

 $x_1 = 4 + 2x_2,$
 $x_4 = 6 + x_2$

$$(2.49)$$

となる.ここで,変数 x_1, x_4 の非負制約を満たしつつ変数 x_2 の値を増加することで目的 関数の値を限りなく増加できるため有限な最適値が存在しない.すなわち非有界である ことが分かる.図 2.11 に示すように頂点 (b) から直線 ③ に沿って無限に移動できる.

2.2.4 単体法の原理

線形計画問題に対する単体法の手続きを考える.ここでは、標準形の線形計画問題の 制約条件にスラック変数を導入して等式に変形した線形計画問題を考える.

最大化
$$c^{\top}x$$

条件 $Ax = b$, $x \ge 0$. (2.50)

ここで、 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ である. ただし, n > m かつ \mathbf{A} の全ての行ベクトルが 1 次独立であると仮定する.

2.2 単体法 33

単体法ではn個の変数からn-m 個の変数を選んで値を0に固定するため,基底変数はm 個,非基底変数はn-m 個となる。B を基底変数 x_i の添字i の集合とし,対応する変数ベクトルを $\mathbf{x}_B \in \mathbb{R}^m$,目的関数の係数ベクトルを $\mathbf{c}_B \in \mathbb{R}^m$,部分行列を $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ と表す。同様に,N を非基底変数 x_j の添字j の集合とし,対応する変数ベクトルを $\mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^{n-m}$,目的関数の係数ベクトルを $\mathbf{c}_N \in \mathbb{R}^n$,部分行列を $\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{m \times (n-m)}$ と表す。特に, \mathbf{B} が正則行列である(すなわち,逆行列を持つ)とき \mathbf{B} を基底行列(basic matrix), \mathbf{N} を非基底行列(nonbasic matrix)と呼ぶ。例えば,問題(2.34)の初期実行可能基底解 $\mathbf{x}_B = (x_3, x_4, x_5)^{\mathsf{T}}$, $\mathbf{x}_N = (x_1, x_2)^{\mathsf{T}}$ に対応する基底行列と非基底行列はそれぞれ,

$$\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{N} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$
 (2.51)

となり、最適基底解 $\boldsymbol{x}_B^*=(x_1^*,x_2^*,x_5^*)^\top$ 、 $\boldsymbol{x}_N^*=(x_3^*,x_4^*)^\top$ に対応する基底行列と非基底行列はそれぞれ、

$$\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{N} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 (2.52)

となる.

制約条件 Ax = b は

$$Ax = (B \ N) \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} = Bx_B + Nx_N = b$$
 (2.53)

と変形できる. 同様に、目的関数は

$$z = \boldsymbol{c}^{\top} \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{c}_{B} & \boldsymbol{c}_{N} \end{pmatrix}^{\top} \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_{B} \\ \boldsymbol{x}_{N} \end{pmatrix} = \boldsymbol{c}_{B}^{\top} \boldsymbol{x}_{B} + \boldsymbol{c}_{N}^{\top} \boldsymbol{x}_{N}$$
 (2.54)

と変形できる. B が正則行列ならば、制約条件の両辺に左から B^{-1} をかければ、

$$x_B = B^{-1}b - B^{-1}Nx_N (2.55)$$

が得られる. さらに, 式 (2.55) を式 (2.54) に代入すると

$$z = \boldsymbol{c}_{B}^{\top} (\boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{b} - \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{N} \boldsymbol{x}_{N}) + \boldsymbol{c}_{N}^{\top} \boldsymbol{x}_{N}$$

$$= \boldsymbol{c}_{B}^{\top} \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{b} + (\boldsymbol{c}_{N}^{\top} - \boldsymbol{c}_{B}^{\top} \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{N}) \boldsymbol{x}_{N}$$
(2.56)

と変形できる. 以上より,基底解 (x_B,x_N) に対応する辞書は

$$z = \boldsymbol{c}_{B}^{\top} \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{b} + (\boldsymbol{c}_{N} - \boldsymbol{N}^{\top} (\boldsymbol{B}^{-1})^{\top} \boldsymbol{c}_{B})^{\top} \boldsymbol{x}_{N},$$

$$\boldsymbol{x}_{B} = \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{b} - \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{N} \boldsymbol{x}_{N}$$
(2.57)

と表せる. $x_N=\mathbf{0}$ と固定すれば、直ちに $x_B=B^{-1}b$ が得られる* 16 . 特に、 $B^{-1}b\geq \mathbf{0}$ ならば、 $(x_B,x_N)=(B^{-1}b,\mathbf{0})$ は実行可能基底解となる.

 $^{^{*16}}$ 逆行列 $m{B}^{-1}$ の計算は連立 1 次方程式 $m{B}m{x}_B = m{b}$ を解く手続きに対応する.

実行可能基底解 $(\boldsymbol{x}_B, \boldsymbol{x}_N) = (\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b}, \boldsymbol{0})$ が最適解かどうか確かめるには,目的関数 z における非基底変数ベクトル \boldsymbol{x}_N の係数を調べれば良い. $\bar{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b}, \bar{\boldsymbol{c}}_N = \boldsymbol{c}_N - \boldsymbol{N}^\top (\boldsymbol{B}^{-1})^\top \boldsymbol{c}_B, \bar{\boldsymbol{N}} = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N}$ を導入すれば,辞書は

$$z = \boldsymbol{c}_{B}^{\top} \bar{\boldsymbol{b}} + \bar{\boldsymbol{c}}_{N}^{\top} \boldsymbol{x}_{N},$$

$$\boldsymbol{x}_{B} = \bar{\boldsymbol{b}} - \bar{\boldsymbol{N}} \boldsymbol{x}_{N}$$
(2.58)

と表せる. \bar{c}_N は被約費用 (reduced cost)*¹⁷と呼ぶ. 被約費用 \bar{c}_j は対応する非基底変数 x_j の値を 1 単位増やしたときの目的関数 z の値の改善量を表す. $\bar{c}_N \leq \mathbf{0}$ ならば, 非基底変数 x_j ($j \in N$) の係数 \bar{c}_j はいずれも 0 以下なので,それらの変数の値を増加しても目的関数 z の値は改善できない.したがって,実行可能基底解 $(\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_N) = (\bar{\mathbf{b}}, \mathbf{0})$ は最適解であると分かる.

逆に, $\bar{c}_k>0$ となる非基底変数 $x_k~(k\in N)$ が存在するならば,その変数の値を増加すれば目的関数 z の値を改善できる.そこで,他の非基底変数の値を 0 に保ちつつ x_k の値を θ まで増加する. $\bar{a}_k\in\mathbb{R}^m$ を非基底変数 x_k に対応する \bar{N} の列とすると,基底変数と目的関数の値は

$$z = \mathbf{c}_B^{\mathsf{T}} \bar{\mathbf{b}} + \bar{c}_k \theta,$$

$$\mathbf{x}_B = \bar{\mathbf{b}} - \theta \bar{\mathbf{a}}_k$$
 (2.59)

となる. $x_B \ge 0$ を満たす必要があるので、非基底変数 x_k の値は

$$\theta = \min \left\{ \frac{\bar{b}_i}{\bar{a}_{ik}} \mid \bar{a}_{ik} > 0, \ i \in B \right\}$$
 (2.60)

までしか増加できないことが分かる. $x_k = \theta$ にすると同時に $\frac{\bar{b}_i}{\bar{a}_{ik}} = \theta$ を満たす基底変数 x_i の値は 0 となり,基底変数 x_i と非基底変数 x_k が入れ替わる. ちなみに, $\bar{a}_k \leq 0$ ならば $x_B \geq 0$ を満たしつつ非基底変数 x_k の値を限りなく増加できるので有限な最適解が存在しない. すなわち非有界であることが分かる.

単体法の手続きを以下にまとめる.

アルゴリズム 1. 単体法

Step1: 初期の実行可能基底解 $(x_B, x_N) = (B^{-1}b, 0)$ を求める. $\bar{b} = B^{-1}b$ とする.

Step2: 被約費用 $\bar{c}_N = c_N - N^\top (B^{-1})^\top c_B$ を計算する.

Step3: $\bar{c}_N \leq \mathbf{0}$ ならば最適解が得られているので終了する. そうでなければ, $\bar{c}_k > 0$ となる非基底変数 x_k を 1 つ選ぶ.

Step4: \bar{a}_k を計算する. $\bar{a}_k \leq \mathbf{0}$ ならば非有界なので終了する. そうでなければ,式 (2.60) を用いて θ を計算する.

Step5: $x_k=\theta, \boldsymbol{x}_B=\bar{\boldsymbol{b}}-\theta\bar{\boldsymbol{a}}_k$ とする. $\frac{\bar{b}_i}{\bar{a}_{ik}}=\theta$ を満たす基底変数 x_i を非基底変数 x_k と 入れ替えて辞書を更新し、Step2 に戻る.

^{*&}lt;sup>17</sup> 相対費用 (relative cost) とも呼ぶ.

2.2 単体法 35

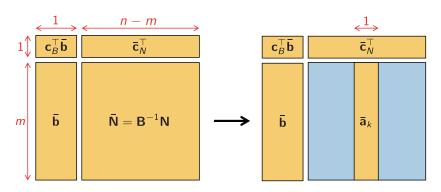


図 2.12 単体法の実行に必要な辞書の情報

実は、単体法の実行に必要な辞書の情報は $\bar{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b}$ 、 $\bar{\boldsymbol{c}}_N = \boldsymbol{c}_N - \boldsymbol{N}^\top (\boldsymbol{B}^{-1})^\top \boldsymbol{c}_B$ と $\bar{c}_k > 0$ を満たす非基底変数 x_k に対応する列 $\bar{\boldsymbol{a}}_k$ だけで辞書全体を計算する必要はない (図 2.12). そこで、まず $\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{B}^{-1})^\top \boldsymbol{c}_B$ を計算した後に、 $\bar{\boldsymbol{c}}_N = \boldsymbol{c}_N - \boldsymbol{N}^\top \boldsymbol{y}$ を計算する. このように、計算が効率化された単体法は改訂単体法 (revised simplex method) と 呼ぶ. 改訂単体法は辞書全体を更新しないため、計算による数値誤差が辞書全体に影響しにくい、変数の数 n が制約条件の数 m に比べて大きい問題では 1 回の反復に必要な計算量が少ないなどの利点がある.

