

数理計画法

担当： 武田朗子（統計数理研究所，atakeda@ism.ac.jp）

【講義のねらい】

数理計画法に関する基礎的な知識を習得することを目的としている。講義の内容は、大きく「線形計画法」「非線形計画法」「組合せ最適化」の3つに分かれている。それぞれの分野において、典型的な手法について学ぶ。

【講義計画】

1. 最適化モデル
2. 線形計画法
3. 凸解析と凸計画
4. 非線形計画法
5. ネットワーク計画法
6. 整数計画法
7. 確率を用いた OR モデル：待ち行列と在庫管理

本資料は 2007 年度の東京工業大学理学部情報科学科 計画数学第 1 の資料を改編の上使用しています。

【参考書等】

- 田村明久，村松正和著「最適化法」，共立出版。
- 刀根薰著「数理計画」，朝倉書店。
- 福島雅夫著「非線形最適化の基礎」，朝倉書店。
- 森雅夫，松井知己著「オペレーションズ・リサーチ」，朝倉書店。
- 今野浩，後藤順哉著「意思決定のための数理モデル入門」，朝倉書店。

1 線形計画法

1.1 線形計画問題とは

線形不等式系と線形関数が与えられたとき，線形不等式系を満たす解の集合の中で，与えられた線形関数を最大化（最小化）するものを見つける問題である。典型的な線形計画問題は以下のように記述される。

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \\ & \text{subject to} && a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n = b_i \quad (i = 1, \dots, k), \\ & && a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n \leq b_i \quad (i = k+1, \dots, k'), \\ & && a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n \geq b_i \quad (i = k'+1, \dots, m). \end{aligned}$$

ここで，関数 $c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n$ は目的関数（objective function）と呼ばれる。制約条件を満たす解を実行可能解，そのような解で作られる領域を実行可能領域と呼ぶ。また，実行可能解の中で目的関数を最大化（最小化問題では最小化）するものは，最適解（optimal solution）と呼ばれる。

解こうとする線形計画問題を基準形（canonical form）と呼ばれる扱いやすい形のものに限定する。基準形の線形計画問題は，次のような形：

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \\ & \text{subject to} && a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n \leq b_i \quad (i = 1, \dots, m) \\ & && x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_n \geq 0 \end{aligned} \tag{1}$$

で表現され，

- 最大化問題になっている
- すべての変数 x_1, x_2, \dots, x_n に非負制約がある
- 非負制約以外はすべて片方向（ \leq ）の不等式制約式であり，等式制約式は含まない

といった特徴がある。一般的な線形計画問題は，式の同値変形や変数変換により，簡単に基準形の問題に変換できるので，理論上は基準形の問題だけを扱えば十分である。

利益が最大となる生産量の組合せを求める生産計画問題を考える。3種の原料 A,B,C を原材料として，製品 Q,R の2種類の製品を生産している。各製品 1 単位生産することによって得られる収益と，1 単位生産するために必要な原料量が下表のように与えられている。原料の 1 日あたりの最大供給量が表の右列のように制限されているとして，総収益を最大にするような各製品の 1 日あたりの生産量を決定せよ。

	(トン / 単位) 製品 Q	(トン / 単位) 製品 R	(トン / 日) 最大供給量
原料 A	1	1	4
原料 B	2	0	5
原料 C	2	1	7
収益 (百万円 / 単位)	3	2	

各製品(製品Q, 製品R)の生産量をそれぞれ x_1, x_2 単位と置くことにする。利益を最大にする問題は、次のような線形計画問題として定式化できる。

$$\begin{aligned}
 & \max_{x_1, x_2} && 3x_1 + 2x_2 \\
 & \text{subject to} && x_1 + x_2 \leq 4 \\
 & && 2x_1 \leq 5 \\
 & && 2x_1 + x_2 \leq 7 \\
 & && x_1 \geq 0, x_2 \geq 0
 \end{aligned} \tag{2}$$

演習問題 1. x_1-x_2 平面上で実行可能領域を示せ。また、最適解を図示せよ。

これから紹介する単体法を適用するためには、基準形の線形計画問題を標準形(Standard Form)と呼ばれる問題：

$$\begin{aligned}
 & \text{maximize} && c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \\
 & \text{subject to} && a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n = b_i \quad (i = 1, \dots, m) \\
 & && x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_n \geq 0
 \end{aligned}$$

に変換する。

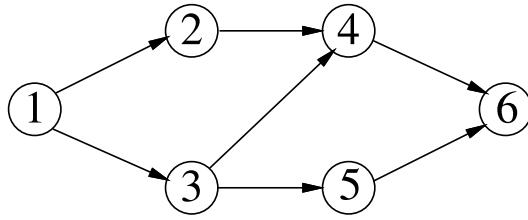
演習問題 2. (輸送問題) LPとして定式化しなさい。

ある製造業社は、 A_1, A_2, A_3 の三つの工場で製品を製造し、それを三つの取引先 B_1, B_2, B_3, B_4 に納入している。これらの工場ではそれぞれ 90、80、100 単位ずつ製造している。各取引先からの注文量はそれぞれ 70、40、60、50 である。各工場と各取引先間の輸送費(ドル/単位)は下表のように与えられているとして、費用を最小にする輸送計画を立てよ。

	B_1	B_2	B_3	B_4
A_1	4	7	1 2	1 0
A_2	1 6	6	1 3	1 5
A_3	1 0	7	1 4	1 3

演習問題 3. (日程計画問題) LPとして定式化しなさい。

図はある工事の作業の流れを示したものである。例えば、作業4は作業2と3が終了するまで開始できないことを意味する。この工事は T 日以内で終らせねばならず、各作業 i は t_i 日かかる。すべての作業に t_i 日かかると、 T 日以内で終わらない。しかし臨時作業員を雇うことにより、各作業 i に対して s_i 日(ただし $s_i < t_i$)まで作業日数を減らせる。このとき、1日減らすのに m_i 万円かかる。費用最小で期限内に工事を終わらせるためには、どの作業に何日割り当てるべきか。



1.2 単体法（シンプレックス法）

線形計画問題の実行可能領域は多面体をつくる。多面体内の点で目的関数を最大にする点を見つければ、その点が最適解に対応している。目的関数は線形だから、その実行可能領域の端点で最大値（もしくは最小値）が達成される。辺や多面体の面で最大値が達成される場合もあるが、その場合には端点においても最大値が達成されることに注意したい。

よって、線形計画問題(1)では、実行可能領域の端点で最も目的関数値が大きいものを探せばそれが最適解となる。しかし、実行可能領域の端点の個数が次元数($n+m$)と制約式数(m)によって組み合わせ的に（高々, $n+mC_m$ ）増加するため、全ての端点を計算し、その中で最も大きいものを探すのは不可能である。そこで、端点を効率良く見つける方法が単体法（シンプレックス法）である。単体法は、目的関数が大きくなるように実行可能領域の端点を辿りながら最適解に到達する方法である。与えられた問題が次の条件:

- 基準形である
- (1) の右辺の定数 b_i がすべて非負である

を満たしていれば、自明な実行可能解から出発し、解を単調に改善していくことができる。

問題(2)を単体法で解くため、スラック変数と呼ばれる変数 x_3, x_4, x_5 を各不等号制約式に導入し、問題を

$$\begin{aligned}
 & \max_{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5} && 3x_1 + 2x_2 \\
 \text{subject to } & x_3 = 4 - x_1 - x_2 \\
 & x_4 = 5 - 2x_1 \\
 & x_5 = 7 - 2x_1 - x_2 \\
 & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0, x_4 \geq 0, x_5 \geq 0
 \end{aligned} \tag{3}$$

と書き直す。問題(2)と問題(3)の間には、目的関数の値を保存するような実行可能解の1対1対応があり、同値な問題と考えることができる。

(3)の左辺に現われる変数を基底変数、右辺の変数を非基底変数と呼ぶ。非基底変数 x_1, x_2 の値を任意に定めると、すべての等式を満足させるよう残りの変数（つまり基底変数 x_3, x_4, x_5 ）の値が一意に定まる。とくに非基底変数を0に固定して得られる解：

$$(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = (0, 0, 4, 5, 7)$$

を基底解と呼ぶ。以下では(3)を、 x_3, x_4, x_5 を基底変数とし、 x_1, x_2 を非基底変数とする辞書と呼び、目的関数値を表わす変数 z を導入して、もう少し簡潔に以下の形で辞書を表現する：

$$\begin{array}{rcl}
 z & = & 3x_1 + 2x_2 \\
 x_3 & = & 4 - x_1 - x_2 \\
 x_4 & = & 5 - 2x_1 \\
 x_5 & = & 7 - 2x_1 - x_2
 \end{array} \tag{4}$$

次のルールのもとでこの基底解の改善を図ることにする .

- (i) 非基底変数の中で目的関数の係数が正であるものを 1 つ選ぶ (x_i とする) . 正のものが無ければ終了 .
- (ii) x_i の値を , 他の変数が負にならないようにギリギリまで増加させる . すると , 基底変数の中で 0 になったものがあるはず (x_j とする) .
- (iii) x_i を基底変数 , x_j を非基底変数とみなした新しい辞書をつくる .

[サイクル 1]

(4) の式 z に含まれる変数の係数はどれも正だから , どの変数を増やしても z の値は増加する . x_1 を選び , $x_2 = 0$ を固定して x_1 の値を増加させる . (4) より

$$\begin{array}{rcl} x_3 & = & 4 - x_1 \\ x_4 & = & 5 - 2x_1 \\ x_5 & = & 7 - 2x_1 \end{array}$$

となるが , $x_3, x_4, x_5 \geq 0$ なので解の実行可能性を維持するためには x_1 の値は高々

$$\min\{4, 2.5, 3.5\} = 2.5$$

までしか大きくならない . この計算を比の計算 (ratio test) と呼ぶ .

(4) で $x_1 = 2.5$ とすれば $x_4 = 0$ となり , 非基底変数 x_1 は基底変数に , 基底変数 x_4 は非基底変数に変わり , 辞書は以下のように更新される .

$$\begin{array}{rcl} z & = & 7.5 - 1.5x_4 + 2x_2 \\ \hline x_3 & = & 1.5 + 0.5x_4 - x_2 \\ x_1 & = & 2.5 - 0.5x_4 \\ x_5 & = & 2 + x_4 - x_2 \end{array} \tag{5}$$

(4) から (5) を得る手続きを、2 行 1 列 (略して (2,1)) を中心とするピボット操作 (pivot operation) という .

[サイクル 2]

演習問題 4. (5) に対してピボット操作を行いなさい . (必要であれば、アルゴリズム 1.1 を参考のこと)

演習問題 5. 単体法において基底解 (x_1, x_2) の値がどのように変化したかを , 演習問題 1 の図に示せ .

入 力: 実行可能な辞書:

$$\begin{array}{ccccccccc} z & = & c_0 & + & c_1 x_{N(1)} & + & c_2 x_{N(2)} & + & \cdots + & c_n x_{N(n)} \\ x_{B(1)} & = & b_1 & - & a_{11} x_{N(1)} & - & a_{12} x_{N(2)} & - & \cdots - & a_{1n} x_{N(n)} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ x_{B(m)} & = & b_m & - & a_{m1} x_{N(1)} & - & a_{m2} x_{N(2)} & - & \cdots - & a_{mn} x_{N(n)} \end{array} \quad (7)$$

ただし、 $N(1) = 1, \dots, N(n) = n, B(1) = n+1, \dots, B(m) = n+m$.

Step1: (最適性判定)

- $c_s > 0$ となる添字 s ($1 \leq s \leq n$) を 1 つ選ぶ .
- もし , そのような添字 s がなければ終了 (現在の基底解は最適解である) .

Step2: (非有界性判定)

- 今の基底解から実行可能性を保ったまま非基底変数 $x_{N(s)}$ だけを出来る限り増加させる .
つまり ,

$$b_r/a_{rs} = \min\{b_i/a_{is} : a_{is} > 0, 1 \leq i \leq m\}, \quad a_{rs} > 0$$

を満たす任意の行番号 r を求める .

- そのような r がなければ終了 (すなわち , 全ての $1 \leq i \leq m$ について $a_{is} \leq 0$ であり , 变数 $x_{N(s)}$ を限りなく増加できるので , 与えられた問題は非有界) .
- 存在する場合は、 (r, s) を中心とするピボット操作を行ない , Step1 へもどる .

得られた辞書を新たに (7) とおく . Step1 へもどる .

演習問題 6. アルゴリズム 1.1 の Step1 に記された , 単体法の最適性判定の条件を書きなさい . また , その正当性を説明しなさい .

演習問題 7. 基底解が一意の最適解であるための十分条件を示しなさい . (ヒント : 単体法の最適性判定の条件を強めることによって得られる)

演習問題 8. アルゴリズム 1.1 の Step2 に記された , 単体法の非有界性判定の条件を書きなさい . また , その正当性を説明しなさい .

演習問題 9. 次の LP をシンプレックス法で解きなさい .

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && 3x_1 + 2x_2 \\ & \text{subject to} && -2x_1 + x_2 \leq 1 \\ & && x_1 - x_2 \leq 2 \\ & && -x_1 + x_2 \leq 3 \\ & && x_1, x_2 \geq 0. \end{aligned}$$

1.3 単体法の反復回数

一般に単体法(アルゴリズム 1.1)では、ピボット列の選択(Step1 の添字 s の選び方)に多くの自由度がある。そして、実際に線形計画問題を単体法で解く場合、その選択の仕方が収束するまでにかかる総ピボット数に強く影響をおよぼすことが知られている。以下の 2 つが最も代表的なものである。

最大係数規則： 単体法 Step1において、 $c_s > 0$ なる列番号 s が複数個あれば、その中で係数 c_s が最も大きなものを選ぶ。

最大改善規則： 単体法 Step1において、 $c_s > 0$ なる列番号 s が複数個あれば、その中で $c_s \times r_s$ の最も大きなものを選ぶ。ここで、

$$r_s = \min\{b_i/a_{is} : a_{is} > 0, 1 \leq i \leq m\}$$

単体法の有限回収束性を導くために最小添字規則(Bland のピボット選択規則)が重要な役割を果たすが、最も収束の遅い規則であることが分かっている。結論として、現在のところ最大係数規則が平均的な振舞いにおいて最も良い(無難な)規則であるといって良いだろう。

次節 1.4 で記すように、Bland のピボット選択規則を用いた単体法は、必ず有限回の反復で終了することが示せる。これは凸多面体の端点が有限個しか存在しないことを根拠にしているが、それでは単体法の反復回数は実際にはどの程度の大きさになるのだろうか。

ここで、単体法にとって最も都合の悪い問題である Klee-Minty の問題を紹介する：

$$\begin{aligned} & \text{maximize} \quad \sum_{j=1}^n 10^{n-j} x_j \\ & \text{subject to} \quad 2 \sum_{j=1}^{i-1} 10^{i-j} x_j + x_i \leq 100^{i-1}, \quad i = 1, \dots, n \\ & \quad x_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, n \end{aligned}$$

この問題の実行可能領域は、 n 次元空間の単位立方体を巧妙に歪ませて作ったもので、単位立方体と同様に 2^n 個の端点を持っているが、原点を出発して単体法(最大係数規則)を適用すると、最適解が得られるまでに $2^n - 1$ 回の反復が必要になる。これは、運が悪ければ、単体法ではすべての端点が生成される可能性があることを示している。

$n = 3$ のケースを考えてみる：

$$\begin{aligned} & \text{maximize} \quad 100x_1 + 10x_2 + x_3 \\ & \text{subject to} \quad \begin{array}{rcl} x_1 & \leq & 1 \\ 20x_1 + x_2 & \leq & 100 \\ 200x_1 + 20x_2 + x_3 & \leq & 10000 \\ x_1, x_2, x_3 & \geq & 0 \end{array} \end{aligned}$$

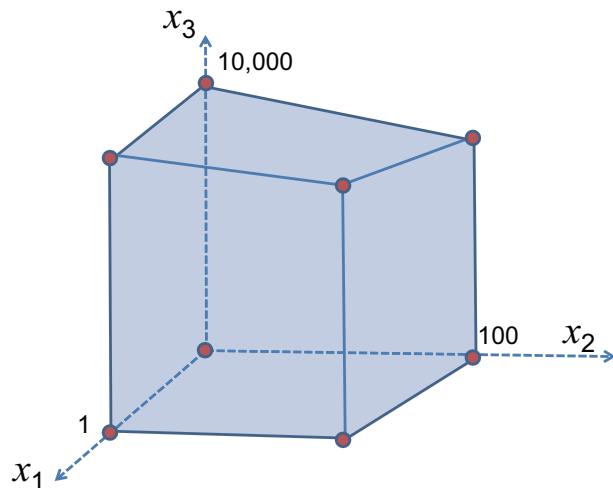
演習問題 10. $n = 3$ の Klee-Minty の問題は 8 個の端点を持ち、単体法(最大係数規則)を適用すると、7 反復かかる。下の辞書の空白を埋めなさい。また、基底解がどのように変化したかを、下図に示しなさい。

$$\begin{array}{rccccc}
 z & = & 100x_1 & +10x_2 & +x_3 \\
 \hline
 x_4 & = & 1 & -\boxed{x_1} & & \\
 x_5 & = & 100 & -20x_1 & -x_2 & \\
 x_6 & = & 10000 & -200x_1 & -20x_2 & -x_3
 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{rccccc}
 z & = & 100 & -100x_4 & +10x_2 & +x_3 \\
 \hline
 x_1 & = & 1 & -x_4 & & \\
 x_5 & = & 80 & +20x_4 & -\boxed{x_2} & \\
 x_6 & = & 9800 & +200x_4 & -20x_2 & -x_3
 \end{array}$$

$$\Rightarrow \begin{array}{rccccc}
 z & = & 900 & +100x_4 & -10x_5 & +x_3 \\
 \hline
 x_1 & = & 1 & -\boxed{x_4} & & \\
 x_2 & = & 80 & +20x_4 & -x_5 & \\
 x_6 & = & 8200 & -200x_4 & +20x_5 & -x_3
 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{rccccc}
 z & = & 1000 & -100x_1 & -10x_5 & +x_3 \\
 \hline
 x_4 & = & 1 & -x_1 & & \\
 x_2 & = & 100 & -20x_1 & -x_5 & \\
 x_6 & = & 8000 & +200x_1 & +20x_5 & -\boxed{x_3}
 \end{array}$$

$$\Rightarrow \begin{array}{rccccc}
 z & = & 9000 & +100x_1 & +10x_5 & -x_6 \\
 \hline
 x_4 & = & 1 & -\boxed{x_1} & & \\
 x_2 & = & 100 & -20x_1 & -x_5 & \\
 x_3 & = & 8000 & +200x_1 & +20x_5 & -x_6
 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{rccccc}
 z & = & 9100 & -100x_4 & +10x_5 & -x_6 \\
 \hline
 x_1 & = & 1 & -x_4 & & \\
 x_2 & = & 80 & +20x_4 & -\boxed{x_5} & \\
 x_3 & = & 8200 & -200x_4 & +20x_5 & -x_6
 \end{array}$$

$$\Rightarrow \begin{array}{rccccc}
 z & = & \underline{\quad} & +100x_4 & -10x_2 & -x_6 \\
 \hline
 x_1 & = & \underline{\quad} & -x_4 & & \\
 x_5 & = & \underline{\quad} & +20x_4 & -x_2 & \\
 x_3 & = & \underline{\quad} & +200x_4 & -20x_2 & -x_6
 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{rccccc}
 z & = & \underline{\quad} & -100x_1 & -10x_2 & -x_6 \\
 \hline
 x_4 & = & \underline{\quad} & -x_1 & & \\
 x_5 & = & \underline{\quad} & -20x_1 & -x_2 & \\
 x_3 & = & \underline{\quad} & -200x_1 & -20x_2 & -x_6
 \end{array}$$



1.4 有限回収束の保証 : B l a n d のピボット選択規則

今まで、実行可能辞書をもつ基底形式の LP に対して（1）現在の実行可能解が最適解であることが認識されるか（2）LP の非有界性が判定されるまで、その辞書を繰り返し更新する方法があることを学んだ。しかし、これだけでは LP が解けたとは言えない。すなわち

- (a) 収束性の問題：単体法が有限回で終わる保証がない；
 - (b) 初期化の問題：任意の基底形式の LP について、どのように実行可能辞書を得るか；
- という 2 つの技術的に重要な問題点が残されている。

まず (a) に関しては有限回で終わらない例を示し、そのような現象（サイクリングと呼ばれる）が起きることを防ぐ 1 つの方法（B l a n d のピボット選択規則）を説明する。また (b) については、与えられた LP に変数を 1 つ付け加えた実行可能辞書をもつ LP を定義し、これを解くことにより元問題の実行可能辞書が（存在すれば）求められることを示す。

次のような基底形式の LP を考える：

例 1.1.

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & x_1 - 2x_2 + x_3 \\ \text{subject to} \quad & 2x_1 - x_2 + x_3 \leq 0 \\ & 3x_1 + x_2 + x_3 \leq 0 \\ & -5x_1 + 3x_2 - 2x_3 \leq 0 \\ & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0 \end{aligned}$$

この問題を解くには、まずスラック変数を導入して辞書を作る。

$$\begin{array}{rcl} x_4 & = & 0 - 2x_1 + x_2 - x_3 \\ x_5 & = & 0 - 3x_1 - x_2 - x_3 \\ x_6 & = & 0 + 5x_1 - 3x_2 + 2x_3 \\ \hline z & = & 0 + x_1 - 2x_2 + x_3 \end{array} \tag{8}$$

0 は非負の値だから、この辞書は実行可能である。よって 1.2 章で学んだ単体法 (6) が適用できる。ここでは 2 行を選び (2, 1)を中心としてピボット演算してみる。

$$\begin{array}{rcl} x_4 & = & 0 + 2/3x_5 + 5/3x_2 - 1/3x_3 \\ x_1 & = & 0 - 1/3x_5 - 1/3x_2 - 1/3x_3 \\ x_6 & = & 0 - 5/3x_5 - 14/3x_2 + 1/3x_3 \\ \hline z & = & 0 - 1/3x_5 - 7/3x_2 + 2/3x_3 \end{array}$$

基底変数は変化したが基底解は原点 (= 0) から全く動いていない。一般に、右辺の定数 b_i が 0 の行で行なうピボット演算を退化している (degenerate) と呼ぶ。

- ピボット演算が退化している必要十分条件は、基底解が変化しない

ことである。ついでながら、右辺に 0 の定数 b_i を少なくとも 1 つ含むとき、辞書は退化している (degenerate) という。

もしも単体法が有限回で終わらないとすると、それはどのような状況だろうか。一般に、

- 同じ基底変数集合をもつ辞書は一意に定まる；

- 単体法においてピボットが退化していなければ、目的関数値は必ず増加する；

ことを考え合わせると、単体法が収束しない時には何回かピボット演算の後に同じ辞書が現われ、そのなかで使われたピボット演算はすべて退化しているはずである。そして、このサイクリングまたは巡回 (cycling) と呼ばれる現象は起こりえることが知られている。

実際、上の例で次のように単体法でピボット演算をあと 5 回続けると最初の辞書 (8) に再び戻つことになる：

$$\begin{array}{rcl} x_3 & = & 0 + 2x_5 + 5x_2 - 3x_4 \\ x_1 & = & 0 - x_5 - 2x_2 + x_4 \\ x_6 & = & 0 - x_5 - 3x_2 - x_4 \\ \hline z & = & 0 + x_5 + x_2 - 2x_4 \end{array}$$

$$\begin{array}{rcl} x_3 & = & 0 + 1/3x_5 - 5/3x_6 - 14/3x_4 \\ x_1 & = & 0 - 1/3x_5 + 2/3x_6 + 5/3x_4 \\ x_2 & = & 0 - 1/3x_5 - 1/3x_6 - 1/3x_4 \\ \hline z & = & 0 + 2/3x_5 - 1/3x_6 - 7/3x_4 \end{array}$$

$$\begin{array}{rcl} x_3 & = & 0 - x_1 - x_6 - 3x_4 \\ x_5 & = & 0 - 3x_1 + 2x_6 + 5x_4 \\ x_2 & = & 0 + x_1 - x_6 - 2x_4 \\ \hline z & = & 0 - 2x_1 + x_6 + x_4 \end{array}$$

$$\begin{array}{rcl} x_4 & = & 0 - 1/3x_1 - 1/3x_6 - 1/3x_3 \\ x_5 & = & 0 - 14/3x_1 + 1/3x_6 - 5/3x_3 \\ x_2 & = & 0 + 5/3x_1 - 1/3x_6 + 2/3x_3 \\ \hline z & = & 0 - 7/3x_1 + 2/3x_6 - 1/3x_3 \end{array}$$

$$\begin{array}{rcl} x_4 & = & 0 - 2x_1 + x_2 - x_3 \\ x_5 & = & 0 - 3x_1 - x_2 - x_3 \\ x_6 & = & 0 + 5x_1 - 3x_2 + 2x_3 \\ \hline z & = & 0 + x_1 - 2x_2 + x_3 \end{array}$$

1.2 章の単体法 (6) はサイクリングの存在のため、一般には有限回の収束は保証されない。しかし、(6) におけるピボットの選択をある規則で限定することにより、単体法は常に収束することが知られている。ここでは一番簡単でエレガントな最小添字規則を紹介する。

B l a n d のピボット選択規則（または最小添字規則）

(Bland's Pivot Rule or Smallest Subscript Rule) :

1. 単体法 (6) の Step 1 でピボット列の候補 s が複数個あれば、 x の添字 $N(s)$ が最も小さなものを選ぶ；
2. 単体法 (6) の Step 2 でピボット行の候補 r が複数個あれば、 x の添字 $B(r)$ が最も小さなものを選ぶ。

定理 1.1. [B l a n d 1977] B l a n d のピボット選択規則を使えば単体法 (6) は必ず有限回で収束する .

この定理の証明は省略する . サイクリングを起こす L P [例 1.1] に適用してみる . 初期辞書 :

$$\begin{array}{rcl} x_4 & = & 0 - 2x_1 + x_2 - x_3 \\ x_5 & = & 0 - 3x_1 - x_2 - x_3 \\ x_6 & = & 0 + 5x_1 - 3x_2 + 2x_3 \\ \hline z & = & 0 + x_1 - 2x_2 + x_3 \end{array}$$

において , 最小添字規則では添字の小さい x_1 (つまりピボット列番号 $s = 1$) が選ばれる . このとき , 最小添字規則では添字の小さい x_4 (つまりピボット行番号 $r = 1$) が選ばれる (1 , 1)を中心とするピボット演算により ,

$$\begin{array}{rcl} x_1 & = & 0 - 1/2x_4 + 1/2x_2 - 1/2x_3 \\ x_5 & = & 0 + 3/2x_4 - 5/2x_2 + 1/2x_3 \\ x_6 & = & 0 - 5/2x_4 - 1/2x_2 - 1/2x_3 \\ \hline z & = & 0 - 1/2x_4 - 3/2x_2 + 1/2x_3 \end{array}$$

得られる . 次の反復では , ピボット列 = 第 3 列は一意に定まり , ピボット行は変数 x_1 に対応する第 1 行が選ばれる (行番号・列番号の大小はピボット元の選択に無関係なので注意) .

$$\begin{array}{rcl} x_3 & = & 0 - x_4 + x_2 - 2x_1 \\ x_5 & = & 0 + x_4 - 2x_2 - x_1 \\ x_6 & = & 0 - 2x_4 - x_2 + x_1 \\ \hline z & = & 0 - x_4 - x_2 - x_1 \end{array}$$

ここで最適性が満たされ終了する .

演習問題 11. 次の辞書に B l a n d のピボット選択規則を適用しなさい ($x_i \geq 0$, $i = 1, \dots, 6$) .

$$\begin{array}{rcl} x_5 & = & 6 - 2x_1 + 2x_2 \\ x_4 & = & 3 - x_1 - x_2 + 2x_3 \\ x_6 & = & 3 - x_1 - x_2 - x_3 \\ \hline z & = & 0 + x_1 - 2x_2 + x_3 \end{array}$$

1.5 初期化 : 実行可能辞書の求め方

単体法 (6) を使って , 任意の基準形の L P の実行可能辞書を求める方法を説明する .