2.2.5 退化と巡回

前節では、単体法は被約費用 $\bar{c}_k > 0$ となる非基底変数 x_k と $\frac{b_i}{\bar{a}_{ik}} = \theta$ となる基底変数 x_i を入れ替えると説明した。しかし、この条件では入れ替える基底変数と非基底変数の 組み合わせは 1 通りに定まるとは限らないため、この組み合わせを選択するための規則 がいくつか提案されている。これまでの例では、被約費用 \bar{c}_k の値、すなわち変数の値を 1 単位増加したときの目的関数 z の改善量が最大となる非基底変数 x_k を常に選んでいる。この規則は最大係数規則 (largest coefficient rule) と呼ぶ。

実は、最大係数規則を用いると単体法が無限ループに陥って最適解にたどり着かない ことがある。例として以下の線形計画問題を考える。

最大化
$$3x_1 + 2x_2$$

条件 $x_1 \ge 0$, $\rightarrow 0$
 $x_2 \ge 0$, $\rightarrow 0$
 $2x_1 + x_2 \le 6$, $\rightarrow 3$
 $x_1 + x_2 \le 3$. $\rightarrow 0$ (2.61)

この問題の実行可能領域を図 2.13 に示す.

図 2.13 に示すように頂点 (b) で 3 本の直線 ②、③、④ が交差している。そのため、頂点 (b) に以下の 3 つの実行可能基底解が存在し、実行可能領域の頂点と実行可能基底解

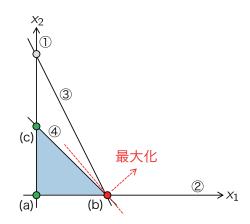


図 2.13 線形計画問題の例

が1対1に対応していないことが分かる.

 $\mathbf{x} = (3,0,0,0)^{\top}$, 基底変数 $\{x_1,x_2\}$, 非基底変数 $\{x_3,x_4\}$, $\mathbf{x} = (3,0,0,0)^{\top}$, 基底変数 $\{x_1,x_4\}$, 非基底変数 $\{x_2,x_3\}$, $\mathbf{x} = (3,0,0,0)^{\top}$, 基底変数 $\{x_1,x_3\}$, 非基底変数 $\{x_2,x_4\}$.

また、これらの実行可能基底解では値が0となる基底変数が存在している。このような基底解は退化 (degenerate) していると呼ぶ。

この問題に単体法を適用してみよう.スラック変数 x_3, x_4 と目的関数の値を表す変数 z を導入して辞書を作ると

$$z = 3x_1 + 2x_2,$$

$$x_3 = 6 - 2x_1 - x_2,$$

$$x_4 = 3 - x_1 - x_2$$
(2.62)

となり、 $x_1=x_2=0$ と固定すれば、直ちに $x_3=6$ 、 $x_4=3$ 、目的関数値 z=0 が得られる。図 2.13 において、この実行可能基底解は ①、② が交差する左下端の頂点 (a) に対応する.

目的関数 z における変数 x_1,x_2 の係数はいずれも正なので、いずれかの変数の値を増加すれば目的関数 z の値を改善できる.最大係数規則にしたがって $x_2=0$ を保ちつつ x_1 の値を増加すると,基底変数と目的変数の値は

$$z = 3x_1,$$

 $x_3 = 6 - 2x_1,$
 $x_4 = 3 - x_1$ (2.63)

となる. 変数 x_3, x_4 の非負制約を満たす必要があるので,変数 x_1 の値は 3 までしか増加できないことが分かる. $x_1=3$ にすると同時に $x_3=x_4=0$ となる. このとき,z=9 となり,図 2.14 に示すように頂点 (a) から隣接する頂点 (b) への移動が実現できる.

基底変数 x_3, x_4 の値はともに 0 であり, どちらを非基底変数 x_1 と入れ替えても構わな

2.2 単体法 37

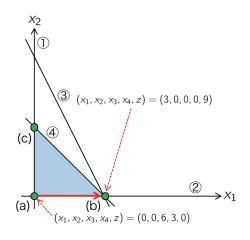


図 2.14 単体法の手続き

い. 基底変数 x_3 と非基底変数 x_1 を入れ替えると以下の辞書が得られる.

$$z = 9 + \frac{1}{2}x_2 - \frac{3}{2}x_3,$$

$$x_1 = 3 - \frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{2}x_3,$$

$$x_4 = 0 - \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{2}x_3.$$
(2.64)

目的関数 z における変数 x_2 の係数のみ正なので,変数 x_2 の値を増加すれば目的関数 z の値を改善できるように思われる.そこで, $x_3=0$ を保ちつつ x_2 の値を増加すると,基底変数と目的関数の値は

$$z = 9 + \frac{1}{2}x_2,$$

$$x_1 = 3 - \frac{1}{2}x_2,$$

$$x_4 = 0 - \frac{1}{2}x_2$$
(2.65)

となる. ところが,変数 x_1, x_4 の非負制約を満たす必要があるので,変数 x_2 の値は 0 から増加できないことが分かる. 基底変数 x_4 と非基底変数 x_2 を入れ替えれば以下の辞書が得られる.

$$z = 9 - x_3 - x_4,$$

$$x_1 = 3 - \frac{1}{2}x_3 + x_4,$$

$$x_2 = 0 + x_3 - 2x_4.$$
(2.66)

しかし、図 2.14 に示すように頂点 (b) に留まり、隣接する頂点に移動していないことが確められる.

一般に、単体法のある反復において $\frac{\bar{b}_i}{\bar{a}_{ik}}=\theta$ を満たす基底変数 x_i が複数存在することがある。その場合には、新たな実行可能基底解では値が 0 となる基底変数が現れる。すなわち退化した実行可能基底解となる。更新された辞書では $\bar{b}_i=0$ となる行が現れて $\theta=0$ となる可能性が生じる。もし、 $\theta=0$ となれば、基底変数と非基底変数を入れ替えても、実際には変数の値は変わらず、目的関数の値も改善されない。

退化が生じると,実行可能領域の同じ頂点に留まったまま基底変数と非基底変数の入れ替えを繰り返した後に,同じ実行可能基底解(同じ基底変数と非基底変数の組み合わ

せ) に戻る巡回 (cycling) と呼ばれる現象が生じることもある. 巡回が生じると単体法は無限ループに陥り,終了条件を満たす辞書に到達できなくなる. 一方で,退化が生じなければ,基底変数と非基底変数を入れ替える度に実行可能領域の隣接する頂点に移動するため,有限の反復回数で終了条件を満たす辞書に到達できる.

最大係数規則では巡回を起こして単体法が終了しない例がいくつか知られている. 巡回を避けるための規則はいくつか提案されており、被約費用 $\bar{c}_k>0$ を満たす非基底変数 x_k が複数存在する場合には添字 k が最小となる非基底変数 x_k を選び、 $\frac{\bar{b}_i}{\bar{a}_{ik}}=\theta$ を満たす基底変数 x_i を満たす基底変数 x_i が複数存在する場合には添字 i が最小となる基底変数 x_i を選ぶ規則が良く知られている. この規則は最小添字規則 (smallest subscript rule) もしくはブランドの規則 (Bland's rule) と呼ぶ*18.

多くの問題例では、単体法は全ての実行可能基底解を調べることなく終了条件を満た す辞書に到達する.しかし、単体法が全ての実行可能基底解を調べる必要が生じる以下 の線形計画問題が知られている.

最大化
$$\sum_{j=1}^{n} 10^{n-j} x_{j}$$
 条件
$$2\sum_{j=1}^{i-1} 10^{i-j} x_{j} + x_{i} \le 100^{i-1}, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$x_{j} \ge 0, \qquad j = 1, \dots, n.$$
 (2.67)

この問題の実行可能領域はn次元空間の超立方体を巧妙に歪ませた凸多面体で 2^n 個の頂点を持つ. 000円 (Klee) とミンティ (Minty) は,原点から単体法を開始すると最適解が得られるまでに凸多面体の全ての頂点を巡り 0^n-1 回の反復が必要となることを示した.

2.2.6 2段階単体法

2.2.3 節で示した例では実行可能基底解を簡単に見つけることができた.しかし,一般に,実行可能基底解を見つけることは簡単ではない上に,そもそも実行可能解を持たない問題が与えられることもある.例として以下の線形計画問題を考える.

最大化
$$x_1 + 2x_2$$

条件 $x_1 \ge 0$, $\rightarrow ①$
 $x_2 \ge 0$, $\rightarrow ②$
 $x_1 + x_2 \le 6$, $\rightarrow ③$
 $x_1 + 3x_2 \le 12$, $\rightarrow ④$
 $-3x_1 - 2x_2 \le -6$. $\rightarrow ⑤$

この問題の実行可能領域を図 2.15 に示す. 制約条件の右辺の定数の一部が負であるため, 2.2.3 節と同様にスラック変数 x_3, x_4, x_5 と目的関数の値を表す変数 z を導入して辞

^{*18} 最小添字規則は必ず終了条件を満たす辞書に到達できるが、退化が生じない辞書では最大係数規則より 多くの反復回数を要する場合が多いことが経験的に知られている。そこで、退化が生じた辞書でのみ最 小添字規則を適用し、それ以外の辞書ではその他の規則を適用するなどの工夫が必要となる。

2.2 単体法 39

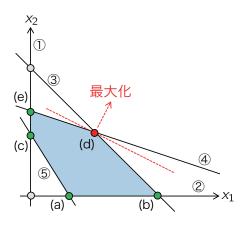


図 2.15 線形計画問題の例

書を作ると

$$z = x_1 + 2x_2,$$

$$x_3 = 6 - x_1 - x_2,$$

$$x_4 = 12 - x_1 - 3x_2,$$

$$x_5 = -6 + 3x_1 + 2x_2$$
(2.69)

となり、実行可能基底解が得られない。そこで、与えられた問題を解く前に実行可能基底解を1つ求める補助問題 (auxiliary problem) を作成する。変数 x_0 を新たに導入して

最小化
$$x_0$$

条件 $x_1 + x_2 - x_0 \le 6$,
 $x_1 + 3x_2 - x_0 \le 12$, (2.70)
 $-3x_1 - 2x_2 - x_0 \le -6$,
 $x_0, x_1, x_2 \ge 0$,

と定義する. 変数 x_0 は制約条件の最大の違反量を表し、人工変数 (artificial variable) と呼ぶ. この補助問題の最適値が 0 ($x_0=0$) であれば元の問題に実行可能解が存在し、最適値が正 ($x_0>0$) であれば元の問題に実行可能解が存在しないことが分かる. スラック変数 x_3, x_4, x_5 と目的関数の値を表す変数 w を導入すると実行可能でない辞書が得られる.

$$w = x_0,$$

$$x_3 = 6 - x_1 - x_2 + x_0,$$

$$x_4 = 12 - x_1 - 3x_2 + x_0,$$

$$x_5 = -6 + 3x_1 + 2x_2 + x_0.$$
(2.71)

しかし、制約条件の違反量が最大となる基底変数 x_5 と非基底変数 x_0 を入れ替えることで実行可能な辞書に更新できる.

$$w = 6 - 3x_1 - 2x_2 + x_5,$$

$$x_3 = 12 - 4x_1 - 3x_2 + x_5,$$

$$x_4 = 18 - 4x_1 - 5x_2 + x_5,$$

$$x_0 = 6 - 3x_1 - 2x_2 + x_5.$$
(2.72)

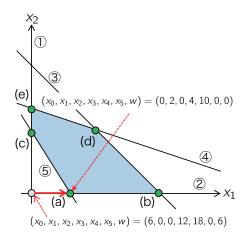


図 2.16 単体法の手続き

目的関数 w における変数 x_1, x_2 の係数はいずれも負なので、いずれかの変数の値を増加すれば目的関数 w の値を改善できる *19 . 最大係数規則にしたがって $x_2=0, x_5=0$ を保ちつつ x_1 の値を増加すると、変数 x_1 は 2 までしか増加できないことが分かる、 $x_1=2$ にすると同時に $x_0=0$ となり、基底変数 x_0 と非基底変数 x_1 を入れ替えると以下の辞書が得られる.

$$w = x_0,$$

$$x_3 = 4 + \frac{4}{3}x_0 - \frac{1}{3}x_2 - \frac{1}{3}x_5,$$

$$x_4 = 10 + \frac{4}{3}x_0 - \frac{7}{3}x_2 - \frac{1}{3}x_5,$$

$$x_1 = 2 - \frac{1}{3}x_0 - \frac{2}{3}x_2 + \frac{1}{3}x_5.$$
(2.73)

このとき,目的関数 w の最適値は 0 $(x_0=0)$ となり,元の問題の実行可能基底解 $(x_1,x_2)=(2,0)$ が求められる.図 2.16 に示すように原点から頂点 (a) への移動が実現できる.

この辞書の変数 x_0 の項を除き,目的関数 w を元の問題の目的関数 z で置き換えれば元の問題の実行可能な辞書が得られる.ここで,目的関数 $z=x_1+2x_2$ は,辞書の 4 行目を x_1 に代入すれば,

$$z = (2 - \frac{2}{3}x_2 + \frac{1}{3}x_5) + 2x_2$$

= $2 + \frac{4}{3}x_2 + \frac{1}{3}x_5$ (2.74)

となり非基底変数 x_2, x_5 のみで表せる.

$$z = 2 + \frac{4}{3}x_2 + \frac{1}{3}x_5,$$

$$x_3 = 4 - \frac{1}{3}x_2 - \frac{1}{3}x_5,$$

$$x_4 = 10 - \frac{7}{3}x_2 - \frac{1}{3}x_5,$$

$$x_1 = 2 - \frac{2}{3}x_2 + \frac{1}{3}x_5.$$
(2.75)

この辞書に引き続き単体法を適用すれば元の問題に対する最適解が得られる.

 $^{^{*19}}$ 補助問題では目的関数 w を最小化していることに注意する.

このように、第1段階で実行可能解を1つ求める補助問題を作って解き、元の問題の 実行可能基底解が求められれば、第2段階でそれを初期解として元の問題を解く、そうで なければ実行不能と判断して終了するアルゴリズムは2段階単体法 (two-phase simplex method) と呼ぶ.

一般的な標準形の線形計画問題

最大化
$$\sum_{j=1}^{n} c_{j}x_{j}$$
 条件
$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} \leq b_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$$x_{i} > 0, \qquad j = 1, \dots, n,$$

$$(2.76)$$

が与えられたとき、スラック変数と目的関数の値を表す変数を導入して辞書を作ると

$$z = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j,$$

$$x_{n+i} = b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j, \quad i = 1, \dots, m,$$
(2.77)

となる.この辞書が実行可能であるための必要十分条件は,制約条件の右辺の定数 b_i の全てが非負となることである. すなわち,原点 $x_1=x_2=\cdots=x_n=0$ が実行可能基底解であることと等価である.

右辺の定数 b_i が負となる制約条件が存在する問題では原点は実行可能基底解ではないため,実行可能基底解を1 つ求める補助問題を作成する.

最小化
$$x_0$$

条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - x_0 \le b_i, \quad i = 1, \dots, m,$ (2.78) $x_j \ge 0, \qquad j = 0, \dots, n.$

スラック変数 x_{n+1}, \ldots, x_{n+m} と目的関数の値を表す変数 w を導入して辞書を作ると

$$x_{n+i} = b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j + x_0, \quad i = 1, \dots, m,$$
 (2.79)

となる.右辺の定数 b_i の最小値を b_k (< 0) とする.対応する基底変数 x_{n+k} と非基底変数 x_0 と入れ替えて辞書を更新すると $x_0=-b_k>0$, $x_{n+k}=0$ となる.その他の基底変数も $x_{n+i}=b_i-b_k>0$ となり,実行可能な辞書が得られる.

2.3 緩和問題と双対定理

数理最適化の主要な目的は最適化問題の最適解を求めることであるが、実際には最適解を求めることが困難な問題も少なくない、そのような問題では、最適値の上界 (upper

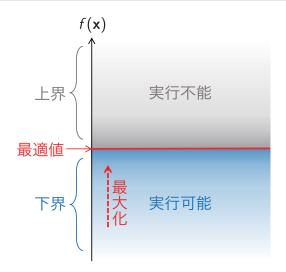


図 2.17 最適化問題の上界と下界

bound) と下界 (lower bound) を求めることが重要な課題となる. また,最適解を求めることが可能な問題であっても,得られた実行可能解が最適かどうかを確かめる必要がある. このようなとき,最大化問題では得られた実行可能解の目的関数の値が上界と一致すれば,それが最適値であると分かる.

図 2.17 に示すように,最大化問題では実行可能解を 1 つ求めれば,その目的関数の値は最適値以下なので下界は求められる *20 . しかし,目的関数の値が最適値より大きな実行可能解は存在しないので上界を求めるには工夫が必要となる.ここでは,線形計画問題を例に最適値の良い上界を求める方法について説明する.

2.3.1 双対問題

まず, 例として以下の線形計画問題を考える.

最大化
$$20x_1 + 10x_2$$

条件 $x_1 + x_2 \le 6$, $\rightarrow ①$
 $3x_1 + x_2 \le 12$, $\rightarrow ②$
 $x_1 + 2x_2 \le 10$, $\rightarrow ③$
 $x_1, x_2 \ge 0$. (2.80)

この問題を解くのではなく,目的関数の最適値 z^* の取り得る範囲を求めることを考える.例えば, $x_1=3,\,x_2=3$ のように実行可能解を 1 つ与えれば,その目的関数の値は最適値以下なので $z^*\geq 90$ と下界が求められる.それでは,最適値 z^* の上界を求めるにはどうすれば良いだろうか?例えば,制約条件 ②,③ をそれぞれ 6 倍,2 倍して足し合

 $^{^{*20}}$ もちろん,実行可能解を 1 つ求めることが困難な最適化問題もあるので下界を求めることが容易であるとは限らない.

わせると

$$\frac{6 \times (3x_1 + x_2 \le 12)}{2 \times (x_1 + 2x_2 \le 10)} \\
20x_1 + 10x_2 \le 92$$
(2.81)

と新たな不等式が得られる.最適解 (x_1^*,x_2^*) はこの不等式を満たすので $z^*=20x_1^*+10x_2^*\leq 92$ と最適値の上界が求められる.次に,制約条件 ①, ② をともに 5 倍して足し合わせると

$$5 \times (x_1 + x_2 \le 6)
5 \times (3x_1 + 2x_2 \le 12)
20x_1 + 10x_2 \le 90$$
(2.82)

と別の不等式が得られる.最適解 (x_1^*, x_2^*) はこの不等式も満たすので $z^* = 20x_1^* + 10x_2^* \le 90$ と最適値のさらに良い上界が求められる.このとき,最適値の下界と上界の値が一致しているので,最適値が $z^* = 90$ で,先に求めた実行可能解 $x_1 = 3$, $x_2 = 3$ が最適解であることが分かる.

この線形計画問題の最適値の良い上界を求める手続きを考える. 制約条件 ①, ②, ③ をそれぞれ u_1 倍, u_2 倍, u_3 倍して足し合わせると

$$(y_1 + 3y_2 + y_3)x_1 + (y_1 + y_2 + 2y_3)x_2 \le 6y_1 + 12y_2 + 10y_3$$
 (2.83)

と新たな不等式が得られる。このとき, y_1 , y_2 , y_3 はいずれも非負でなければならない (そうでなければ不等式が成り立たなくなる).実行可能解では x_1 , x_2 は非負の値を取るので,左辺の x_1 , x_2 の係数がそれぞれ $y_1+3y_2+y_3\geq 20$, $y_1+y_2+2y_3\geq 10$ を満たせば

$$20x_1 + 10x_2 \le (y_1 + 3y_2 + y_3)x_1 + (y_1 + y_2 + 2y_3)x_2 \le 6y_1 + 12y_2 + 10y_3$$
(2.84)

より最適値 z^* の上界が求められる. これらをまとめると,最適値 z^* の良い上界を求める問題は,以下の線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$6y_1 + 12y_2 + 10y_3$$

条件 $y_1 + 3y_2 + y_3 \ge 20$,
 $y_1 + y_2 + 2y_3 \ge 10$,
 $y_1, y_2, y_3 \ge 0$. (2.85)

このように、ある最適化問題の最適値の良い上界*²¹を求める問題を双対問題 (dual problem) と呼び、元の問題を主問題 (primal problem) と呼ぶ.