例 1.2. $\begin{array}{lll} \text{maximize} & x_1 + x_2 - 2x_3 \\ \text{subject to} & -2x_1 + 2x_2 + x_3 \leq -4 \\ & -2x_1 - 2x_3 \leq -3 \\ & -x_1 + 2x_2 + x_3 \leq -2 \\ & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0 \end{array}$

この問題の辞書は

$$\begin{array}{rcl} x_4 & = & -4 + 2x_1 - 2x_2 - x_3 \\ x_5 & = & -3 + 2x_1 \quad \quad \quad + 2x_3 \\ x_6 & = & -2 + x_1 - 2x_2 - x_3 \\ \hline z & = & 0 + x_1 + x_2 - 2x_3 \end{array}$$

であり，明かに実行可能ではない。このような場合，新しい（人工）変数 x_a を用いて補助問題：

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & -x_a \\ \text{subject to} & \begin{array}{l} x_4 = -4 + 2x_1 - 2x_2 - x_3 + x_a \\ x_5 = -3 + 2x_1 \quad \quad \quad + 2x_3 + x_a \\ x_6 = -2 + x_1 - 2x_2 - x_3 + x_a \\ x_1, \dots, x_6 \geq 0, x_a \geq 0 \end{array} \end{array} \quad (9)$$

を作る。

元問題が実行可能である \iff (9) の最適目的関数値が 0

より，補助問題 (9) を解けば元問題の実行可能解が求められる。

(9) を解くために，辞書：

$$\begin{array}{rcl} x_4 & = & -4 + 2x_1 - 2x_2 - x_3 + x_a \\ x_5 & = & -3 + 2x_1 \quad \quad \quad + 2x_3 + x_a \\ x_6 & = & -2 + x_1 - 2x_2 - x_3 + x_a \\ \hline (z & = & 0 + x_1 + x_2 - 2x_3) \\ z_a & = & 0 \quad \quad \quad -x_a \end{array} \quad (10)$$

において最大化する目的関数は $z_a (= -x_a)$ となる（カッコ内の変数 z は元問題の目的関数）。人工変数 x_a の列でピボット演算することにより常に実行可能性を得ることができる。すなわち非基底変数のうち変数 x_a だけを増加させていく，初めて実行可能解が得られるときに変数 x_4 が 0 になる。よって，

$$\begin{array}{rcl} x_a & = & 4 - 2x_1 + 2x_2 + x_3 + x_4 \\ x_5 & = & 1 \quad \quad \quad + 2x_2 + 3x_3 + x_4 \\ x_6 & = & 2 - x_1 \quad \quad \quad + x_4 \\ \hline (z & = & 0 + x_1 + x_2 - 2x_3) \\ z_a & = & -4 + 2x_1 - 2x_2 - x_3 - x_4 \end{array} \quad (11)$$

が得られる。この辞書は実行可能であり，単体法 (6) が使える。例えば (1, 1)を中心としてピボット演算すると，

$$\begin{array}{rcl} x_1 & = & 2 - 1/2x_a + x_2 + 1/2x_3 + 1/2x_4 \\ x_5 & = & 1 \quad \quad \quad + 2x_2 + 3x_3 + x_4 \\ x_6 & = & 0 + 1/2x_a - x_2 - 1/2x_3 + 1/2x_4 \\ \hline (z & = & 2 - 1/2x_a + 2x_2 - 3/2x_3 + 1/2x_4) \\ z_a & = & 0 - x_a \end{array} \quad (12)$$

となる。人工変数が丁度 0 となり、元問題の実行可能解が得られた。さらに人工変数は非基底変数になつたため、 x_a を恒等的に 0 と置き z_a の等式を無視することで、元問題の実行可能辞書：

$$\begin{array}{rcl} x_1 & = & 2 + x_2 + 1/2x_3 + 1/2x_4 \\ x_5 & = & 1 + 2x_2 + 3x_3 + x_4 \\ x_6 & = & 0 - x_2 - 1/2x_3 + 1/2x_4 \\ \hline z & = & 2 + 2x_2 - 3/2x_3 + 1/2x_4 \end{array}$$

が得られる。人工変数が基底変数になっている場合は、どのようにしたら良いだろうか。例えば、次のような L P

$$\begin{array}{lll} \text{maximize} & x_1 + 2x_2 \\ \text{subject to} & x_1 + x_2 \leq 1 \\ & -x_1 - x_2 \leq -1 \\ & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{array}$$

に対して補助問題を解くと以下のようになる。

$$\begin{array}{rcl} x_3 & = & 1 - x_1 - x_2 + x_a \\ x_4 & = & -1 + x_1 + x_2 + x_a \\ \hline (z & = & 0 + x_1 + 2x_2) \\ z_a & = & 0 - x_a \end{array}$$

↓

$$\begin{array}{rcl} x_3 & = & 2 - 2x_1 - 2x_2 + x_4 \\ x_a & = & 1 - x_1 - x_2 + x_4 \\ \hline (z & = & 0 + x_1 + 2x_2) \\ z_a & = & -1 + x_1 + x_2 - x_4 \end{array}$$

↓

$$\begin{array}{rcl} x_1 & = & 1 - 1/2x_3 - x_2 + 1/2x_4 \\ x_a & = & 0 + 1/2x_3 + 1/2x_4 \\ \hline (z & = & 1 - 1/2x_3 + x_2 + 1/2x_4) \\ z_a & = & 0 - 1/2x_3 - 1/2x_4 \end{array}$$

このままでは、 x_a を恒等的に 0 と置いて (z_a の等式を無視して) も元問題の実行可能辞書は得られない。このような場合は、人工変数を含む等式に現れる(任意の)非基底変数でピボット演算することにより、実行可能性を保ったまま人工変数を非基底変数とすることができます。例えば、非基底変数 x_3 (または x_4) の列でピボット演算すると、人工変数を非基底変数とする実行可能辞書

$$\begin{array}{rcl} x_1 & = & 1 - x_a - x_2 + x_4 \\ x_3 & = & 0 + 2x_a - x_4 \\ \hline (z & = & 1 - x_a + x_2 + x_4) \\ z_a & = & 0 - x_a \end{array}$$

が得られる(実行可能性が保たれるのはなぜか? 演習問題 13)。

一般的に、基準形の L P に対しその実行可能辞書を得る方法は、以下のように記述される。

入 力: 基準形の L P

出 力: L P の実行可能性の判定 . もし実行可能である場合は , 実行可能辞書 .

Step1: 基準形の L P の辞書をつくる . もし実行可能ならば終了 .

それ以外の場合は人工変数 x_a を辞書の右辺に加えて補助問題 ($z_a = -x_a$ 最大化)

をつくり , 単体法 (6) で解く .

(ただし , 元問題の目的関数の等式も加え , この式についてもピボット演算は行なう) .

Step2: 補助問題の最適値が負ならば終了 (元問題は実行不可能) .

それ以外の (最適値が 0 の) 場合は (a) または (b) を実行する .

(a) 得られた辞書において人工変数 x_a が非基底変数であれば , x_a を恒等的に 0 と置き ,

z_a の等式を無視することで . 元問題の実行可能辞書を得る . 終了 .

(b) 得られた辞書において人工変数 x_a が基底変数であれば , 対応する等式の右辺に

現われる任意の変数と人工変数を入れ替えるピボット演算をする (実行可能性は保存) .

(a) を実行する .

この実行可能辞書を得る方法 (13) と単体法 (6) を組み合わせて L P を解く方法は 2 段階単体法と呼ばれる .

2 段階単体法 (Two-Phase Simplex Method)

入 力 : 基準形の L P

1 段階 (Phase I): (13) を使って実行可能辞書を求める . もし実行不可能ならば終了 .

2 段階 (Phase II): 実行可能辞書を初期辞書として (6) を使い L P を解く .

定理 1.2. 実行可能で有界な L P は最適解をもつ

1.1 章で説明したように , L P は同値な基準形の問題に書き換えることができる , この L P は基準形であると仮定できる . そして問題の実行可能性から , (13) を最小添字規則と共に適用することにより , 実行可能辞書が得られる . さらに , 問題が有界であることから , この辞書に単体法 (6) を最小添字規則と共に適用することにより , 最適解が得られる . ■

演習問題 12. 次の L P を 2 段階単体法で解け .

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & 3x_1 + 2x_2 \\ \text{subject to} \quad & -2x_1 + x_2 \leq 1 \\ & x_1 - 2x_2 \leq -4 \\ & x_1 + x_2 \leq 2 \\ & x_1, x_2 \geq 0. \end{aligned}$$

演習問題 13. 手続き (13) の Step 2 (b)において、辞書の実行可能性が保たれることを証明せよ。

1.6 双対性

線形計画法における双対性 (duality) について学ぶ。双対性は線形計画理論において核となる基本的性質であるが、実際の応用上も極めて重要である。

例 1.3.

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && 15x_1 + 20x_2 \\ & \text{subject to} && \\ & E1: && 4x_1 + 6x_2 \leq 240 \\ & E2: && 2x_1 + x_2 \leq 90 \\ & && x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

この問題の最適目的関数値を得るには、この LP を単体法で解けば良い。ここではその値がどの程度大きくなり得るかを予測してみる。

$$E3: z = 15x_1 + 20x_2$$

と置き、E1 を 4 倍する：

$$E1 \times 4 \quad 16x_1 + 24x_2 \leq 960.$$

この 2 式において、各変数 x_1, x_2 の係数を比較すると、いずれも下の式の方が大きくなっている。それぞれの変数は非負に制約されるから、任意の実行可能解 $x = (x_1, x_2)$ に対して

$$z = 15x_1 + 20x_2 \leq 960 \tag{14}$$

が成り立つことがわかる。さらに良い上界は得ることを考える。

制約条件 E1 と E2 に特定の係数をかけて足し加えるのではなく（任意の）非負線形結合：

$$(E1 \times y_1) + (E2 \times y_2) : \quad (4y_1 + 2y_2)x_1 + (6y_1 + y_2)x_2 \leq 240y_1 + 90y_2 \quad (15)$$

ただし $y_1 \geq 0, y_2 \geq 0$

を作る。この式の右辺の値が LP の上界になるためには、

$$\begin{aligned} 4y_1 + 2y_2 &\geq 15 \\ 6y_1 + y_2 &\geq 20 \end{aligned}$$

が成り立つければ良い。結局、線形計画問題・例 1.3 の上界を求める問題は、再び線形計画問題（双対問題）：

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && 240y_1 + 90y_2 \\ & \text{subject to} && \\ & && 4y_1 + 2y_2 \geq 15 \\ & && 6y_1 + y_2 \geq 20 \\ & && y_1 \geq 0, y_2 \geq 0 \end{aligned} \tag{16}$$

になることがわかる。

最適目的関数値の上界を求める問題 (16) を一般化したのが双対問題である。基準形の線形計画問題：

$$\begin{aligned}
 & \text{maximize} && c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \\
 & \text{subject to} && a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \leq b_1 \\
 & && \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
 & && a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \leq b_m \\
 & && x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_n \geq 0
 \end{aligned} \tag{17}$$

に対して、その双対問題 (dual problem) を

$$\begin{aligned}
 & \text{minimize} && b_1y_1 + b_2y_2 + \cdots + b_my_m \\
 & \text{subject to} && a_{11}y_1 + a_{21}y_2 + \cdots + a_{m1}y_m \geq c_1 \\
 & && \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
 & && a_{1n}y_1 + a_{2n}y_2 + \cdots + a_{mn}y_m \geq c_n \\
 & && y_1 \geq 0, y_2 \geq 0, \dots, y_m \geq 0
 \end{aligned} \tag{18}$$

として定義する。双対問題 (18) に対して、元問題 (17) を主問題 (primal problem) とも呼ぶ。

双対問題は簡単な変換で基準形の問題：

$$\begin{aligned}
 & \text{maximize} && -b_1y_1 - b_2y_2 - \cdots - b_my_m \\
 & \text{subject to} && -a_{11}y_1 - a_{21}y_2 - \cdots - a_{m1}y_m \leq -c_1 \\
 & && \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
 & && -a_{1n}y_1 - a_{2n}y_2 - \cdots - a_{mn}y_m \leq -c_n \\
 & && y_1 \geq 0, y_2 \geq 0, \dots, y_m \geq 0
 \end{aligned} \tag{19}$$

に書き換えられるが、さらにこの双対問題をつくると

$$\begin{aligned}
 & \text{minimize} && -c_1x_1 - c_2x_2 - \cdots - c_nx_n \\
 & \text{subject to} && -a_{11}x_1 - a_{12}x_2 - \cdots - a_{1n}x_n \geq -b_1 \\
 & && \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
 & && -a_{m1}x_1 - a_{m2}x_2 - \cdots - a_{mn}x_n \geq -b_m \\
 & && x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_n \geq 0
 \end{aligned} \tag{20}$$

となり、明かに元問題 (17) と同値な問題となる。つまり、双対問題の双対問題は主問題である。

1.6.1 双対定理

定理 1.3. (弱双対定理) 主問題 (17) と双対問題 (18) の任意の実行可能解 x, y に対して、

$$\sum c_jx_j \leq \sum b_iy_i$$

が成り立つ。

系 1.1. 主(双対)問題が非有界であれば、双対(主)問題は実行不可能である。

系 1.2. 主問題 (17) と双対問題 (18) のある実行可能解 x, y に対して , もし

$$\sum c_j x_j = \sum b_i y_i$$

が成り立てば , 実行可能解 x, y はそれぞれの問題の最適解である .

系 1.2 は LP の実行可能解が最適解であるための十分条件を与える . 次の定理は , その逆も正しいことを主張している .

定理 1.4. (双対定理) 主 (双対) 問題に最適解が存在すれば , 双対 (主) 問題にも最適解が存在し , それぞれの最適目的関数値は一致する .

この定理の証明は章の終りにまわし , ここでは双対定理から得られる重要な結果を学ぶことにする .

定理 1.5. (相補性定理) 主問題と双対問題の実行可能解 x, y がそれぞれの問題の最適解であるための必要十分条件は , 次の相補性条件が成り立つことである :

各 $j = 1, \dots, n$ について

$$x_j = 0 \quad \text{または} \quad a_{1j}y_1 + \dots + a_{mj}y_m = c_j;$$

および , 各 $i = 1, \dots, m$ について

$$a_{i1}x_1 + \dots + a_{in}x_n = b_i \quad \text{または} \quad y_i = 0.$$

Proof. 主問題と双対問題の実行可能解を x, y とする . 双対定理から , x, y が最適解であるための必要十分条件は目的関数値が一致すること :

$$\sum c_j x_j = \sum b_i y_i \tag{21}$$

である . 一方 ,

$$\begin{aligned} x_{(n+i)} &= b_i - \sum a_{ij}x_j \quad (i = 1, \dots, m) \\ y_{(m+j)} &= -c_j + \sum a_{ij}y_i \quad (j = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

と置くと ,

$$\begin{aligned} &\sum c_j x_j - \sum b_i y_i \\ &= \sum (\sum a_{ij}y_i - y_{(m+j)})x_j - \sum (\sum a_{ij}x_j + x_{(n+i)})y_i \\ &= -(\sum y_{(m+j)}x_j + \sum x_{(n+i)}y_i) \end{aligned} \tag{22}$$

となる . (21) が成り立つための必要十分条件は , (22) の右辺が 0 であるが , x, y の実行可能性から $x_j, y_i, x_{(n+i)}, y_{(m+j)}$ はすべて非負なので , この条件は

- 各 j について $x_j = 0$ または $y_{(m+j)} = 0$;
- 各 i について $x_{(n+i)} = 0$ または $y_i = 0$

と等価である . これは相補条件に他ならない .