一般的な標準形の線形計画問題の最適値の良い上界を求める手続きを考える.

最大化
$$\sum_{j=1}^{n} c_{j}x_{j}$$

条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_{j} \leq b_{i}, \quad i = 1, \dots, m,$
 $x_{j} \geq 0, \qquad j = 1, \dots, n.$ (2.86)

^{*21} 目的関数が最小化であれば下界.

まず、各制約条件に非負の係数 y_i を掛けて足し合わせると

$$\sum_{i=1}^{m} y_i \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right) \le \sum_{i=1}^{m} y_i b_i \tag{2.87}$$

と新たな不等式が得られる。左辺を x_j についてまとめると以下のように変形できる。

$$\sum_{j=1}^{n} x_j \left(\sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) \le \sum_{i=1}^{m} y_i b_i. \tag{2.88}$$

実行可能解では x_j は非負の値を取るので、左辺の x_j の係数が $\sum_{i=1}^m a_{ij} y_i \geq c_j$ を満たせば

$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j \le \sum_{j=1}^{n} x_j \left(\sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) \le \sum_{i=1}^{m} y_i b_i$$
 (2.89)

より上界が求められる. これらをまとめると,最適値の良い上界を求める双対問題は,以下の線形計画問題に定式化できる.

ちなみに、同じ手続きで双対問題の最適値の良い下界を求める問題 (すなわち双対問題の 双対問題) を導くと元の主問題が得られる.

ここまでの例では主問題と双対問題は対称な形を取っていたが、一般に、主問題と双対問題がそのような関係にあるわけではない.次に、変数に非負制約がない線形計画問題を考える.

最大化
$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$
 (2.91)
条件
$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i, \quad i = 1, \dots, m.$$

各制約条件に非負の係数 y_i を掛けて足し合わせた後に、左辺を x_j についてまとめると以下の不等式が得られる.

$$\sum_{j=1}^{n} x_j \left(\sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) \le \sum_{i=1}^{m} y_i b_i. \tag{2.92}$$

このとき、左辺の x_i の係数が $\sum_{i=1}^m a_{ij}y_i \geq c_i$ を満たしても、 x_i が負の値を取ると

$$\sum_{i=1}^{n} x_j \left(\sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) \ge \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \tag{2.93}$$

が成り立たなくなる. そこで、この条件を $\sum_{i=1}^m a_{ij} y_i = c_j$ と変更すれば

$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j = \sum_{j=1}^{n} x_j \left(\sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) \le \sum_{i=1}^{m} y_i b_i$$
 (2.94)

より上界が求められる. これらをまとめると,最適値の良い上界を求める双対問題は,以 下の線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$\sum_{i=1}^{m} b_i y_i$$
条件
$$\sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i = c_j, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$y_i \ge 0, \qquad i = 1, \dots, m.$$
(2.95)

このように、変数に非負制約がない線形計画問題では、双対問題の制約条件は等式となる.

もう1つ、等式制約からなる線形計画問題を考える.

最大化
$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$

条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i, \quad i = 1, \dots, m,$
 $x_j \geq 0, \qquad j = 1, \dots, n.$
を掛けて足し合わせた後に、左辺を x_i についてまとめると以下の

各制約条件に係数 y_i を掛けて足し合わせた後に、左辺を x_j についてまとめると以下の等式が得られる.

$$\sum_{i=1}^{n} x_j \left(\sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) = \sum_{i=1}^{m} y_i b_i.$$
 (2.97)

ここで,制約条件は等式なので係数 y_i は負の値を取っても構わない.実行可能解では x_j は非負の値を取るので,左辺の x_j の係数が $\sum_{i=1}^m a_{ij} y_i \geq c_j$ を満たせば

$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j \le \sum_{j=1}^{n} x_j \left(\sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) = \sum_{i=1}^{m} y_i b_i$$
 (2.98)

より上界が求められる. これらをまとめると,最適値の良い上界を求める双対問題は,以 下の線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$\sum_{i=1}^{m} b_i y_i$$
 (2.99)
条件 $\sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \ge c_j, \quad j = 1, \dots, n.$

このように,等式制約からなる線形計画問題では,双対問題の変数に非負制約が付かない.

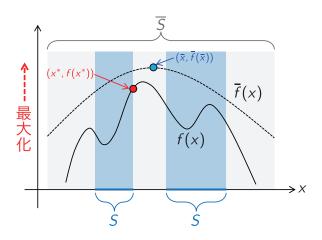


図 2.18 緩和問題の概念

2.3.2 緩和問題

前節では、制約条件の1次結合を用いて線形計画問題の最適値の良い上界を求めた. 一方で、非線形計画問題を含むより広い範囲の最適化問題では、緩和問題を用いて最適値の良い上界を求める場合が多い.ここでは、ラグランジュ緩和問題を用いて線形計画問題の双対問題を導出する手続きを説明する.

一般的な形の最適化問題を考える.

最大化
$$f(x)$$
 条件 $x \in S$. (2.100)

この問題の最適解を x^* とする. この最適化問題に対する緩和問題 (relaxation problem) は以下のように定義される.

最大化
$$\bar{f}(x)$$
 条件 $x \in \bar{S}$. (2.101)

ただし, $\bar{f}(\boldsymbol{x}) \geq f(\boldsymbol{x})$ ($\boldsymbol{x} \in S$), $\bar{S} \supseteq S$ を満たす (図 2.18).緩和問題の最適解を $\bar{\boldsymbol{x}}$ とすると, $f(\boldsymbol{x}^*) \leq \bar{f}(\bar{\boldsymbol{x}})$ より $f(\boldsymbol{x}^*) \leq \bar{f}(\bar{\boldsymbol{x}})$ が成り立ち,緩和問題を解けば元の最適化問題の最適値の上界が求められる.また, $\bar{\boldsymbol{x}} \in S$ かつ $\bar{f}(\bar{\boldsymbol{x}}) = f(\bar{\boldsymbol{x}})$ ならば, $\bar{\boldsymbol{x}}$ は元の最適化問題の最適解である.

緩和問題の大きな利点は,元の問題の最適解を求めることが困難でも,制約条件や目的関数を置き換えて最適解を求め易い問題に変形できることである.例えば,元の最適化問題の実行可能領域 S が非凸集合であれば, $\bar{S}\supseteq S$ を満たす凸集合 \bar{S} に,目的関数 f(x) が非凸関数であれば, $\bar{f}(x)\geq f(x)$ $(x\in S)$ を満たす凸関数 $\bar{f}(x)$ に置き換えて最適解を求め易い緩和問題に変形できる.

ラグランジュ緩和問題 (Lagrangian relaxation problem) は,一部の制約条件を取り除いた上で,それらの制約条件に対する違反量に係数 *22 を掛けて目的関数に繰り込むこと

 $^{^{*22}}$ ラグランジュ乗数 (Lagrangian multiplier) と呼ぶ.

で得られる. 前節の例をもう一度考える.

最大化
$$z(x) = 20x_1 + 10x_2$$

条件 $x_1 + x_2 \le 6$, $\to ①$
 $3x_1 + x_2 \le 12$, $\to ②$
 $x_1 + 2x_2 \le 10$, $\to ③$
 $x_1, x_2 \ge 0$. (2.102)

制約条件 ①, ②, ③ を取り除いた上で、それらの制約条件の違反量にそれぞれ非負の係数 y_1, y_2, y_3 を掛けて目的関数に繰り込むと、以下のラグランジュ緩和問題が得られる.

最大化
$$\bar{z}(\mathbf{x}) = 20x_1 + 10x_2 - y_1(x_1 + x_2 - 6) - y_2(3x_1 + x_2 - 12) - y_3(x_1 + 2x_2 - 10),$$
 (2.103)
条件 $x_1, x_2 \ge 0.$

線形計画問題の実行可能解 x は $x_1+x_2-6\leq 0$, $3x_1+x_2-12\leq 0$, $x_1+2x_2-10\leq 0$ より $\bar{z}(x)\geq z(x)$ を満たすので,この問題は線形計画問題の緩和問題となることが確かめられる.

このとき,制約条件の係数 y_1 , y_2 , y_3 の値を上手く調整すれば,線形計画問題の最適値の良い上界が得られる.目的関数 $\bar{z}(\boldsymbol{x})$ を x_j についてまとめると以下のように変形できる.

$$\bar{z}(x) = (20 - y_1 - 3y_2 - y_3)x_1 + (10 - y_1 - y_2 - 2y_3)x_2 + 6y_1 + 12y_2 + 10y_3.$$
 (2.104)

係数 y_1, y_2, y_3 が $20-y_1-3y_2-y_3>0$ もしくは $10-y_1-y_2-2y_3>0$ を満たすと,それぞれ x_1,x_2 の値を増加することで目的関数 $\overline{z}(\boldsymbol{x})$ の値を限りなく増加できるので,線形計画問題の最適値の有限な上界が得られない.逆に,係数 y_1, y_2, y_3 が $20-y_1-3y_2-y_3\leq 0, 10-y_1-y_2-2y_3\leq 0$ を満たすと $x_1=x_2=0$ がラグランジュ緩和問題の最適解となり,最適値 $6y_1+12y_2+10y_3$ が得られる.これらをまとめると,線形計画問題の最適値の良い上界を求める双対問題は,以下の線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$6y_1 + 12y_2 + 10y_3$$

条件 $20 - y_1 - 3y_2 - y_3 \le 0$,
 $10 - y_1 - y_2 - 2y_3 \le 0$,
 $y_1, y_2, y_3 \ge 0$. (2.105)

ラグランジュ緩和問題を用いて一般的な標準形の線形計画問題の双対問題を求める手 続きを考える.

最大化
$$z(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$

条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i$, $i = 1, \dots, m$, (2.106)
 $x_j \ge 0$, $j = 1, \dots, n$.

各制約条件に対応する非負の係数 y_i を導入すると以下のラグランジュ緩和問題が得ら

れる.