演習問題 14. 定理 1.3 を証明せよ .

演習問題 15.

(a) 系 1.1 を証明せよ .

(b) 系 1.2 を証明せよ .

演習問題 16. 次の問題について双対問題を書きなさい .

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && -x_1 - x_2 - x_3 - x_4 \\ & \text{subject to} && 3x_1 + 5x_2 + 2x_3 - x_4 \leq 4 \\ & && -x_1 + 4x_2 + 3x_3 - 2x_4 \leq -2 \\ & && -2x_1 + 5x_2 + 4x_3 \leq -3 \\ & && 2x_1 + 3x_2 - 3x_4 \leq 2 \\ & && x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0 \end{aligned}$$

1.6.2 辞書の双対性

主問題と双対問題それぞれの辞書がどのように関連しているかを考えてみる .

例 1.4.

主問題 :

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && 15x_1 + 20x_2 \\ & \text{subject to} && 4x_1 + 6x_2 \leq 240 \\ & && 2x_1 + x_2 \leq 90 \\ & && x_1 + 2x_2 \leq 100 \\ & && x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{aligned} \tag{23}$$

双対問題 :

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && 240y_1 + 90y_2 + 100y_3 \\ & \text{subject to} && 4y_1 + 2y_2 + y_3 \geq 15 \\ & && 6y_1 + y_2 + 2y_3 \geq 20 \\ & && y_1 \geq 0, y_2 \geq 0, y_3 \geq 0 \end{aligned} \tag{24}$$

双対問題 (24) を単純な変換で基準形の問題 :

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && -240y_1 - 90y_2 - 100y_3 \\ & \text{subject to} && -4y_1 - 2y_2 - y_3 \leq -15 \\ & && -6y_1 - y_2 - 2y_3 \leq -20 \\ & && y_1 \geq 0, y_2 \geq 0, y_3 \geq 0 \end{aligned} \tag{25}$$

に書き換えることができる。主問題・双対問題それぞれにスラック変数 $\{x_3, x_4, x_5\}$, $\{y_4, y_5\}$ を導入することにより、次のような辞書を得る。

$$\begin{array}{rcl} x_3 & = & 240 - 4x_1 - 6x_2 \\ x_4 & = & 90 - 2x_1 - x_2 \\ x_5 & = & 100 - x_1 - 2x_2 \\ \hline z & = & 0 + 15x_1 + 20x_2 \end{array} \quad (26)$$

$$\begin{array}{rcl} y_4 & = & -15 + 4y_1 + 2y_2 + y_3 \\ y_5 & = & -20 + 6y_1 + y_2 + 2y_3 \\ \hline w & = & 0 - 240y_1 - 90y_2 - 100y_3 \end{array} \quad (27)$$

ここで、双対問題の変数 y_1, y_2, y_3 は主問題の 3 本の制約式に対応しているので、主問題のスラック変数 x_3, x_4, x_5 に 1 対 1 に対応していることがわかる。また同様に、主問題の変数 x_1, x_2 は双対問題のスラック変数 y_4, y_5 に 1 対 1 に対応している。つまり、

$$\begin{aligned} x_j &\Leftrightarrow y_{(m+j)} & (1 \leq j \leq n) \\ x_{(n+i)} &\Leftrightarrow y_i & (1 \leq i \leq m) \end{aligned} \quad (28)$$

なる対応がある（ここで $n = 2, m = 3$ ）。そして、

$$\begin{aligned} x_j \text{ が (k 番目の) 基底変数} &\Rightarrow \text{対応する } y_i \text{ は (k 番目の) 非基底変数} \\ x_j \text{ が (k 番目の) 非基底変数} &\Rightarrow \text{対応する } y_i \text{ は (k 番目の) 基底変数} \end{aligned} \quad (29)$$

であることにも注意。

次は、辞書 (26) と (27) の係数を比べる。辞書の行列表現を用いると、

$$\begin{array}{c|cc} & x_1 & x_2 \\ \hline x_3 & 240 & -4 -6 \\ x_4 & 90 & -2 -1 \\ x_5 & 100 & -1 -2 \\ \hline z & 0 & 15 20 \end{array} \quad (30)$$

$$\begin{array}{c|ccc} & y_1 & y_2 & y_3 \\ \hline y_4 & -15 & 4 & 2 & 1 \\ y_5 & -20 & 6 & 1 & 2 \\ \hline w & 0 & -240 & -90 & -100 \end{array} \quad (31)$$

となるが、これから明らかのように係数の対応は

$$\begin{array}{c|c} b & -A \\ \hline d & c \end{array} \quad \text{主問題} \quad \begin{array}{c|c} -c^T & A^T \\ \hline -d & -b^T \end{array} \quad \text{双対問題} \quad (32)$$

となる（ここで A, b, c, d はそれぞれ $m \times n, m \times 1, 1 \times n, 1 \times 1$ 行列で, T は行列の転置を表わす）。

以上の (28), (29), (32) から主問題・双対問題の初期辞書は対応していることがわかった。この関係を使えば、主問題の初期辞書から双対問題の初期辞書を簡単に構成することができる（その逆も可能）。

次に，ピボット演算と主・双対辞書の対応について考える．例えば，辞書(30)において(1, 2)を中心としてピボット演算をすると次の辞書を得る．

		x_1	x_3	
x_2	40	-2/3	-1/6	
x_4	50	-4/3	1/6	
x_5	20	1/3	1/3	
z	800	5/3	-10/3	

(33)

一方，双対辞書(31)において，これと対応する位置(2, 1)を中心としてピボット演算をすると

		y_5	y_2	y_3	
y_4	-5/3	2/3	4/3	-1/3	
y_1	10/3	1/6	-1/6	-1/3	
w	-800	-40	-50	-20	

(34)

を得る．初期辞書において成り立っていた関係(28), (29), (32)が，ピボット演算をした後の辞書の組(33)と(34)においても満たされている．このことから，一般的に

定理 1.6. (辞書の双対性): 主問題の辞書に対し，条件(28),(29),(32)によって定まる双対問題の辞書が存在する

ことが予想できる（証明は省くが，対応する主および双対辞書に対して，対称的なピボット演算，つまり(r, s)および(s, r)を中心とするピボット演算が再び対応する辞書を生成すること示せば十分）．

辞書の双対性から直ちに得られる重要な結果は，

- 主問題の辞書の最適性と対応する双対辞書の最適性が一致する

ことである．つまり(32)で主問題の最適性は， b の各要素が非負で c の各要素が非正であることだが，このことは対応する双対辞書が最適であること（つまり， $-b^T$ の各要素が非正で $-c^T$ の各要素が非負であること）に他ならない．

実際，このことを例で確かめる．辞書(33)に(2, 1)を中心とするピボット演算を施すと

		x_4	x_3	
x_2	15	1/2	-1/4	
x_1	75/2	-3/4	1/8	
x_5	65/2	-1/4	3/8	
z	1725/2	-5/4	-25/8	

(35)

一方，双対辞書(31)において，これと対応する位置(1, 2)を中心としてピボット演算をすると

		y_5	y_4	y_3	
y_2	5/4	-1/2	3/4	1/4	
y_1	25/8	1/4	-1/8	-3/8	
w	-1725/2	-15	-75/2	-65/2	

(36)

となる . (36) は (35) に対応する双対辞書で , 辞書 (35) の最適性は (36) の最適性も意味している . さらに , 主問題の最適辞書 (35) には主問題の最適解の情報ばかりでなく , 双対問題の最適解の情報が含まれている .

双対定理の証明 双対定理 (定理 1.4) を証明する . 双対問題の双対が主問題になることから , 主問題に最適解が存在するときだけ考えれば良い .

主問題に最適解が存在する場合 , 2 段階単体法を使うことにより , 最適な辞書 D が得られる . 定理 1.6 により , 双対問題に D に対応する最適な辞書 D^* が存在する . よって双対問題にも最適解が存在する . 辞書 D と D^* の関係 (32) から , 明らかに最適解における目的関数値は一致する (目的関数値は辞書においては符号が反転するが , これは双対問題を基準形に書き換えたため) . ■

一般に , 主問題の最適辞書 D から双対問題の最適解を求める方法を記す . D の目的関数行が

$$z = c_0 + c_1x_{N(1)} + c_2x_{N(2)} + \cdots + c_nx_{N(n)}$$

であったとする . D の最適性から c_j はすべて非正 . 変数の対応

$$\begin{aligned} x_j &\Leftrightarrow y_{(m+j)} & (1 \leq j \leq n) \\ x_{(n+i)} &\Leftrightarrow y_i & (1 \leq i \leq m) \end{aligned}$$

から , 双対問題の最適解 y_1, \dots, y_m は

$$y_i = \begin{cases} -c_j & \text{if } i = N(j) - n \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (37)$$

によって定まる .

主問題と双対問題の関係は下記の通り .

		双対問題		
		最適解あり	非有界	実行不可能
主問題	最適解あり	○	✗	✗
	非有界	✗	✗	○
	実行不可能	✗	○	

演習問題 17. 次の各最適辞書から双対問題の最適解を求めなさい .

$$\begin{aligned} x_3 &= 2.50 - 0.25x_5 - 2.25x_2 - 2.25x_1 - 2.25x_4 \\ x_6 &= 2.50 + 0.75x_5 - 0.25x_2 + 4.75x_1 - 0.25x_4 \\ x_7 &= 7.50 + 0.25x_5 - 2.75x_2 - 1.75x_1 + 0.25x_4 \\ z &= 2.50 - 0.25x_5 - 1.25x_2 - 1.25x_1 - 1.25x_4 \end{aligned}$$

1.7 改訂單体法

スラック変数を含む基準形の問題を考える：

$$\begin{aligned}
 & \text{maximize} && z \\
 & \text{subject to} && \\
 & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n + x_{(n+1)} = b_1 \\
 & \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \ddots \quad \vdots && \\
 & a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n + x_{(n+m)} = b_m \\
 & -c_1x_1 - c_2x_2 - \cdots - c_nx_n + z = 0 \\
 & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_n \geq 0
 \end{aligned} \tag{38}$$

この L P の行列表現は以下のようになる：

$$\begin{aligned}
 & \text{maximize} && z \\
 & \text{subject to} && \mathbf{Ax} = \mathbf{b} \\
 & && -\mathbf{c}^T \mathbf{x} + z = 0 \\
 & && \mathbf{x} \geq \mathbf{0}
 \end{aligned} \tag{39}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}^T &= \left(x_1, \dots, x_n, x_{(n+1)}, \dots, x_{(n+m)} \right) \\
 \mathbf{c}^T &= \left(c_1, \dots, c_n, c_{(n+1)}, \dots, c_{(n+m)} \right) \\
 \mathbf{A} &= \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} & a_{1(n+1)} & \cdots & a_{1(n+m)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} & a_{m(n+1)} & \cdots & a_{m(n+m)} \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

とする。

基底 $B = \{B(1), \dots, B(m)\}$, 非基底 $N = \{N(1), \dots, N(n)\}$ をもつ L P (38) の辞書 D があるとする。辞書 D において非基底変数をすべてゼロと置いた解(つまり基底解)は一意に決定される。基底変数に対応する A の部分行列 A_B を、基底行列と呼ぶ。辞書は条件: $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ かつ $-\mathbf{c}^T \mathbf{x} + z = 0$ と同値であることから、等式:

$$\begin{aligned}
 A_B \bar{\mathbf{x}}_B + A_N \bar{\mathbf{x}}_N &= \mathbf{b} \\
 \bar{\mathbf{x}}_N &= \mathbf{0}
 \end{aligned} \tag{40}$$

は一意の解を持ち、その解 $(\bar{\mathbf{x}}_B, \bar{\mathbf{x}}_N)$ は D の基底解となる。任意の \mathbf{b} に対して、等式: $A_B \bar{\mathbf{x}}_B = \mathbf{b}$ は一意の解を持つので、

$$m \times m \text{ 行列 } A_B \text{ は逆行列 } (A_B)^{-1} \text{ を持つ,} \tag{41}$$

ことが導かれる。この事実を用うことにより、辞書 D の基底行列を使った表現が次のように得られる。

$$\begin{aligned}
 (40) \Rightarrow A_B \mathbf{x}_B &= \mathbf{b} - A_N \mathbf{x}_N \\
 \Rightarrow \mathbf{x}_B &= (A_B)^{-1} \mathbf{b} - (A_B)^{-1} A_N \mathbf{x}_N
 \end{aligned} \tag{42}$$

$$\begin{aligned}
 (43) \Rightarrow z &= \mathbf{c}_B^T \mathbf{x}_B + \mathbf{c}_N^T \mathbf{x}_N \\
 &= \mathbf{c}_B^T [(A_B)^{-1} \mathbf{b} - (A_B)^{-1} A_N \mathbf{x}_N] + \mathbf{c}_N^T \mathbf{x}_N \\
 &= \mathbf{c}_B^T (A_B)^{-1} \mathbf{b} + [\mathbf{c}_N^T - \mathbf{c}_B^T (A_B)^{-1} A_N] \mathbf{x}_N
 \end{aligned} \tag{43}$$

$$D = \begin{array}{c|c|c} & & \boldsymbol{x}_N \\ \hline \boldsymbol{x}_B & (\boldsymbol{A}_B)^{-1}\boldsymbol{b} & -(\boldsymbol{A}_B)^{-1}\boldsymbol{A}_N \\ \hline z & \boldsymbol{c}_B^T(\boldsymbol{A}_B)^{-1}\boldsymbol{b} & \boldsymbol{c}_N^T - \boldsymbol{c}_B^T(\boldsymbol{A}_B)^{-1}\boldsymbol{A}_N \end{array} \quad (44)$$

表現 (44) から ,

- 辞書の各係数は , 基底逆行列 $(\boldsymbol{A}_B)^{-1}$ と問題の入力 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ から (行列 , ベクトルの積演算によって) 計算できる

ことがわかる . この方法は改訂単体法と呼ばれる .

改訂単体法のしくみを , L P :

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & 2x_1 + x_2 + x_3 \\ \text{subject to} \quad & 2x_1 + 2x_2 - x_3 + x_4 = 6 \\ & 2x_1 + 4x_3 + x_5 = 4 \\ & -4x_1 + 3x_2 - x_3 + x_6 = 1 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6 \geq 0 \end{aligned} \quad (45)$$

を用いて説明する .

まず , L P (45) の行列表現をつくる .

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}^T &= \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 \end{pmatrix} \\ \boldsymbol{c}^T &= \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \boldsymbol{A} &= \begin{bmatrix} 2 & 2 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 4 & 0 & 1 & 0 \\ -4 & 3 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

と置くことにより , 問題は

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & z \\ \text{subject to} \quad & \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \\ & -\boldsymbol{c}^T \boldsymbol{x} + z = 0 \\ & \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0} \end{aligned}$$

と書き換える . 初期非基底 , 初期基底は

$$N = \{1, 2, 3\} \quad B = \{4, 5, 6\}$$

なので , 非基底行列 \boldsymbol{A}_N , 基底行列 \boldsymbol{A}_B およびベクトル \boldsymbol{c}_N , \boldsymbol{c}_B は , それぞ

$$\begin{aligned} \boldsymbol{c}_N^T &= \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{c}_B^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \boldsymbol{A}_N &= \begin{bmatrix} 2 & 2 & -1 \\ 2 & 0 & 4 \\ -4 & 3 & -1 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{A}_B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

で与えられる。明らかに $(A_B)^{-1} = I$ であることから、辞書の行列表現 (44) を使って、現在の辞書を求めることができる。

$$\begin{array}{c|cccc} & 0 & 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & 6 & -2 & -2 & 1 \\ 5 & 4 & -2 & 0 & -4 \\ 6 & 1 & 4 & -3 & 1 \\ 7 & 0 & 2 & 1 & 1 \end{array} = \begin{array}{c|c} \bar{\mathbf{b}} & -\bar{\mathbf{A}}_N \\ \hline \bar{c}_0 & \bar{\mathbf{c}}^T \end{array}$$

単体法では、辞書の要素をすべて計算するのではなく、ピボットの中心を選ぶために必要な部分だけを計算する。つまり、行列 $(A_B)^{-1}$ を現在の基底逆行列 ($= I$) とおいて、辞書の 0 列 $\bar{\mathbf{b}}$ と最終行 $\bar{\mathbf{c}}$ を

$$\bar{\mathbf{b}} = (A_B)^{-1}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \bar{\mathbf{c}}^T = \mathbf{c}_N^T - \mathbf{c}_B^T(A_B)^{-1}\mathbf{A}_N = (2, 1, 1)$$

により求める。ここで、 c の要素で正のものがあるので、例えば列番号 $s = 1$ ($\bar{c}_1 = 2$) をピボット列として選ぶ。次に、ピボット行の選択には辞書の 1 列 $-\bar{\mathbf{A}}_1$ が必要なので、

$$\bar{\mathbf{A}}_1 = (A_B)^{-1}\mathbf{A}_{N(1)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ -4 \end{bmatrix}$$

を計算する。そして、

$$\bar{b}_2/\bar{a}_{21} = \min\{\bar{b}_i/\bar{a}_{i1} : 1 \leq i \leq m, \bar{a}_{i1} > 0\}; \quad \bar{a}_{21} > 0$$

により、ピンボット行 $r = 2$ が選ばれ、結局（行番号 $r = 2$ 、列番号 $s = 1$ ）がピボットの中心として選ばれる。ピボット演算として、ここでは辞書を更新する代わりに基底逆行列 $(A_B)^{-1}$ を書き換える。

$$\begin{aligned} \text{新しい } N_{(1)} &= 5 \Rightarrow N = \{5, 2, 3\} \\ \text{新しい } B_{(2)} &= 1 \Rightarrow B = \{4, 1, 6\} \end{aligned}$$

$$\text{新しい } (A_B)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

これで、単体法の 1 反復が終了した。同様に、反復 2 の計算は以下のようになる。

$$\bar{\mathbf{b}} = (A_B)^{-1}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 9 \end{bmatrix} \quad \bar{\mathbf{c}}^T = \mathbf{c}_N^T - \mathbf{c}_B^T(A_B)^{-1}\mathbf{A}_N = (-1, 1, -3)$$

$\bar{c}_2 = 1$ よりピボット列は $s = 2$ となり、辞書の 2 列 $-\bar{\mathbf{A}}_2$ を計算：

$$\bar{\mathbf{A}}_2 = (A_B)^{-1}\mathbf{A}_{N(2)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix}$$

比のテスト：

$$\bar{b}_1/\bar{a}_{12} = \min\{\bar{b}_i/\bar{a}_{i2} : 1 \leq i \leq m, \bar{a}_{i2} > 0\}; \quad \bar{a}_{12} > 0$$

$r = 1$ となり (行番号 $r = 1$, 列番号 $s = 2$) がピボットの中心

$$\text{新しい } N_{(2)} = 4 \Rightarrow N = \{5, 4, 3\}$$

$$\text{新しい } B_{(1)} = 2 \Rightarrow B = \{2, 1, 6\}$$

$$\text{新しい } (\mathbf{A}_B)^{-1} = \begin{bmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ -3/2 & 7/2 & 1 \end{bmatrix} \quad (46)$$

そして反復 3 で

$$\bar{\mathbf{b}} = (\mathbf{A}_B)^{-1}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 6 \end{bmatrix} \quad \bar{\mathbf{c}}^T = \mathbf{c}_N^T - \mathbf{c}_B^T(\mathbf{A}_B)^{-1}\mathbf{A}_N = (-1/2, -1/2, -1/2) \leq \mathbf{0}^T$$

となり最適性が満足された。よって、

$$x_2 = 1, \quad x_1 = 2, \quad x_6 = 6, \quad x_5 = x_4 = x_3 = 0$$

が最適解で、目的関数値は

$$z = \mathbf{c}_B^T(\mathbf{A}_B)^{-1}\mathbf{b} = 5$$

となる。また、 $y = \mathbf{c}_B^T(\mathbf{A}_B)^{-1}$ は双対問題の最適解になる。

1.8 感度分析

L P の入力デ - タの変動により、最適解がどのように変化するかを分析することを、一般に感度分析と言う。

この節では特に L P の右辺 b と費用ベクトル c が変動するときの最適解の安定性について考察する。

いま、L P を単体法で解いて最適基底 B 、基底逆行列 $(\mathbf{A}_B)^{-1}$ が得られているとする。最適辞書は次の表 (44) で与えられる。

\mathbf{x}_N		
$D = \mathbf{x}_B$	$(\mathbf{A}_B)^{-1}\mathbf{b}$	$-(\mathbf{A}_B)^{-1}\mathbf{A}_N$
z	$\mathbf{c}_B^T(\mathbf{A}_B)^{-1}\mathbf{b}$	$\mathbf{c}_N^T - \mathbf{c}_B^T(\mathbf{A}_B)^{-1}\mathbf{A}_N$

右辺 b が $b + t$ に、費用 c が $c + s$ に変化したとする。上の表から明らかのように、現在の基底 B が変動後でも最適であるための必要十分条件は

$$(\mathbf{A}_B)^{-1}(\mathbf{b} + \mathbf{t}) \geq \mathbf{0}; \text{ および} \quad (47)$$

$$(\mathbf{c}_N + \mathbf{s}_N)^T - (\mathbf{c}_B + \mathbf{s}_B)^T(\mathbf{A}_B)^{-1}\mathbf{A}_N \leq \mathbf{0}^T \quad (48)$$

となる。この条件を利用することにより、現在の基底の最適性を保ちながら b または c のある 1 成分が変動できる限度 (許容変動) が簡単に計算される。以下では、この許容変動の計算方法を L P (45) を例にとって説明する。

▷ 右辺 b_i の許容変動について

右辺の第1成分だけが変動する場合、つまり $t = (t_1, 0, 0)^T$, $s = \mathbf{0}$ の場合を考える。 $s = \mathbf{0}$ より、最適基底 $B = \{2, 1, 6\}$ が変動後でも最適であるためには、条件(47)だけを調べれば十分である。基底逆行列は(46)で求まっているから、(47)は

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ -3/2 & 7/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \geq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

となる。すなわち、

$$\begin{aligned} 1 + 1/2t_1 &\geq 0 \Rightarrow t_1 \geq -2 \\ 2 &\geq 0 \\ 6 - 3/2t_1 &\geq 0 \Rightarrow t_1 \leq 4 \end{aligned}$$

より、右辺 b_1 の許容増加は4、許容減少は2である。第2、第3成分についても同様（演習問題18 a）。

▷ 費用 c_j の許容変動について

費用ベクトル c の第1成分だけが変動する場合、つまり $s = (s_1, 0, 0, 0, 0, 0)$, $t = \mathbf{0}$ の場合を考える。(47)はいつでも満足されますので、(48)だけ考察する。最適基底は $B = \{2, 1, 6\}$ 、非基底は $N = \{5, 4, 3\}$ より、

$$s_N^T = (0, 0, 0) \quad s_B^T = (0, s_1, 0).$$

一方、

$$\bar{c}^T = c_N^T - c_B^T (A_B)^{-1} A_N = (-1/2, -1/2, -1/2)$$

は計算済みだから、結局(48)は

$$\bar{c}^T - (0, s_1, 0) \begin{bmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ -3/2 & 7/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \leq \mathbf{0}^T.$$

これを整理して

$$(-1/2, -1/2, -1/2) - (1/2s_1, 0, 2s_1) \leq (0, 0, 0) \Rightarrow s_1 \geq -1/4$$

となり、費用 c_1 の許容増加は ∞ で、許容減少は $1/4$ であることがわかった。第2、第3成分についても同様にできる（演習問題18 b）。

演習問題 18. 講義ノートの感度分析の節における、

(a) 右辺 b_i の許容変動についての分析を完成させなさい。

(b) 費用 c_j の許容変動についての分析を完成させなさい。

演習問題 19. 次のLPを単体法で解きなさい。

$$\begin{array}{lll} \text{maximize} & 2x_1 & + x_2 \\ \text{subject to} & 3x_1 & + 4x_2 \leq 6 \\ & x_1 & + 1/3x_2 \leq 1 \\ & & x_1, x_2 \geq 0 \end{array}$$

また，目的関数が

$$(a) \max 3x_1 + x_2$$

$$(b) \max 2x_1 + 1/2x_2$$

に変動した場合，最適解が変化するかどうかを判定しなさい．

2 凸集合と凸関数

この節では非線形計画問題を扱う上で基礎となる事項(凸集合, 凸関数)をまとめる。これらは非線形計画が“うまく”解けるための条件を理解するのに必要な概念である。

2.1 復習

2.1.1 行列

正定値行列, 非負定値行列 : n 次の実対称行列 A は, 任意の $x \neq 0$ に対して $x^\top Ax > 0$ が成り立つとき, 正定値行列とよび, $A \succ 0$ で表す。同様に, 任意の x に対して $x^\top Ax \geq 0$ が成り立つとき, 非負定値行列(半正定値)とよび, $A \succeq 0$ で表す。

A が正定値, 非負定値であるための必要十分条件は, A のすべての固有値がそれぞれ正, 非負となることである。

(実対称行列の非負定値性) 實対称行列 S に対して, 以下の3つはすべて等価な条件である:

- (1) $y^\top S y \geq 0, \forall y \in \mathbf{R}^n$
- (2) S の固有値はすべて非負である
- (3) $S = D^2$ をみたす実対称行列 $D \in \mathbf{R}^{n \times n}$ が存在する

(半) 正定値性の判定条件を挙げる。対称行列 A の行番号集合(=列番号集合)を $\{1, \dots, n\}$ とする。 A の部分行列(小行列)で行番号集合が I , 列番号集合が J であるものを $A[I, J]$ と表わすとき, $I = J$ である小行列を A の主小行列とよび, その行列式を主小行列式(principal minor)とよぶ。そのとき,

$$\begin{aligned} A \text{が半正定値} &\Leftrightarrow A \text{の任意の主小行列式} \geq 0 \\ A \text{が正定値} &\Leftrightarrow A \text{の任意の主小行列式} > 0 \end{aligned}$$

が成り立つ。さらに, 行番号集合が $I = \{1, \dots, k\}$ ($k \leq n$)の形の主小行列を首座小行列と呼び, その行列式を首座小行列式(leading principal minor)と呼ぶ。(首座小行列の概念は A の行番号のつけ方に依存することに注意)。このとき,

$$A \text{が正定値} \Leftrightarrow A \text{の任意の首座小行列式} > 0$$

も成り立つ。しかし

$$A \text{が半正定値} \Leftrightarrow A \text{の任意の首座小行列式} \geq 0$$

は成り立たない(\Rightarrow は成り立つが \Leftarrow は駄目)。主小行列式は 2^n 個, 首座小行列式は n 個あることに注意。

2.1.2 テイラー展開

微分不可能であったり連続でなかったりする関数は、最適化問題の中では取り扱いが難しい。特に断わらない限り、関数はすべて何回でも連続微分可能であると仮定する。

実数値関数 f の偏微分を並べたベクトル

$$\nabla f(\mathbf{x}) := \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right)^\top$$

を f の勾配ベクトルとよぶ。また、実数値関数の二次微分を次のように並べた $n \times n$ 行列

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) := \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} f(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_n} f(\mathbf{x}) \\ \vdots & \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} f(\mathbf{x}) & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_1} f(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} f(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$$

をヘッセ行列とよぶ。

関数 f とその勾配ベクトルとの間に次の関係が成り立つ。

テイラー展開 1

$$\begin{aligned} 0 < \exists \theta < 1, \quad f(\mathbf{x} + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x} + \theta \mathbf{d})^\top \mathbf{d} \\ f(\mathbf{x} + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^\top \mathbf{d} + o(\|\mathbf{d}\|) \end{aligned} \tag{49}$$

式 (49) は多変数関数 $f(\mathbf{x})$ に対する平均値の定理に他ならない。

関数 f とその勾配およびヘッセ行列の間に次の関係が成り立つ。

テイラー展開 2

$$\begin{aligned} 0 < \exists \theta < 1, \quad f(\mathbf{x} + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^\top \mathbf{d} + \frac{1}{2} \mathbf{d}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x} + \theta \mathbf{d}) \mathbf{d} \\ f(\mathbf{x} + \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^\top \mathbf{d} + \frac{1}{2} \mathbf{d}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}) \mathbf{d} + o(\|\mathbf{d}\|^2) \end{aligned}$$

ただし、 $g(x) = o(h(x))$ は、“ g の大きさは h の大きさに比べれば無視できる”、すなわち $\lim_{x \rightarrow 0} g(x)/h(x) = 0$ を示している。

問題 2.1. 勾配ベクトルがゼロベクトルでない場合、勾配ベクトルの方向に少し進むと関数値は上がる。これを示しなさい。

2.2 凸集合

$$X \subseteq \mathbf{R}^n \text{ が凸集合} \iff \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in X, \lambda \in [0, 1] \Rightarrow (1 - \lambda)\mathbf{x}_1 + \lambda\mathbf{x}_2 \in X$$

直感的にはへこみのない集合のことを凸集合とよぶ。空集合は凸集合とする。

定理 2.1. 凸集合と凸集合の交わりは凸集合

問題 2.2.

$$X = \{x \in \mathbf{R}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$$

は凸集合であることを示せ .