目的関数 $\bar{z}(x)$ を x_i についてまとめると以下のように変形できる.

$$\bar{z}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n} x_j \left(c_j - \sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) + \sum_{i=1}^{m} b_i y_i.$$
 (2.108)

 x_j は非負の値を取るので,元の線形計画問題の最適値に対する有限な上界を得るためには, x_j の係数が $c_j - \sum_{i=1}^m a_{ij} y_i \leq 0$ を満たす必要がある.このとき, $x_1 = x_2 = \cdots = x_n = 0$ がラグランジュ緩和問題の最適解となり,最適値 $\sum_{i=1}^m b_i y_i$ が得られる.これらをまとめると,線形計画問題の最適値の良い上界を求める双対問題は,以下の線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$\sum_{i=1}^{m} b_i y_i$$

条件 $c_j - \sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \le 0, \quad j = 1, \dots, n,$
 $y_i \ge 0, \qquad i = 1, \dots, m.$ (2.109)

前節と同様に,次に変数に非負制約がない線形計画問題を考える.

最大化
$$z(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$
 条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \le b_i, \quad i = 1, \dots, m.$
$$(2.110)$$

各制約条件に対応する非負の係数 y_i を導入すると、以下のラグランジュ緩和問題が得られる。

最大化
$$\bar{z}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j - \sum_{i=1}^{m} y_i \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j - b_i \right).$$
 (2.111)

目的関数を x_i についてまとめると以下のように変形できる.

$$\bar{z}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n} x_j \left(c_j - \sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) + \sum_{i=1}^{m} b_i y_i.$$
 (2.112)

 x_j は正負いずれの値も取るので,元の線形計画問題の最適値の有限な上界を得るためには, x_j の係数が $c_j - \sum_{i=1}^m a_{ij} y_i = 0$ を満たす必要がある.このとき,最適値 $\sum_{i=1}^m b_i y_i$ が得られる.これらをまとめると,線形計画問題の最適値の良い上界を求める双対問題

は,以下の線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$\sum_{i=1}^{m} b_i y_i$$

条件 $c_j - \sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i = 0, \quad j = 1, \dots, n,$
 $y_i \ge 0, \qquad i = 1, \dots, m.$ (2.113)

もう1つ, 等式制約からなる線形計画問題を考える.

最大化
$$z(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$

条件 $\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i, \quad i = 1, \dots, m,$
 $x_j \ge 0, \quad j = 1, \dots, n.$ (2.114)

等式制約 $\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j=b_i$ を 2 つの不等式制約 $\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j\leq b_i$, $\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j\geq b_i$ に置き換えて,それぞれの不等式制約に対応する非負の係数 y_i^+ , y_i^- を導入すると,以下のラグランジュ緩和問題が得られる.

最大化
$$\bar{z}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j - \sum_{i=1}^{m} y_i^+ \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j - b_i\right)$$

$$-\sum_{i=1}^{m} y_i^- \left(b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j\right)$$
 条件 $x_j \ge 0, \quad j = 1, \dots, n.$ (2.115)

目的関数を x_j についてまとめると以下のように変形できる.

$$\bar{z}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_j \left\{ c_j - \sum_{i=1}^{m} a_{ij} (y_i^+ - y_i^-) \right\} + \sum_{i=1}^{m} b_i (y_i^+ - y_i^-).$$
 (2.116)

ここで,新たな係数 y_i を導入して $y_i = y_i^+ - y_i^-$ と置き換えると

$$\bar{z}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_j \left(c_j - \sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \right) + \sum_{i=1}^{m} b_i y_i$$
 (2.117)

と書き換えられる.このとき,新たな係数 y_i は負の値も取ることに注意する. x_j は非負の値を取るので,元の線形計画問題の最適値に対する有限な上界を得るためには, x_j の係数が $c_j - \sum_{i=1}^m a_{ij} y_i \leq 0$ を満たす必要がある.このとき, $x_1 = x_2 = \cdots = x_n = 0$ が ラグランジュ緩和問題の最適解となり,最適値 $\sum_{i=1}^m b_i y_i$ が得られる.これらをまとめると,線形計画問題の最適値の良い上界を求める双対問題は,以下の線形計画問題に定式化できる.

最小化
$$\sum_{i=1}^{m} b_i y_i$$
 (2.118)
条件 $c_j - \sum_{i=1}^{m} a_{ij} y_i \le 0, \quad j = 1, \dots, n.$

2.3.3 双対定理

これまで、目的関数を最大化する線形計画問題の最適値の良い上界を求める双対問題は、目的関数を最小化する線形計画問題として定式化できることを示した。また、双対問題の双対問題は元の問題となることも示した。ここでは、線形計画問題における主問題(P)と双対問題(D)の関係について説明する*23.

(P) 最大化
$$c^{\top}x$$
 最適値の良い上界 (D) 最小化 $b^{\top}y$ 条件 $Ax = b$, \Longleftrightarrow 条件 $A^{\top}y \geq c$. (2.119) 最適値の良い下界

ここで、 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $c \in \mathbb{R}^n$, $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$ である.

主問題 (P) と双対問題 (D) の間には,以下の弱双対定理 (weak duality theorem) が成り立つ.

定理 1. (弱双対定理) x と y がそれぞれ主問題 (P) と双対問題 (D) の実行可能解ならば

$$\boldsymbol{c}^{\top} \boldsymbol{x} \le \boldsymbol{b}^{\top} \boldsymbol{y} \tag{2.120}$$

が成り立つ.

証明. 主問題 (P) と双対問題 (D) の制約条件から

$$c^{\top} x \le (A^{\top} y)^{\top} x = y^{\top} (Ax) = y^{\top} b$$
 (2.121)

系 1. 主問題 (P) と双対問題 (D) のいずれか一方が非有界ならば他方は実行不能である.

証明. 背理法を用いる. 主問題 (P) が非有界のとき, 双対問題 (D) に実行可能解 y が存在すると仮定する. 定理 1 より, 主問題 (P) の任意の実行可能解 x に対して

$$\boldsymbol{c}^{\top} \boldsymbol{x} \le \boldsymbol{b}^{\top} \boldsymbol{y} \tag{2.122}$$

が成り立つ. これは、主問題 (P) が非有界であることに反するため、双対問題 (D) に実行可能解は存在しない. 双対問題 (D) が非有界の場合も同様である.

線形計画問題では、主問題 (P) と双対問題 (D) の間に、以下の強双対定理 (strong duality theorem) が成り立つ.

^{*23} 主問題 (P) は等式制約からなる線形計画問題とする.

定理 2. (強双対定理) 主問題 (P) に最適解 x^* が存在すれば,双対問題 (D) にも最適解 y^* が存在し,

$$\boldsymbol{c}^{\top} \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}^{\top} \boldsymbol{y}^* \tag{2.123}$$

が成り立つ.

証明. 主問題 (P) に単体法を適用して得られた最適基底解を $\mathbf{x}^* = (\mathbf{x}_B^*, \mathbf{x}_N^*)$ とする. 2.2.4 節の議論より最適値は以下のように書ける.

$$\boldsymbol{c}^{\top} \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{c}_{B}^{\top} \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{b} + (\boldsymbol{c}_{N} - \boldsymbol{N}^{\top} (\boldsymbol{B}^{-1})^{\top} \boldsymbol{c}_{B})^{\top} \boldsymbol{x}_{N}^*. \tag{2.124}$$

 x^* は最適基底解なので, $c_N - N^\top (B^{-1})^\top c_B \leq \mathbf{0}$ が成り立つ. $A = (B \ N)$ より $c - A^\top (B^{-1})^\top c_B \leq \mathbf{0}$ が成り立つ*24.ここで, $y = (B^{-1})^\top c_B$ とおくと, $c - A^\top y \leq \mathbf{0}$ が満たされるので y は双対問題 (D) の実行可能解である.また,

$$\boldsymbol{b}^{\top} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}^{\top} (\boldsymbol{B}^{-1})^{\top} \boldsymbol{c}_{B} = (\boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{b})^{\top} \boldsymbol{c}_{B} = (\boldsymbol{x}_{B}^{*})^{\top} \boldsymbol{c}_{B}$$
 (2.125)

この定理は、主問題 (P) と双対問題 (D) が実質的に等価であることを示している。一方で、単体法の反復回数は制約条件の数に比例し、変数の数には比較的鈍感な場合が多いため、制約条件の数が変数の数よりも多い問題では、その双対問題を解けばより効率的に最適解が求められる。

最後に、主問題 (P) の実行可能解 x と双対問題 (D) の実行可能解 y がともに最適解であるための必要十分条件を示す相補性定理 $(complementarity\ theorem)$ を説明する.

定理 3. (相補性定理) 主問題 (P) の実行可能解 x と双対問題 (D) の実行可能解 y がともに最適解であるための必要十分条件は

$$x_j \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} y_i - c_j \right) = 0, \quad j = 1, \dots, n,$$
 (2.126)

が成り立つことである.

証明. x^*, y^* がそれぞれ主問題 (P) と双対問題 (D) の最適解ならば、定理 2 より、

$$\boldsymbol{c}^{\top} \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}^{\top} \boldsymbol{y}^* \tag{2.127}$$

が成り立つ. また, x^* は主問題 (P) の実行可能解なので $Ax^* = b$ が成り立つ. これを上式に代入すると,

$$\boldsymbol{c}^{\top} \boldsymbol{x}^* = (\boldsymbol{A} \boldsymbol{x}^*)^{\top} \boldsymbol{y}^* \tag{2.128}$$

 $^{^{*24}}$ $oldsymbol{c}_B - oldsymbol{B}^ op (oldsymbol{B}^{-1})^ op oldsymbol{c}_B = oldsymbol{0}$ となることに注意する.

		双対問題		
		最適解が存在	非有界	実行不能
	最適解が存在		_	_
主問題	非有界	_	_	$\sqrt{}$
	実行不能	_	$\sqrt{}$	$\sqrt{}$

表 2.1 主問題と双対問題の関係

が得られる. この式を整理すると,

$$(\boldsymbol{x}^*)^{\top} (\boldsymbol{A}^{\top} \boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{c}) = 0 \tag{2.129}$$

となる. ここで, $x^* \geq 0$, $A^{\top}y^* \geq c$ なので, 上式は

$$x_j^* \left(\sum_{i=1}^m a_{ij} y_i^* - c_j \right) = 0, \quad j = 1, \dots, n,$$
 (2.130)

と同値である. 逆に,条件 (2.126) が成り立てば,ここから式 (2.127) が得られる. □

なお,条件 (2.126) は相補性条件 (complementarity condition) と呼ぶ. 実際は,条件 (2.126) と

$$y_i \left(b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right) = 0, \quad i = 1, \dots, m,$$
 (2.131)

をあわせて相補性条件と呼び,条件 (2.126) を主相補性条件,条件 (2.131) を双対相補性条件と呼ぶ.