\mathbf{R}^n の空でない部分集合 C において , $x \in C$ ならば全ての実数 $\lambda \geq 0$ に対して $\lambda x \in C$ が成り立つとき , C を錐 (cone) という . 必ず原点が含まれることに注意 . 特に凸集合である錐を凸錐 (convex cone) という .

2.3 凸関数

関数が “でこぼこ” した形をしていると、一般に最小化が難しい . 一方 , 関数の形が下に膨らんでいると、最小化は比較的容易である . この下に膨らんだ形をする関数のことを凸関数とよぶ . より正確に言うと、凸関数とは関数のグラフの「上側」の部分が凸集合になっている関数のことである .

実数値関数 f が与えられたとき , 集合

$$\{(x, y) \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R} \mid y \geq f(x)\}$$

を f のエピグラフ (epigraph) とよぶ . 実数値関数 f のエピグラフが凸集合のとき , その関数は凸関数とよばれる .

定理 2.2. f が凸関数であることは , 次の条件と同値である :

f の定義域の任意の点 x_1, x_2 , 任意の $\lambda \in [0, 1]$ に対し , 点 $(1 - \lambda)x_1 + \lambda x_2$ は定義域に含まれ ,

$$(1 - \lambda)f(x_1) + \lambda f(x_2) \geq f((1 - \lambda)x_1 + \lambda x_2)$$

が成り立つ .

定理 2.2 の条件を凸関数の定義としてもよい . 下に , 凸関数 , 狹義凸関数 , 凹関数の定義を挙げておく .

$f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ が凸関数

$$\stackrel{\text{def.}}{\iff} x_1, x_2 \in \mathbf{R}^n, \lambda \in [0, 1] \Rightarrow (1 - \lambda)f(x_1) + \lambda f(x_2) \geq f((1 - \lambda)x_1 + \lambda x_2)$$

$f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ が狭義凸関数

$$\stackrel{\text{def.}}{\iff} x_1, x_2 \in \mathbf{R}^n, x_1 \neq x_2, \lambda \in (0, 1) \Rightarrow (1 - \lambda)f(x_1) + \lambda f(x_2) > f((1 - \lambda)x_1 + \lambda x_2)$$

$f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ が凹関数 $\stackrel{\text{def.}}{\iff} -f$ が凸関数, i.e.,

$$x_1, x_2 \in \mathbf{R}^n, \lambda \in [0, 1] \Rightarrow (1 - \lambda)f(x_1) + \lambda f(x_2) \leq f((1 - \lambda)x_1 + \lambda x_2)$$

2.4 微分可能な凸関数

1 回連続微分可能な関数 $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ が凸関数であることの必要十分条件は、任意の $x, y \in \mathbf{R}$ について,

$$f(y) \geq f(x) + f'(x)(y - x)$$

が成り立つことである。一般に、 $f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ の 1 回連続微分可能な凸関数ならば、任意の $x, y \in \mathbf{R}^n$ について、

$$f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_j} (y_j - x_j) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad \dots \text{(勾配不等式)} \quad (50)$$

が成り立つ。

定理 2.3. $f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ が 1 回連続微分可能であるとする。このとき、 f が凸関数であることの必要十分条件は、任意の 2 つのベクトル $x, y \in \mathbf{R}^n$ に対して勾配不等式 (50) が成り立つことである。

2.5 2 回微分可能な凸関数

次に、 $f : \mathbf{R}^1 \rightarrow \mathbf{R}$ を 2 回連続微分可能とする。 f が凸関数であることは、任意の $x \in \mathbf{R}$ について、以下が成り立つことと等価である。

$$f''(x) \geq 0$$

一般に、任意の $x \in \mathbf{R}^n$ に対して、ヘッセ行列 $\nabla^2 f(x)$ が、非負定値行列（半正定値）であることが条件である。

定理 2.4. $f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ が 2 回連続的微分可能であるとする。このとき、 f が凸関数であることの必要十分条件は、任意の $x \in \mathbf{R}^n$ に対してヘッセ行列 $\nabla^2 f(x)$ が非負定値行列であることである。

問題 2.3. 関数 f が行列 $V \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 、ベクトル $c \in \mathbf{R}^n$ 、実数 γ を使って

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^\top V \mathbf{x} + \mathbf{c}^\top \mathbf{x} + \gamma \quad (51)$$

で定義されているとする。行列 V が対称正定値行列のとき、関数 f は狭義凸 2 次関数である。これを示せ。

3 非線形計画法

3.1 制約無し最適化問題

実数値関数 $f(x)$ に対して, $f(x)$ を最小にする x を求めることを考える。ただし, x には特に制約がなく, \mathbf{R}^n のすべての値を取りうるものとする。このような最適化問題:

$$(P) \left| \begin{array}{ll} \text{最小化} & f(x) \\ \text{条件} & x \in \mathbf{R}^n. \end{array} \right.$$

を制約無し最適化問題とよぶ。この場合, x の動く範囲が自明なので, 単に

$$\text{最小化 } f(x)$$

と書いててもよい。

x^* が (P) の大域最適解 (最小解) $\stackrel{\text{def}}{\iff} f(x^*) \leq f(x) \text{ for all } x$

x^* が (P) の局所最適解 (極小解) $\stackrel{\text{def}}{\iff}$
 $\exists \varepsilon > 0 : f(x^*) \leq f(x) \text{ for all } x \in B(x^*, \varepsilon) := \{x \mid \|x - x^*\| < \varepsilon\}$

局所最適解 (極小解) の定義において不等式が厳密に成り立つとき, つまり「 x^* の近傍の点 $x \neq x^*$ において $f(x^*) < f(x)$ 」が成り立つとき, x^* は孤立局所最適解 (孤立極小解) である, という。

問題 3.1. $f(x) = x^3, X = \mathbf{R}$ としたとき, $x = 0$ は局所最適解 かどうか判定せよ。

3.1.1 制約無し最小化問題の最適性条件

一般に, ベクトル x が最適化問題の最適解であるための必要条件を最適性条件 (optimality condition) と呼ぶ。ここでは制約無し最適化問題 (P) の最適性条件について考える。

定理 3.1. (1 次の必要条件)

x^* が無制約最小化問題 (P) の局所最適解で, $f : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ が x^* の近傍で微分可能であるならば, $\nabla f(x^*) = \mathbf{0}$ が成り立つ。

$\nabla f(x) = \mathbf{0}$ を満たす点のことを停留点 (stationary point) と呼ぶ。停留点は必ずしも局所最適解ではないが, 制約無し最適化問題の局所最適解は常に停留点である。極大・極小解でもない停留点を鞍点 (saddle point) という。

また, 関数のヘッセ行列 (2 次微分) の情報を使うと, 最適性に関してより詳しい情報が得られる。以下にその 2 つの定理を紹介する。これらの定理は 2 次微分を使うため, 2 次の条件に関する定理と呼ばれる。

定理 3.2. (2 次の必要条件) 2 回連続微分可能な関数 f の局所最適解 x^* において, $\nabla^2 f(x^*)$ は非負定値行列である。

定理 3.3. (2 次の十分条件) 2 回連続微分可能な関数 f の停留点 x^* において, $\nabla^2 f(x^*)$ が正定値行列ならば, x^* は孤立局所最適解である。

問題 3.2. $f(x) = ax^2 + bx + c$ として (P) を考えた場合, 上で述べている最適性の条件 (1,2 次の必要条件, 2 次の十分条件) は何か?

問題 3.3. $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Vx + c^\top x + \gamma$ とする.

(1) $\nabla f(x)$, $\nabla^2 f(x)$ を求めよ.

(2) (P) を考えた場合, 上で述べている最適性の条件 (1,2 次の必要条件, 2 次の十分条件) は何か?

定理 3.4. 微分可能な関数 $f : R^n \rightarrow R$ が凸関数であるとき, f の停留点 ($\nabla f(x^*) = 0$ を満たす点 x^*) は f の大域最適解である.

よって, 凸関数の最小化問題においては, 局所最適解を求めれば大域最適解が得られることが分かる.

例 3.1. 問題 2.3 に示した, 狹義凸 2 次関数 (51) の最小化問題を考える. 1 次の必要条件 (問題 3.3 (2)) より, 停留点は $x^* = -V^{-1}c$ の 1 点のみである. V が正定値だから正則であり, 逆行列が存在することに注意. 停留点 x^* におけるヘッセ行列は V で正定値だから, 2 次の十分条件が満たされ, x^* は局所最適解であることがわかる. これが大域最適解であることは, 定理 3.4 により保証される.

3.1.2 制約無し最適化の解法

例 3.1 を通して, 関数が狭義凸 2 次関数ならば, 最適解が直接求められることが分かった. しかし, 一般の制約無し最適化問題 (P) ではこのようなことは期待できず, 最適解を求めるには反復解法を用いるのが一般的である. 各反復で “現在の点よりも最適解に近い点を求める” ことにより, 徐々に最適解に近付いていくことを考える.

最急降下法 問題 2.1 が示すように, 勾配ベクトルの方向に少し進めば目的関数値は上がる. 反対に, 勾配ベクトルの逆方向に進めば, 目的関数値は下がる. 勾配ベクトルのこの性質を利用するものが最急降下法 (steepest descent method) である. 最急降下法の具体的な手順は以下の通りである.

最急降下法

(Step1) 適当に初期解 $x^{(0)}$ を選ぶ. $t = 0$ とする.

(Step2) $\nabla f(x^{(t)}) = 0$ であれば, $x^{(t)}$ が停留点であるので終わり. そうでなければ, $d^{(t)} = -\nabla f(x^{(t)})$ とし, $f(x^{(t)} + \alpha d^{(t)})$ が最小となるような正の数 α を選ぶ.

(Step3) $x^{(t+1)} = x^{(t)} + \alpha d^{(t)}$ を次の近似解とし, $t \rightarrow t + 1$ として step2 に戻る.

ここで $\alpha > 0$ は移動する量を決めるパラメータであり, ステップサイズと呼ばれる. ステップサイズ α は, $d^{(t)} = -\nabla f(x^{(t)})$ として次の問題を構成し, その解として決められる.

最小化	$f(x^{(t)} + \alpha d^{(t)})$
条件	$\alpha \geq 0$.

このような1次元変数の最適化問題を解いてステップサイズを決定することを直線探索と呼ぶ。直線探索問題を厳密に解くことは一般に困難であるが、近似的には効率よく解くことができる事が知られている。

単純なアルゴリズムであるため、効率は後述のニュートン法に比べて劣ると言われている。一方、利点としては、1回の反復にかかる計算量が小さいこと、勾配ベクトルさえあれば計算できることが挙げられる。

問題 3.4. 原点 $(0, 0)$ を初期点とするとき、関数 $f(x_1, x_2) = x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 + 2x_2 + 3$ に最急降下法を適用して、2回反復後の点を計算せよ。

ニュートン法 各反復で“現在の点よりも最適解に近い点を求める”ために、目的関数 f を2次近似してみる。点 x のまわりで f を泰勒展開し、3次以上の項を無視すると、次のようになる。

$$f(x + d) \approx f(x) + \nabla f(x)^\top d + \frac{1}{2} d^\top \nabla^2 f(x) d. \quad (52)$$

ここで、 x は現在の点であり、 d は次の点 $x + d$ を決めるための変数ベクトルである。左辺の最小化は一般に困難であるが、右辺はもし $\nabla^2 f(x)$ が正定値ならば d に関する狭義凸2次関数であり、例 3.1 で見たように $d = -\nabla^2 f(x)^{-1} \nabla f(x)$ で最小化される。もし、(52) の右辺の2次近似が左辺を充分よく近似しているのであれば、現在の点 x よりも $x + d$ の方が最適解に近いだろう。ニュートン法では、それを期待して、 $x \rightarrow x - \nabla^2 f(x)^{-1} \nabla f(x)$ という反復を繰り返す。

ニュートン法

(Step1) 適当に初期解 $x^{(0)}$ を選ぶ。 $t = 0$ とする。

(Step2) $\nabla f(x^{(t)}) = 0$ であれば、 $x^{(t)}$ を出力して終わり。

(Step3) $\nabla^2 f(x^{(t)})$ が正定値であれば、ニュートン方向：

$$d^{(t)} = -\nabla^2 f(x^{(t)})^{-1} \nabla f(x^{(t)})$$

を求める。 $x^{(t+1)} = x^{(t)} + d^{(t)}$ を次の近似解とし、 $t \rightarrow t + 1$ として step2 に戻る。

一般に、ニュートン法は最急降下法より効率が良いといわれている。また、基本的には直線探索する必要がないことも特徴である。しかし、ニュートン方向を計算するには正則なヘッセ行列が必要となることが、短所として挙げられる。 $x^{(t)}$ が充分、局所最適解に近ければ、 $\nabla^2 f(x)$ は正定値となるが、任意の点について言えるわけではない。その場合は、ヘッセ行列に単位ベクトルを足すなど、工夫する必要がある。

問題 3.5. 原点 $(1, 1)$ を初期点とするとき、関数 $f(x_1, x_2) = x_1^4 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 + 2x_2 + 3$ にニュートン法を適用して、1回反復後の点を計算せよ。

3.2 制約付き最適化問題

この節では、制約無し最適化問題に対する最適性条件(1次の必要条件)を、制約付き最適化の場合に拡張する。定理3.1の拡張版である最適性条件(KKT条件)を導くのが目的である。基本的に不等式制約のみをもつ非線形計画問題を扱うが、後半では等式制約のみをもつ問題や、等式と不等式の両方の制約をもつ問題も扱う。特に、等式制約のみからなる制約付き最適化問題に対しては、ラグランジュの未定乗数法とよばれる方法を紹介する。

3.2.1 不等式制約のみをもつ非線形計画問題

最初に扱うのは、不等式制約のみをもつ非線形計画問題である。

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(\mathbf{x}) \\ \text{条件} & g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \end{array} \quad (53)$$

制約付き最適化問題(53)の実行可能領域を F とする。前節では、制約無し最適化問題に対して“大域最適解(最小解)”や“局所最適解(極小解)”を定義したが、制約付き最適化問題に対しては次のように定義される。

x^* が (P) の大域最適解(最小解) $\stackrel{\text{def}}{\iff} f(x^*) \leq f(x) \text{ for all } x \in F$
 x^* が (P) の局所最適解(極小解) $\stackrel{\text{def}}{\iff} \exists \varepsilon > 0 : f(x^*) \leq f(x) \text{ for all } x \in F \cap B(x^*, \varepsilon)$

制約付き最適化問題(53)の目的関数と全ての制約関数が微分可能であるとする。制約付き問題における最適性は、最適解が制約式の境界上にあるかないかによって状況が変わってくる。最適解 x^* が境界上にない(内点である)場合、制約無し問題の場合と同様に $\nabla f(x^*) = \mathbf{0}$ が1次の必要条件となる。しかし、最適解 x^* が境界上にある場合、上式が成り立つとは限らない。最適解 x^* が境界上にある場合の必要条件は、以下のように表わされる。

定理 3.5. (1次の必要条件)

点 x^* を不等式制約付き問題(53)の局所最小解とし、 f, g_i ($i = 1, \dots, m$) は x^* において微分可能とする。適当な制約想定が満たされれば、次の等式・不等式システム(Karush-Kuhn-Tucher(カルーエ・キュー・タッカー)条件、KKT条件)を満たす $\lambda^* \in \mathbf{R}^m$ が存在する。

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}^*)}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \frac{\partial g_i(\mathbf{x}^*)}{\partial x_j} = 0, \quad j = 1, \dots, n. \quad (54)$$

$$\lambda_i^* g_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (55)$$

$$g_i(\mathbf{x}^*) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m. \quad (56)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

制約がある条件を満たしていれば、KKT条件が局所最適性の必要条件となるとき、その“制約が満たしているべき条件”のことを制約想定という。制約想定についてはいくつか知られており、次に紹介する条件は制約想定の1つである。

(線形独立制約想定) $i \in I(\mathbf{x}^*)$ なる全ての i に対して, $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)$ が線形独立. ここで, $I(\mathbf{x}) := \{i : g_i(\mathbf{x}) = 0, i = 1, \dots, m\}$.

KKT 条件は必要条件であるから, もちろん, 条件を満たしているからといって \mathbf{x}^* が局所最適解になっているとは限らない. また, \mathbf{x}^* が局所最適解であっても, 制約想定がみたされていなければ, KKT 条件を満たす $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbf{R}^m$ が存在しない場合もある.

制約付き最適化問題 (53) に対して, 関数

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\mathbf{x})$$

を問題 (53) のラグランジュ関数という. また, 变数 $\lambda_i, i = 1, \dots, m$, をラグランジュ乗数とよぶ. ラグランジュ関数を用いると, KKT 条件をより見通しのよい形で表現することができる. ラグランジュ関数を \mathbf{x} および $\boldsymbol{\lambda}$ で微分したものをそれぞれ $\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}), \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ と書くと, KKT 条件は

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) &= \mathbf{0} \\ \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) &\leq \mathbf{0} \\ \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})^\top \boldsymbol{\lambda} &= 0, \quad \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0} \end{aligned}$$

と簡潔に表現できる.

問題 3.6. 2 次計画問題 :

$$(QP) \left| \begin{array}{ll} \text{最小化} & f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^\top \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^\top \mathbf{Q} \mathbf{x} \\ \text{条件} & \mathbf{A} \mathbf{x} \geq \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} \geq \mathbf{0}. \end{array} \right.$$

の KKT 条件を求めよ. ただし, $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^m$, $\mathbf{c} \in \mathbf{R}^n$, $\mathbf{Q} \in \mathbf{R}^{n \times n}$ で対称とする.

3.2.2 等式制約と不等式制約の両方をもつ場合

ここでは, 等式制約と不等式制約の両方をもつ非線形計画問題を考えてみよう.

$$\left| \begin{array}{ll} \text{最小化} & f(\mathbf{x}) \\ \text{条件} & \begin{array}{l} g_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, m \\ h_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = 1, \dots, \ell. \end{array} \end{array} \right. \quad (57)$$

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{\ell} \mu_j h_j(\mathbf{x})$$

ただし, $\boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0}$. 等式制約を 2 つの不等式制約に書き換えて, 不等式条件のみをもつ問題で行った議論と同様に考えることにより, 次の KKT 条件が求められる.

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{0} \\ \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{0} \\ \nabla_{\boldsymbol{\mu}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \leq \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0} \\ \mu_i h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, \ell. \end{array} \right. \quad (58)$$

等式制約に関しては, ラグランジュ乗数の非負制約がなくなる.

3.2.3 凸計画問題

問題 (57) は, 関数 $f, h_i, i = 1, 2, \dots, m$ が凸関数, $g_j, j = 1, \dots, \ell$ が線形関数であるとき, 凸計画問題であるという. 凸性は大域最適性を調べる上で重要な役割を果たしている.

定理 3.6. (凸計画問題の KKT 条件) 問題 (57) は凸計画問題とする. 関数 $f, h_i, i = 1, 2, \dots, m, g_j, j = 1, \dots, \ell$ が微分可能であるとき, ある解 (x^*, λ^*, μ^*) が KKT 条件 (58) を満たせば, x^* が問題 (57) の最適解となる.

よって, 定理 3.5 と定理 3.6 より, 凸計画問題に対しては制約想定の下で, KKT 条件が大域最適性の必要十分条件となる.

問題 3.7. (1) $h_j : \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ が凸関数であるとする ($j = 1, \dots, \ell$). このとき, 任意の $a_j \geq 0, j = 1, \dots, \ell$, に対して, $\eta(x) := \sum_{j=1}^{\ell} a_j h_j(x)$ も凸関数となることを示せ.

(2) (1) の性質および定理 2.3 を利用して, 定理 3.6 を示せ.

3.2.4 等式制約のみをもつ非線形計画問題

次に, 制約が等式制約のみである非線形計画問題を考えよう.

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f(\mathbf{x}) \\ \text{条件} & g_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m. \end{array} \quad (59)$$

この問題の KKT 条件は, 以下のように記述される.

定理 3.7. (等式制約のみをもつ非線形計画問題の KKT 条件) $f, g_i (i = 1, \dots, m)$ が微分可能で, かつ, x^* が等式制約付き最適化問題 (59) の局所最適解とする. このとき, $\nabla g_1(x^*), \dots, \nabla g_m(x^*)$ が線形独立ならば, $\lambda^* \in \mathbf{R}^m$ が存在して,

$$\begin{cases} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = \mathbf{0} \\ \nabla_{\lambda} L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = \mathbf{0}, \end{cases}$$

すなわち

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_j} L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = \frac{\partial f(\mathbf{x}^*)}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \frac{\partial g_i(\mathbf{x}^*)}{\partial x_j} = 0, & j = 1, \dots, n \\ \frac{\partial}{\partial \lambda_i} L(\mathbf{x}^*, \lambda^*) = g_i(\mathbf{x}^*) = 0, & i = 1, \dots, m \end{cases}$$

が成り立つ.

上記のシステムは $n + m$ 個の変数に関する $n + m$ 本の非線形方程式である. 方程式を解くだけで局所最適解が得られるという意味で, 等式制約のみをもつ最適化問題は制約無し最適化問題に近く, 不等式を含んだ一般的の最適化問題よりも扱いやすい. 具体的には, 非線形方程式の解を求めるためのニュートン法を用いて数値的に解くことが考えられる. しかし, 特に規模の小さな問題や構造を持った問題などでは, この方程式を直接解いて解を求めることがある場合がある. そのような方法をラグランジュの未定乗数法とよぶ.

例 3.2. 次の非線形計画問題の最適解をラグランジュの未定乗数法を使って求めよう.

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & x^2 + y^2 + z^2 \\ \text{条件} & 6x + 3y + 4z = 61 \end{array}$$

KKT条件は

$$\begin{bmatrix} 2x \\ 2y \\ 2z \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} 6 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

となる. これは, $x = -3\lambda$, $y = -\frac{3}{2}\lambda$, $z = -2\lambda$ を表わす. これを制約式に代入すれば, $\lambda = -2$ が得られる. したがって, 最適解は $(6, 3, 4)$ となる.

3.2.5 双対理論

ラグランジュ関数は, 様々な興味深い性質をもっており, ここではそのうち, 双対理論にかかわる部分を中心に述べる. これは線形計画における双対理論を非線形計画に拡張したものとなっている.

制約付き最適化問題 (53) に対するラグランジュ関数は

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(\mathbf{x})$$

である. ここで, $\min_{\mathbf{x}} \max_{\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ が制約付き最適化問題 (53) の最適値と同じであることを簡単に示したい.

$\hat{\mathbf{x}}$ を 1 つ固定し, $\boldsymbol{\lambda}$ に関する最適化問題

$$\max_{\boldsymbol{\lambda}} L(\hat{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\lambda}) \quad \text{s.t. } \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0} \quad (60)$$

を考えてみる. もし $g_i(\hat{\mathbf{x}}) > 0$ なる i があるならば, (60) は非有界である. 反対に, もしすべての i に対して $g_i(\hat{\mathbf{x}}) \leq 0$ ならば, $\lambda_i g_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0$ のとき, (60) は最適となる. そのときの最適値は $f(\hat{\mathbf{x}})$ である. 問題 (60) の最適値は $\hat{\mathbf{x}}$ に依存するから, これを $F(\hat{\mathbf{x}})$ とすれば

$$F(\hat{\mathbf{x}}) = \begin{cases} f(\hat{\mathbf{x}}) & g_i(\hat{\mathbf{x}}) \leq 0 \ (i = 1, \dots, m) \text{ のとき} \\ +\infty & \text{上記以外のとき} \end{cases}$$

となる. したがって,

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n} F(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{x}} \max_{\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$$

は, 制約付き最適化問題 (53) の最適値と同じであることがわかる.

定理 3.8. (max-min と min-max の関係)

$$\min_{\mathbf{x}} \max_{\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) \geq \max_{\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}} \min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$$

つぎに ,

$$\underline{L}(\boldsymbol{\lambda}) = \min_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$$

によって定義される関数を最大化する問題:

$$\max_{\boldsymbol{\lambda}} \underline{L}(\boldsymbol{\lambda}) \quad \text{s.t. } \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0} \quad (61)$$

を問題 (53) の (ラグランジュ) 双対問題とよぶ . 双対問題に対して , 元の問題 (53) のことを主問題とよぶことがある .

次の定理は定理 3.8 より明らかである .

定理 3.9. (弱双対定理)

(53) の最適値 θ_P および (61) の最適値 θ_D が両方とも存在する場合 , $\theta_P \geq \theta_D$ が成り立つ .

$\theta_P > \theta_D$ となるとき , 双対ギャップが存在するという . 凸計画問題で制約想定が満たされていれば $\theta_P = \theta_D$ が成り立つが , 一般には双対ギャップが存在する . それでは , どのようなときに双対ギャップが 0 になるだろうか .

定理 3.10. (強双対定理)

問題 (53) において , $f, g_i, i = 1, \dots, m$ が微分可能な凸関数とする . この問題に最適解 x^* が存在し , 制約想定が満たされているならば , 双対問題にも最適解が存在し , さらに双対ギャップは 0 になる .

問題 3.8. 不等式標準形の線形計画問題 :

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \mathbf{c}^\top \mathbf{x} \\ \text{条件} & \mathbf{Ax} \geq \mathbf{b} \\ & \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{array}$$

のラグランジュ双対問題を求めよ .

3.3 制約付き最適化の解法

3.3.1 ペナルティ関数法・バリア関数法

ペナルティ関数やバリア関数を用いて、制約式を目的関数に組み込むことにより、制約付き最適化問題を制約無し最適化問題として記述することができる。例えば、問題(53)に対して、 $(\max\{g_i(\mathbf{x}), 0\})^2$ のペナルティ関数を追加した問題：

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) + \rho \sum_{i=1}^m (\max\{g_i(\mathbf{x}), 0\})^2$$

を考える。ここで、 ρ はペナルティの影響の大きさを調節するための、正の定数である。この最適化問題の解は、ある適当な条件のもとで、 $\rho \rightarrow +\infty$ とすれば、元の問題(53)の最適解に収束することが知られている。この方法はペナルティ関数法と呼ばれる。

一方、バリア関数とは、制約が満たされる点では有限の値をとり、制約の境界では無限大となる関数である。例えば、 $1/x_j$ や $-\log x_j$ は不等式制約式 $x_j \geq 0$ に対するバリア関数である。問題(53)に対して、 $-\log(-g_i(\mathbf{x}))$ のバリア関数を追加した問題は

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) - \nu \sum_{i=1}^m \log(-g_i(\mathbf{x}))$$

となる。元の問題(53)の実行可能領域の内点を初期解として、各反復では固定した正の値 ν に対して上記の制約無し最適化問題を解く。反復ごとに ν の値を徐々に小さくして 0 に近づけることで、最終的に元の問題の最適解が得られる。この方法はバリア関数法と呼ばれる。

3.3.2 主双対内点法

ここで線形計画問題に対し、バリア関数法に基づく解法：「主双対内点法」(パス追跡法)と呼ばれる解法を紹介する。次の標準形で表された線形計画問題：

$$\min_{\mathbf{x}} \mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad \text{s.t. } A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} \geq \mathbf{0}$$

に対して、次のようにバリア関数を加えた問題

$$\min_{\mathbf{x}} \mathbf{c}^T \mathbf{x} - \mu \sum_i \log x_i \quad \text{s.t. } A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

を考える。この問題の KKT 条件は

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad A^T \mathbf{y} + \mathbf{z} = \mathbf{c}, \quad X\mathbf{Z}\mathbf{e} = \mu \mathbf{e} \tag{62}$$

である。ただし、 e はすべて成分が 1 のベクトル、 X, Z はそれぞれ対角に x, z のベクトルを持つ対角行列とする。この KKT 条件は $2n+m$ の変数を持つ $2n+m$ 本の等式で成り立っている。また、元の問題の実行可能領域が有界で実行可能な内点を持つならば、任意の $\mu > 0$ に対して KKT 条件は唯一の解 (x_μ, y_μ, z_μ) を持つことが知られている。その解のパス $\{(x_\mu, y_\mu, z_\mu) : \mu > 0\}$ は主双対中心パスと呼ばれる。そこで、 μ の値を少しずつ小さくしながら主双対中心パス上の解を目指して動くようアルゴリズムを設計する。具体的には、(62) を線形近似してガウスの消去法で連立一次方程式を解くことにより、元の問題の最適解を得ることを考える。

k 反復目で得られた (x^k, y^k, z^k) に対して、次の手順をとる：

- (i) μ の値を決める (現在の値より小さくなるように)
- (ii) 中心パス上の点 (x_μ, y_μ, z_μ) を目指して, 方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ を計算する
- (iii) 新しい解
$$\mathbf{x}^{k+1} \leftarrow \mathbf{x}^k + \theta \Delta \mathbf{x}, \quad \mathbf{y}^{k+1} \leftarrow \mathbf{y}^k + \theta \Delta \mathbf{y}, \quad \mathbf{z}^{k+1} \leftarrow \mathbf{z}^k + \theta \Delta \mathbf{z}$$
が実行可能内点 $(x^{k+1} > 0, z^{k+1} > 0)$ になるように, ステップサイズ θ を選ぶ.