一般に線形計画問題は以下の 3 つの場合に分類できる. (1) 最適解が存在する, (2) 非有界である, (3) 実行不能である. 定理 2 より, 主問題 (P) に最適解が存在すれば, 双対問題 (D) にも最適解が存在する. 系 1 より, 主問題 (P) と双対問題 (D) のいずれか一方が非有界ならば他方は実行不能である. また, 主問題 (P) と双対問題 (D) がともに実行不能となる以下のような例が存在する.

(P) 最大化
$$2x_1 - x_2$$
 (D) 最小化 $y_1 - 2y_2$ 条件 $x_1 - x_2 \le 1$, 条件 $y_1 - y_2 \ge 2$, $-y_1 + y_2 \ge -1$, $x_1, x_2 > 0$. (2.132)

これらの議論を表 2.1 にまとめる.

2.3.4 感度分析と双対単体法

前節では,双対変数を制約条件に掛ける係数として説明したが,双対変数は応用においても重要な情報を与えてくれる. 現実問題では入力データの正確な数値や条件を事

前に把握できるとは限らないため、さまざまな状況の変化にともなう最適解の変化を分析することが意思決定において重要となる. このような分析を感度分析 (sensitivity analysis)* 25 と呼ぶ.

2.1 節の野菜ジュースの製造に必要な野菜の購入量を決定する栄養問題を考える. ここでは、制約条件を等式に変形した線形計画問題を考える.

最小化
$$c^{\top}x$$

条件 $Ax = b$, (2.133)
 $x > 0$.

ここで, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $c \in \mathbb{R}^n$, $x \in \mathbb{R}^n$ である.この問題に単体法を適用して得られた最適基底解を $(x_B^*, x_N^*) = (B^{-1}b, 0)$ とする.2.2.4 節の議論より,最適基底解 (x_B^*, x_N^*) は実行可能解であるための条件

$$\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b} \ge \boldsymbol{0} \tag{2.134}$$

と, さらに最適解であるための条件

$$\boldsymbol{c}_N - \boldsymbol{N}^{\top} (\boldsymbol{B}^{-1})^{\top} \boldsymbol{c}_B \ge 0 \tag{2.135}$$

を満たしている*26.

まず、野菜の単位当たりの価格 c を $c + \Delta c$ に変化させた問題を考える. このとき、

$$(\boldsymbol{c}_N + \Delta \boldsymbol{c}_N) - \boldsymbol{N}^{\top} (\boldsymbol{B}^{-1})^{\top} (\boldsymbol{c}_B + \Delta \boldsymbol{c}_B) \ge 0$$
 (2.136)

が成り立つならば,野菜の単位当たりの価格を $c+\Delta c$ に変化させた問題の最適基底解は $(B^{-1}b,0)$,最適値の変化量は $\Delta c_B B^{-1}b$ となる.

次に、栄養素の必要量 b を $b + \Delta b$ に変化させた問題を考える、このとき、

$$B^{-1}(\boldsymbol{b} + \Delta \boldsymbol{b}) \ge \mathbf{0} \tag{2.137}$$

が成り立つならば、栄養素の必要量を $b+\Delta b$ に変化させた問題の最適基底解は ($B^{-1}(b+\Delta b)$, 0),最適値の変化量は $c_B^T B^{-1} \Delta b$ となる.定理 2 の証明より,元の問題の双対問題の最適解が $y^* = (B^{-1})^T c_B$ と表せることに注意すれば,最適値の変化量は $(y^*)^T \Delta b$ と書き換えられる.したがって,栄養素 i の必要量を Δb_i だけ変化させれば,原材費の合計は $y_i^* \Delta b_i$ だけ変化することが分かる.双対問題の最適解 y^* の各変数 y_i^* は,栄養素 i の必要量を 1 単位変化させたときの原料費の合計の変化量を表すことから限界価格 (marginal price)*27 と呼ぶ.

双対問題の最適解 y^* は,新たな野菜 k の購入を検討する際にも役立つ.新たな野菜 k の単位量当たりに含まれる栄養素 i の量を a_{ik} ,単位量当たりの価格を c_k ,購入量を x_k

^{*&}lt;sup>25</sup> 事後分析 (post optimality analysis) とも呼ぶ.

^{*26} ここでは、目的関数が最小化のため不等号の向きが逆になっている.

^{*&}lt;sup>27</sup> 潜在価格 (shadow price) あるいは均衡価格 (equilibrium price) とも呼ぶ.

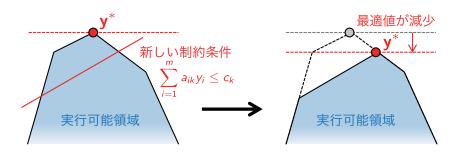


図 2.19 新しい制約条件の追加による双対問題の最適値の変化

とする.このとき、栄養問題に新たな変数 x_k を追加することは、その双対問題に新たな制約条件

$$\sum_{i=1}^{m} a_{ik} y_i \le c_k \tag{2.138}$$

を追加することに対応する。もし,双対問題の最適解 y^* がこの制約条件を満たすならば,新たな制約条件を追加しても双対問題の最適値は変化しない。定理 2 より,栄養問題で新たな変数 x_k を追加しても主問題の最適値は変化しないことが分かる。逆に,双対問題の最適解 y^* がこの制約条件を満たさなければ,新たな制約条件を追加すれば双対問題の最適値は減少する(図 2.19)。定理 2 より,栄養問題で新たな変数 x_k を追加すれば主問題の最適値は減少することが分かる。これは,野菜 k を新たに 1 単位だけ購入することで得られる限界価格の合計 $\sum_{i=1}^m a_{ik}y_i^*$ と,その際に要する原料費 c_k を比較していると解釈できる。

感度分析において、変更前の問題の最適基底解から直ちに変更後の問題の最適基底解が得られなくても、変更前の問題の最適解を出発点として変更後の問題の最適解を効率的に求められる場合が多い.このような手続きを再最適化 (reoptimization) と呼ぶ.

単体法では,目的関数の係数 c が変更されたり,新たな変数が追加されても変更前の問題の最適基底解 (x_B^*,x_N^*) は変わらず実行可能なので,辞書を更新した後に単体法を続けて実行すれば変更後の問題の最適基底解が求められる.しかし,制約条件の右辺の定数 b が変更されると変更前の問題の最適基底解 (x_B^*,x_N^*) は制約条件を満たさなくなることがあり,そのまま単体法を続けて実行することは難しい.そこで,その双対問題の辞書を考える.

ここでは、2.2.4 節の等式制約からなる線形計画問題を考える.

最大化
$$c^{\top}x$$

条件 $Ax = b$, $x \ge 0$. (2.50)

ここで、 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $c \in \mathbb{R}^n$, $x \in \mathbb{R}^n$ である. ある基底解を (x_B, x_N) とする

と,この線形計画問題は

最大化
$$c_B^{\top} x_B + c_N^{\top} x_N$$

条件 $B x_B + N x_N = b$, $x_B \ge 0$, $x_N \ge 0$, (2.139)

と変形できる. 2.2.4 節より、この基底解 (x_B,x_N) に対応する辞書は

$$z_P = \boldsymbol{c}_B^{\top} \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{b} + (\boldsymbol{c}_N - \boldsymbol{N}^{\top} (\boldsymbol{B}^{-1})^{\top} \boldsymbol{c}_B)^{\top} \boldsymbol{x}_N,$$

$$\boldsymbol{x}_B = \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{b} - \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{N} \boldsymbol{x}_N$$
 (2.140)

と表せる. $\bar{\boldsymbol{c}}_N = \boldsymbol{c}_N - \boldsymbol{N}^\top (\boldsymbol{B}^{-1})^\top \boldsymbol{c}_B, \, \bar{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{b}, \, \bar{N} = \boldsymbol{B}^{-1} \boldsymbol{N}$ を導入すれば,この辞書は

$$z_P = \boldsymbol{c}_B^{\top} \bar{\boldsymbol{b}} + \bar{\boldsymbol{c}}_N^{\top} \boldsymbol{x}_N,$$

$$\boldsymbol{x}_B = \bar{\boldsymbol{b}} - \bar{\boldsymbol{N}} \boldsymbol{x}_N$$
 (2.141)

と書き換えられる.

一方で、この線形計画問題の双対問題は

最小化
$$\boldsymbol{b}^{\top} \boldsymbol{y}$$
 条件 $\boldsymbol{A}^{\top} \boldsymbol{y} > \boldsymbol{c}$ (2.142)

である. スラック変数 $\mathbf{s}_B \in \mathbb{R}^m, \mathbf{s}_N \in \mathbb{R}^n$ を導入すると, この双対問題は

最大化
$$-\mathbf{b}^{\top}\mathbf{y}$$

条件 $\mathbf{B}^{\top}\mathbf{y} - \mathbf{s}_{B} = \mathbf{c}_{B},$
 $\mathbf{N}^{\top}\mathbf{y} - \mathbf{s}_{N} = \mathbf{c}_{N},$
 $\mathbf{s}_{B} \geq \mathbf{0},$
 $\mathbf{s}_{N} \geq \mathbf{0},$ (2.143)

と変形できる *28 . この双対問題から変数 y を消去すると

$$z_D = -\mathbf{c}_B^{\mathsf{T}} \mathbf{B}^{-1} \mathbf{b} - (\mathbf{B}^{-1} \mathbf{b})^{\mathsf{T}} \mathbf{s}_B,$$

$$\mathbf{s}_N = -(\mathbf{c}_N - \mathbf{N}^{\mathsf{T}} (\mathbf{B}^{-1})^{\mathsf{T}} \mathbf{c}_B) + \mathbf{N}^{\mathsf{T}} (\mathbf{B}^{-1})^{\mathsf{T}} \mathbf{s}_B$$
(2.144)

と基底解 (s_N, s_B) に対応する辞書が得られる *29 . \bar{c}_N , \bar{b} , \bar{N} を導入すれば、この辞書は

$$z_D = -\mathbf{c}_B^{\top} \bar{\mathbf{b}} - \bar{\mathbf{b}}^{\top} \mathbf{s}_B,$$

$$\mathbf{s}_N = -\bar{\mathbf{c}}_N + \bar{\mathbf{N}}^{\top} \mathbf{s}_B$$
 (2.145)

と書き換えられる. 主問題の最適基底解 (x_B^*, x_N^*) に対応する辞書では $x_B^* = \bar{b} \ge \mathbf{0}$, $\bar{c}_N \le \mathbf{0}$ が成り立つため,ここから双対問題の最適基底解 $(s_N^*, s_B^*) = (-\bar{c}_N, \mathbf{0})$ が求められる.ここで,主問題の辞書 (2.141) と双対問題の辞書 (2.145) は,それぞれ,

$$\begin{pmatrix} z_P \\ \boldsymbol{x}_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{c}_B^\top \bar{\boldsymbol{b}} & \bar{\boldsymbol{c}}_N^\top \\ \bar{\boldsymbol{b}} & -\bar{\boldsymbol{N}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{x}_N \end{pmatrix}$$
(2.146)

$$\begin{pmatrix} z_D \\ \boldsymbol{s}_N \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \boldsymbol{c}_B^{\top} \bar{\boldsymbol{b}} & \bar{\boldsymbol{b}}^{\top} \\ \bar{\boldsymbol{c}}_N & -\bar{\boldsymbol{N}}^{\top} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{s}_B \end{pmatrix}$$
 (2.147)

^{*28} ここでは、目的関数を最大化していることに注意する.

 $^{*^{29}}$ 双対問題では s_N が基底変数ベクトル, s_B が非基底変数ベクトルであることに注意する.

と書けるため,主問題の最適な辞書 (2.141) を転置すれば双対問題の最適な辞書 (2.145) が求められる。このとき,主問題の基底変数ベクトル x_B は双対問題の非基底変数ベクトル s_B に,主問題の非基底変数ベクトル s_N は双対問題の基底変数ベクトル s_N にそれぞれ対応付けられる。また,主問題における最適性の条件 $\bar{c}_N \leq \mathbf{0}$ が双対問題における制約条件 $s_N \geq \mathbf{0}$ に、主問題における制約条件 $s_N \geq \mathbf{0}$ にそれぞれ対応付けられる。

主問題における制約条件 Ax = b の右辺の定数 b の変更は,双対問題では目的関数 $z_D = -b^{\mathsf{T}}y$ の係数 -b の変更に置き換えられる.双対問題の最適基底解 (s_N^*, s_B^*) は変更後も変わらず実行可能なので,辞書を更新した後に双対問題の制約条件を満たしつつ,その目的関数 z_D を最大化するようなピボット操作を適用すれば良い.このような考え方に基づく単体法のバリエーションは双対単体法 (dual simplex method) と呼ぶ.

2.2.3 節の例を用いて、制約条件の右辺の定数 b に変更が加えられた際に最適な辞書から双対単体法を実行する手続きを説明する.

最大化
$$x_1 + 2x_2$$

条件 $x_1 \ge 0$, $\rightarrow ①$
 $x_2 \ge 0$, $\rightarrow ②$
 $x_1 + x_2 \le 6$, $\rightarrow ③$
 $x_1 + 3x_2 \le 12$, $\rightarrow ④$
 $2x_1 + x_2 \le 10$. $\rightarrow ⑤$

スラック変数 x_3, x_4, x_5 を導入して初期の辞書を作ると

$$z_{P} = x_{1} + 2x_{2},$$

$$x_{3} = 6 - x_{1} - x_{2},$$

$$x_{4} = 12 - x_{1} - 3x_{2},$$

$$x_{5} = 10 - 2x_{1} - x_{2}$$

$$(2.149)$$

となる. この辞書に単体法を適用すると以下のように最適な辞書が得られる.

$$z_{P} = 9 - \frac{1}{2}x_{3} - \frac{1}{2}x_{4},$$

$$x_{1} = 3 - \frac{3}{2}x_{3} + \frac{1}{2}x_{4},$$

$$x_{2} = 3 + \frac{1}{2}x_{3} - \frac{1}{2}x_{4},$$

$$x_{5} = 1 + \frac{5}{2}x_{3} - \frac{1}{2}x_{4}.$$
(2.150)

以上より、最適解 $(x_1,x_2)=(3,3)$ と最適値 $z_P=9$ が求められる.一方で,この線形計画問題の双対問題は

最大化
$$-6y_1 - 12y_2 - 10y_3$$

条件 $y_1 + y_2 + 2y_3 - s_1 = 1,$
 $y_1 + 3y_2 + y_3 - s_2 = 2,$
 $y_1 - s_3 = 0,$
 $y_2 - s_4 = 0,$
 $y_3 - s_5 = 0$ (2.151)

となる. ここで、 s_1, s_2, s_3, s_4, s_5 は制約条件を等式に変形するために導入したスラック

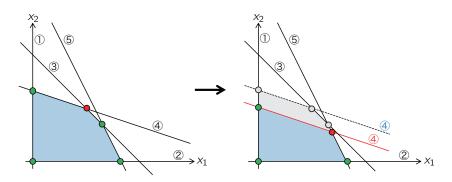


図 2.20 制約条件に変更を加えた線形計画問題の例

変数である. この双対問題から変数 y_1, y_2, y_3 を消去すると初期の辞書が得られる.

$$z_D = -6s_3 - 12s_4 - 10s_5,$$

$$s_1 = -1 + s_3 + s_4 + 2s_5,$$

$$s_2 = -2 + s_3 + 3s_4 + s_5.$$
(2.152)

また、主問題の最適な辞書 (2.150) を転置すると以下のように双対問題の最適な辞書が得られる.

$$z_D = -9 - 3s_1 - 3s_2 - s_5,$$

$$s_3 = \frac{1}{2} + \frac{3}{2}s_1 - \frac{1}{2}s_2 - \frac{5}{2}s_5,$$

$$s_4 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}s_1 + \frac{1}{2}s_2 + \frac{1}{2}s_5.$$
(2.153)

図 2.20 に示すように,主問題の制約条件 ④ の右辺の定数を 12 から 9 に変更した問題の最適解を求めよう.主問題の制約条件 ④ の右辺の定数を 12 から 9 に変更すると,双対問題に対する初期の辞書の目的関数は $z_D=-6s_3-9s_4-10s_5$ と変更される.双対問題の最適な辞書の目的関数を $z_D=-6s_3-9s_4-10s_5$ に置き換えた後に,非基底変数のみを用いた形で書き直すと

$$z_D = -6(\frac{1}{2} + \frac{3}{2}s_1 - \frac{1}{2}s_2 - \frac{5}{2}s_5) - 9(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}s_1 + \frac{1}{2}s_2 + \frac{1}{2}s_5) - 10s_5$$

$$= -\frac{15}{2} - \frac{9}{2}s_1 - \frac{3}{2}s_2 + \frac{1}{2}s_5$$
(2.154)

となる.目的関数 z_D における変数 s_5 の係数は正なので,変数 s_5 の値を増加すれば目的関数 z_D の値を改善できる.そこで, $s_1=s_2=0$ を保ちつつ s_5 の値を増加すると基底変数と目的関数の値は

$$z_D = -\frac{15}{2} + \frac{1}{2}s_5,$$

$$s_3 = \frac{1}{2} - \frac{5}{2}s_5,$$

$$s_4 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}s_5$$
(2.155)

となる. 変数 s_3, s_4 は非負制約を満たす必要があるので、変数 s_5 の値は $\frac{1}{5}$ までしか増加できないことが分かる. $s_5=\frac{1}{5}$ にすると同時に $s_3=0$ となり、基底変数 s_3 と非基底変数 s_5 を入替えると以下の辞書が得られる.

$$z_D = -\frac{37}{5} - \frac{21}{5}s_1 - \frac{8}{5}s_2 - \frac{1}{5}s_3,$$

$$s_5 = \frac{1}{5} + \frac{3}{5}s_1 - \frac{1}{5}s_2 - \frac{2}{5}s_3,$$

$$s_4 = \frac{3}{5} - \frac{1}{5}s_1 + \frac{2}{5}s_2 - \frac{1}{5}s_3.$$
(2.156)

更新した辞書では,目的関数 z_D の変数 s_1, s_2, s_3 の係数はいずれも 0 以下なので,それらの値を増加しても目的関数 z_D の値を改善できない.したがって,この基底解は変更された双対問題の最適解であると分かる.

この辞書を転置すると以下のように主問題の最適な辞書が得られる.

$$z_{P} = \frac{37}{5} - \frac{1}{5}x_{5} - \frac{3}{5}x_{4},$$

$$x_{1} = \frac{21}{5} - \frac{3}{5}x_{5} + \frac{1}{5}x_{4},$$

$$x_{2} = \frac{8}{5} + \frac{1}{5}x_{5} - \frac{2}{5}x_{4},$$

$$x_{3} = \frac{1}{5} + \frac{2}{5}x_{5} + \frac{1}{5}x_{4}.$$
(2.157)

以上より,変更後の問題に対する最適解 $(x_1,x_2)=(\frac{21}{5},\frac{8}{5})$ と最適値 $z_P=\frac{37}{5}$ が求められる.

最後に,双対単体法と前節で紹介した相補性条件 (2.126) の関係について説明する. 以下の主問題 (P) と双対問題 (D) を考える.

(P) 最大化
$$c^{\top}x$$
 (D) 最小化 $b^{\top}y$ 条件 $Ax = b$, 条件 $A^{\top}y - s = c$, (2.158) $x \ge 0$.

このとき、主問題 (P) の実行可能解 x と双対問題 (D) の実行可能解 y の目的関数値の差は、

$$z_D - z_P = \boldsymbol{b}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{y} - \boldsymbol{c}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{y} - (\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{y} - \boldsymbol{s})^{\mathsf{T}} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{s}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{x}$$
(2.159)

となる. これを双対ギャップ (duality gap) と呼ぶ. したがって、主問題 (P) の最適解を x^* 、双対問題 (D) の最適解を y^* とすると、線形計画問題の最適性の条件は以下のように表せる.

$$Ax^* = b,$$
 $x^* \ge 0,$
 $A^{\top}y^* - s^* = c,$ $s^* \ge 0,$ (2.160)
 $(s^*)^{\top}x^* = 0.$

ここで、1 行目の条件が主問題 (P) の制約条件、2 行目の条件が双対問題 (D) の制約条件、3 行目の条件が相補性条件 (2.126) を表す。 すなわち、相補性条件 (2.126) は最適解の組 (x^*,y^*) において双対ギャップが 0 となることを表す。

表 2.2 に示すように、線形計画問題の最適性の条件からアルゴリズムを分類できる. 2.2 節で紹介した単体法は、主問題 (P) の制約条件と相補性条件を満たしつつ、双対問題 (D) の制約条件を満たす解を探索するアルゴリズムであると解釈できる. 一方で、双対単体法は、双対問題 (D) の制約条件と相補性条件を満たしつつ、主問題 (P) の制約条件を満たす解を探索するアルゴリズムであると解釈できる. また、3.3.7 節で紹介する内点法は、主問題 (P) の制約条件と双対問題 (D) の制約条件を満たしつつ、相補性条件を満たす解を探索するアルゴリズムであると解釈できる.

2.4 まとめ **59**

	主問題	双対問題	
	制約条件	制約条件	相補性条件
単体法		_	
双対単体法	_	$\sqrt{}$	$\sqrt{}$
内点法	$\sqrt{}$	$\sqrt{}$	_

表 2.2 線形計画問題の最適性の条件とアルゴリズムの関係

2.4 まとめ

線形計画問題の性質 線形計画問題では,実行可能領域は空間内の凸多面体になる.また,最適解が存在するならば,少なくとも1つの最適解は実行可能領域の凸多面体の頂点上にある.

単体法 実行可能領域の凸多面体のある頂点から出発し、目的関数の値が改善する隣接頂 点への移動を繰り返すことで最適解を求めるアルゴリズム.

2 段階単体法 第 1 段階で実行可能解を 1 つ求める補助問題を解き、元の問題の実行可能 基底解が求められれば、第 2 段階でそれを初期解として元の問題を解く.

双対問題 最大化問題ならばその最適値の良い上界を求める,最小化問題ならばその最適値の良い下界を求める問題.

双対定理 線形計画問題に最適解が存在すれば、その双対問題にも最適解が存在し、それらの最適値は一致する.

感度分析 入力データの変化にともなう最適解の変化を分析する.

双対単体法 双対問題の制約条件と相補性条件を満たしつつ, 主問題の制約条件を満たす解を探索する単体法のバリエーション.

2.5 文献ノート

線形計画法に関する書籍として、例えば、以下の3冊が挙げられる.

- V. Chvátal, *Linear Programming*, W. H. Freeman and Company, 1983. (阪田 省二郎, 藤野和建, 田口東(訳), 線形計画法(上・下), 啓学出版, 1986, 1988.)
- 今野浩, 線形計画法, 日科技連, 1987.
- 並木誠, 線形計画法, 朝倉書店, 2008.

本書では紹介しなかった内点法に関する書籍として、例えば、以下の1冊が挙げられる.線形計画問題だけではなく、半正定値計画問題を始めとするより一般的な連続最適 化問題が紹介されている. 60 第 2 章 線形計画

• 小島政和, 土谷隆, 水野真治, 矢部博, 内点法, 朝倉書店, 2001.

2.6 演習問題

演習問題 2-1*30

ある肉詰工場では、毎日、豚のもも肉を 480 単位、豚のバラ肉を 400 単位、豚の肩肉を 230 単位製造している. これらの製品はいずれも生肉もしくは燻製として販売される. 通常勤務に燻製できる豚のもも肉、バラ肉、肩肉は合計で 420 単位である. さらに、より高い費用で超過勤務をすればさらに 250 単位まで燻製できる. 単位量当たりの利益は以下の通りである.

	生肉	燻製	燻製 (超過)
<u>もも肉</u>	\$8	\$14	\$11
バラ肉	\$4	\$12	\$7
肩肉	\$4	\$13	\$9

このとき,利益を最大化する1日の製造計画を求める線形計画問題を定式化せよ.

演習問題 2-2*31

ある石油精製所は,アルキレート,分解ガソリン,直留ガソリン,イソペンタンの 4 種類のガソリンを製造している.各ガソリンの 2 つの重要な特性は (耐ノック性を示す) 性能指数 PN と (揮発性を示す) 蒸気圧 RVP である.これら 2 つの特性と 1 日当たりの製造量 (バレル) は以下の通りである.

	PN	RVP	製造量
アルキレート	107.5	5.0	3800
分解ガソリン	93	8.0	2652
直留ガソリン	87	4.0	4081
イソペンタン	108	20.5	1300

これらのガソリンはそのまま 1 バレル当たり \$4.83 で売れるし、混合して航空ガソリンとしても売れる。これらの航空ガソリンは一定の条件が課せられる。それらの条件と 1 バレル当たりの売値は以下の通りである。

^{*30} J. H. Greene, K. Chatto, C. R. Hicks and C. B. Cox, Linear programming in the packing industry, *Journal of Industrial Engineering* **10** (1959), 364–372.

^{*31} A. Chanes, W. W. Cooper and B. Mellon, Blending aviation gasolines — A study in programming interdependent activities in an integrated oil company, *Econometrica* **20** (1952), 135–159.

2.6 演習問題 61

混合ガソリン	PN	RVP	売値
M	80 以上	7.0 以下	\$4.96
N	91 以上	7.0 以下	\$5.85
Q	100 以上	7.0 以下	\$6.45

混合ガソリンの PN および RVP は、その成分の PN と RVP の平均値である.このとき、売上を最大化する 1 日の製造計画を求める線形計画問題を定式化せよ.

演習問題 2-3

次の最適化問題を標準形の線形計画問題に変形せよ.

(1)
最小化
$$16x_1 + 2x_2 - 3x_3$$

条件 $x_1 - 6x_2 \ge 4$,
 $3x_2 + 7x_3 \le -5$,
 $x_1 + x_2 + x_3 = 10$,
 $x_1, x_2, x_3 \ge 0$.

(2) 最大化
$$5x_1 + 6x_2 + 3x_3$$
 条件 $|x_1 - x_3| \le 10$, $10x_1 + 7x_2 + 4x_3 \le 50$, $2x_1 - 11x_3 \ge 15$, $x_1, x_3 \ge 0$.

演習問題 2-4

次の線形計画問題を単体法で解け.

(1) 最大化
$$4x_1 + 8x_2 + 10x_3$$
 条件 $x_1 + x_2 + x_3 \le 20$, $3x_1 + 4x_2 + 6x_3 \le 100$, $4x_1 + 5x_2 + 3x_3 \le 100$, $x_1, x_2, x_3 \ge 0$.

最大化
$$x_1 + 3x_2 - x_3$$

条件 $2x_1 + 2x_2 - x_3 \le 10$,
 $3x_1 - 2x_2 + x_3 \le 10$,
 $x_1 - 3x_2 + x_3 \le 10$,
 $x_1, x_2, x_3 \ge 0$.

(3)
最大化
$$10x_1 + x_2$$

条件 $x_1 \le 1$,
 $20x_1 + x_2 \le 100$,
 $x_1, x_2 \ge 0$.

演習問題 2-5

次の線形計画問題を2段階単体法で解け.

(1) 最小化
$$2x_1 + 3x_2 + x_3$$
 条件 $x_1 + 4x_2 + 2x_2 \ge 8$, $3x_1 + 2x_2 \ge 6$, $x_1, x_2 \ge 0$.

(2) 最大化
$$x_1 - x_2 + x_3$$
 条件 $2x_1 - x_2 + 2x_3 \le 4$, $2x_1 - 3x_2 + x_3 \le -5$, $-x_1 + x_2 - 2x_3 \le -1$, $x_1, x_2, x_3 \ge 0$.

(3)
最大化
$$4x_1 + 5x_2 + 3x_3$$

条件 $x_1 + x_2 + 2x_3 \ge 20$,
 $15x_1 + 6x_2 - 5x_3 \le 50$,
 $x_1 + 3x_2 + 5x_3 \le 30$,
 $x_1, x_2, x_3 \ge 0$.

演習問題 2-6

次の線形計画問題の双対問題を示せ.

(1) 最小化
$$4x_1 + 2x_2 - x_3$$
 条件 $x_1 + 2x_2 \le 6$, $x_1 - x_2 + 2x_3 = 8$, $x_1, x_2 \ge 0$.

(2) 最大化
$$2x_1 + x_2$$
 条件 $x_1 + x_2 = 2$, $2x_1 - x_2 \ge 3$, $x_1 - x_2 \le 1$, $x_1 \ge 0$.

2.6 演習問題 63

演習問題 2-7

次の線形計画問題を解け.

最大化
$$\sum_{j=1}^{n} c_j x_j$$
条件
$$\sum_{j=1}^{n} a_j x_j \le b,$$

$$x_j \ge 0, \qquad j = 1, \dots, n.$$

ここで, $a_j > 0$, $c_j > 0$ (j = 1, ..., n), b > 0 である.

演習問題 2-8

行列 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ とベクトル $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ が与えられる. このとき、定理 1 (弱双対定理) を用いて、次のいずれか一方の条件のみが成り立つことを示せ.

- (1) $Ax = b, x \ge 0$ を満たす解 $x \in \mathbb{R}^n$ が存在する.
- (2) $\mathbf{A}^{\top} \mathbf{y} \geq \mathbf{0}$, $\mathbf{b}^{\top} \mathbf{y} < 0$ を満たす解 $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{m}$ が存在する.

この定理はファルカスの補題 (Farkas' lemma) と呼ぶ、ファルカスの補題のように、2 つの条件のいずれか一方のみが成り立つ定理は二者択一の定理 (theorem of the alternative) と呼び、いくつかのバリエーションが知られている。

演習問題 2-9

ファルカスの補題を用いて定理 2 (強双対定理)を示せ.