(ii) の計算のために, 次の等式

$$\begin{aligned} A(\mathbf{x}^k + \Delta \mathbf{x}) &= \mathbf{b}, \quad A^T(\mathbf{y}^k + \Delta \mathbf{y}) + (\mathbf{z}^k + \Delta \mathbf{z}) = \mathbf{c}, \\ (X^k + \Delta X)(Z^k + \Delta Z)\mathbf{e} &= \mu \mathbf{e} \end{aligned}$$

を考えればよい. 二次の項を無視すると, さらに以下のように変形できる.

$$\begin{aligned} A\Delta \mathbf{x} &= \boldsymbol{\rho} := \mathbf{b} - Ax^k \\ A^T\Delta \mathbf{y} + \Delta \mathbf{z} &= \boldsymbol{\sigma} := \mathbf{c} - A^T\mathbf{y}^k - \mathbf{z}^k \\ Z^k\Delta \mathbf{x} + X^k\Delta \mathbf{z} &= \mu \mathbf{e} - X^k Z^k \mathbf{e} \end{aligned}$$

これは, $2n+m$ の変数を持つ $2n+m$ 本の線形等式で成り立っており, ガウスの消去法で解くことができる. また, A がフルランクであれば, この連立一次方程式の行列は可逆であり, 唯一の解を持つ.

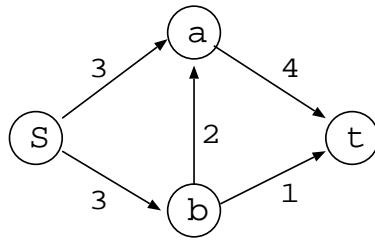


図 1: 有向グラフ $G = (V, E)$. ただし , $V = \{s, t, a, b\}$, $E = \{(s, a), (s, b), (b, a), (a, t), (b, t)\}$. 枝の上の数字は容量 c を指す .

4 ネットワーク計画法

無向・有向グラフとは頂点が枝(もしくは辺)で結ばれたものを指し, ネットワークとは頂点や枝に数値データ(距離やコストなど)が付加されたものを指す. ネットワークに関する数理計画問題はネットワーク計画問題と呼ばれ, 代表的なものに, 最小木問題, 最短路問題, 最大フロー問題, 最小費用フロー問題などがある. ここでは, 最大フロー問題を取りあげる.

4.1 最大フロー問題

最大フロー問題の目的は, 供給点から需要点に, 枝と頂点を経由してフロー(例えば, 商品, 石油など)をたくさん流すことである. ここで, 有向グラフ $G = (V, E)$ に対して, 入口 $s \in V$, 出口 $t \in V$, 容量 $c : E \rightarrow \mathbf{R}_+$ が与えられているものとする. $s-t$ フローとは, 次の条件を満たすフロー(流れ) $\varphi : E \rightarrow \mathbf{R}_+$ のことである.

- 条件 1(容量条件) $0 \leq \varphi(e) \leq c(e), \forall e \in E$
- 条件 2(流量保存条件) $\partial\varphi(v) := \sum_{(v,u) \in E} \varphi(v, u) - \sum_{(u,v) \in E} \varphi(u, v) = 0, \forall v \in V \setminus \{s, t\}$

ここで図 1 の有向グラフに対する最大フロー問題を線形計画問題として定式化する.

$$\begin{aligned} & \max f \\ \text{s.t. } & x_{sa} + x_{sb} = f, \quad -x_{at} - x_{bt} = -f, \\ & x_{at} - x_{sa} - x_{ba} = 0, \quad x_{ba} + x_{bt} - x_{sb} = 0, \\ & 0 \leq x_{sa} \leq 3, \quad 0 \leq x_{sb} \leq 3, \quad 0 \leq x_{ba} \leq 2, \quad 0 \leq x_{at} \leq 4, \quad 0 \leq x_{bt} \leq 1. \end{aligned}$$

また, この問題の双対問題は次のように与えられる.

$$\begin{aligned} & \min 3y_{sa} + 3y_{sb} + 2y_{ba} + 4y_{at} + y_{bt} \\ \text{s.t. } & -p_s + p_t = 1, \\ & p_s - p_a + y_{sa} \geq 0, \quad p_s - p_b + y_{sb} \geq 0, \quad p_b - p_a + y_{ba} \geq 0, \\ & p_a - p_t + y_{at} \geq 0, \quad p_b - p_t + y_{bt} \geq 0, \\ & y_{sa}, y_{sb}, y_{ba}, y_{at}, y_{bt} \geq 0. \end{aligned} \tag{63}$$

ここで, $s \in U, t \in V \setminus U$ を満たす U ($\subseteq V$) を $s-t$ カット, カット U の容量を

$$\kappa(U) := \sum_{(v,w) \in E, v \in U, w \notin U} c(v, w)$$

と定義する。最小カット問題とは、容量最小の $s-t$ カット U を求める問題である。双対問題 (63) は整数最適解を持つことを示すことができ、その性質を用いると、(63) を最小カット問題としてみなすことができる。従って、線形計画問題の双対性より、最大流問題と最小カット問題の最適値が等しくなることを示すことができる。つまり、最大 $s-t$ フローは最小 $s-t$ カットの容量に等しい。

定理 4.1. 最大フロー・最小カットの定理 (Ford-Fulkerson)

$$\max\{\partial\varphi(s) \mid \varphi : s-t \text{ フロー}\} = \min\{\kappa(U) \mid U : s-t \text{ カット}\}$$

4.2 完全単模性

単模行列 (unimodular matrix)

$\overset{\text{def.}}{\iff}$ 行列式が $1, -1$ のいずれかである正方の整数行列（整数を要素とする行列）

完全単模行列 (totally unimodular matrix)

$\overset{\text{def.}}{\iff}$ 任意の小行列式が $0, 1, -1$ のどれかに等しい整数行列

任意のグラフの点・枝接続行列は完全単模である。最大流問題は完全単模行列を係数行列とする線形計画問題であり、よって、枝容量 $c(e)$ が整数の時には整数最適解をもつことが分かる。

定理 4.2. 完全単模行列 $A \in \mathbf{R}^{m \times n}$ を係数行列としてもつ、実行可能な線形計画問題とその双対問題：

$$(P) \left| \begin{array}{ll} \min & \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ \text{s.t.} & A\mathbf{x} = \mathbf{b} \\ & \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (D) \left| \begin{array}{ll} \max & \mathbf{b}^T \mathbf{y} \\ \text{s.t.} & A^T \mathbf{y} \leq \mathbf{c} \end{array} \right.$$

を考える。次のことが成り立つ：

- b が整数ベクトルならば、(P) は整数最適解 $x^* \in \mathbf{Z}^n$ をもつ。
- c が整数ベクトルならば、(D) は整数最適解 $y^* \in \mathbf{Z}^m$ をもつ。

5 整数計画法

5.1 整数計画問題とは

一般に、『変数の全部、あるいは一部が整数でなければならない』という条件を含んだ数理計画問題を整数計画問題とよぶ。ここでは、線形の整数計画問題：

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && \sum_{j=1}^n c_j x_j \\ & \text{subject to} && \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i \quad (i = 1, 2, \dots, m) \\ & && x_j \geq 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n) \\ & && x_j \text{は整数} \quad (j = 1, 2, \dots, p, p \leq n) \end{aligned}$$

を用いて、分枝限定法について説明する。

整数計画問題は全ての変数が整数でなければならない、という条件を線形計画問題に付け加えた全整数計画問題と、変数の一部が整数であるという条件がつけられた混合整数計画問題に分けられる。さらに、整数と指定された変数が0と1しかとりえない場合には、それぞれ、0-1全整数計画問題、0-1混合整数計画問題とよばれる。

5.2 分枝限定法

分枝限定法の考え方は、一般的な数理計画問題に適用可能ですが、主として整数計画問題を解くために使われる。直接的にうまく解く解法がまだ見つかっていない最適化問題：

$$(P) \left| \begin{array}{l} \text{maximize } f(\mathbf{x}) \\ \text{subject to } \mathbf{x} \in S \end{array} \right.$$

に対して、その実行可能領域 S をいくつかの部分領域 $S_i, i = 1, \dots, k$ に分割し、その各々に対応する問題：

$$(P_i) \left| \begin{array}{l} \text{maximize } f(\mathbf{x}) \\ \text{subject to } \mathbf{x} \in S_i \end{array} \right.$$

を考える。これを (P) の子問題とよび、 $S = \cup_{i=1}^k S_i$ が成り立っているものとする。この一群の子問題 $(P_i), i = 1, \dots, k$ を解いて得られた解の中で $f(x)$ が最大のものを見つければ、それが元問題 (P) の最適解となることは明らかである。子問題 (P_i) がまだ難しく直接解けない場合には、 S_i を再びいくつかの領域に分けて、 (P_i) をさらにいくつかの問題に分解していく。この手順を繰り返し適用すれば、いつかは直接解ける問題に到達し、それらの解を総合すれば (P_i) の最適解が得られ、結局 (P) が解けるであろう、というのが分枝限定法の基本的な考え方である。

問題 (P_i) が直接解けない場合、その実行可能領域 S_i を $S_i = \cup_{\ell=p}^q S_\ell$ となるいくつかの部分集合 S_p, \dots, S_q に分割して、 (P_i) をその一群の子問題：

$$(P_\ell) \left| \begin{array}{l} \text{maximize } f(\mathbf{x}) \\ \text{subject to } \mathbf{x} \in S_\ell \end{array} \right. \ell = p, \dots, q$$

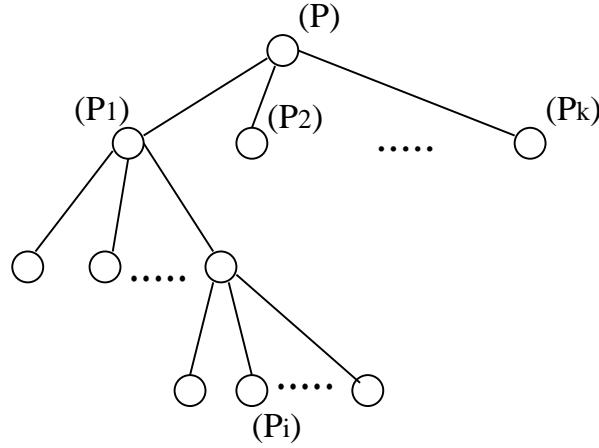


図 2: 部分問題の木構造

でおきかえるのが分枝操作である。この様子は、図 2 のように、木(tree)構造に示すことができ、これは列挙木と呼ばれる。ある部分問題が解ければ、その問題の分枝はその時点で終了である。問題 (P_i) を分枝していく過程で、その時点までに解いた子問題の中で最大の目的関数値を達成している実行可能解を暫定解とよび \hat{x} で表し、また、その目的関数値 $f(\hat{x})$ を暫定値という。より目的関数値の大きい実行可能解が分かるたびに、暫定解を更新する。

通常、ある部分問題 (P_i) を実際に分枝する前に、ある計算を行なって分枝する必要があるか否かを調べる。これは限定操作と呼ばれる。限定操作のためには、その部分問題の緩和問題

$$(\bar{P}_i) \left| \begin{array}{l} \text{maximize } f(\mathbf{x}) \\ \text{subject to } \mathbf{x} \in \bar{S}_i \end{array} \right.$$

を構築する。ここで、 \bar{S}_i は S_i を含む集合であり、 (\bar{P}_i) が簡単に解けるように構築する。この緩和問題の最適解 \bar{x}_i は問題 (P_i) の最適値の上界値を与える。従って、

1. $\bar{x}_i \in S_i$ であれば、 \bar{x}_i は (P_i) の最適解
2. 暫定解 \hat{x} に対して $f(\bar{x}_i) \leq f(\hat{x})$ であれば、 (P_i) の最大値は暫定値 $f(\hat{x})$ 以下であることが分かる
3. \bar{S}_i が空集合ならば、 S_i も空と分かる

1, 2, 3の場合には、部分問題 (P_i) はこれ以上、分枝する必要はなく、その子問題はそこで終了する。2の場合には、問題 (P_i) のいかなる実行可能解も \hat{x} より良い目的関数値を与えられないことが分かり、“限定操作によって見切られて分枝停止になった(見切りがついた)”という。

以上のような分枝操作と限定操作を全ての部分問題が終了するまで繰り返す。

アルゴリズム (分枝限定法のプロトタイプ)

ステップ 1 : (初期設定)

$\hat{z} = -\infty$, $\mathcal{N} := \{(P)\}$, $p := 1$ とする .

ステップ 2 : (最適性判定)

$\mathcal{N} := \phi$ なら終了 .

ステップ 3 : (部分問題の選択)

\mathcal{N} から問題を選び , それを (P_k) とする . $\mathcal{N} := \mathcal{N} \setminus \{(P_k)\}$

ステップ 4 : (限定操作)

緩和問題 (\bar{P}_k) を定め , それを解く .

4 . 1: 緩和問題 (\bar{P}_k) が実行可能解を持たないときはステップ 2 へ $((P_k)$ の分枝終了) .

4 . 2: 緩和問題 (\bar{P}_k) が有界の場合には , 最適解 \bar{x}_k と最適値 $\bar{z}_k = f(\bar{x}_k)$ を求める .

- $\bar{z}_k \leq \hat{z}$ ならばステップ 2 へ $((P_k)$ の分枝終了) .

- \bar{x}_k が (P_k) の実行可能解でないならば , \bar{x}_k を加工して実行可能解 \hat{x}_k と $\hat{z}_k = f(\hat{x}_k)$ を求める .

ステップ 5 : (更新・分枝)

5 . 1 : (更新操作) $\hat{z}_k > \hat{z}$ ならば $\hat{z} = \hat{z}_k$, $\hat{x} = \hat{x}_k$ とする . \bar{x}_k が (P_k) の実行可能解のとき ,
ステップ 2 へ $((P_k)$ の分枝終了) .

5 . 2 : (分枝操作)

(P_k) の子問題 $(P_p), \dots, (P_q)$ を作り ,

$$\mathcal{N} := \mathcal{N} \cup \{(P_p), \dots, (P_q)\}, \quad p := q + 1$$

としてステップ 2 へ .

ステップ 2において $\mathcal{N} := \phi$ で終了した場合 , $\hat{z} < \infty$ なら対応する解は P の最適解となり , $\hat{z} = \infty$ なら P は実行可能解を持たない(つまり , 非有界)とわかる . \mathcal{N} は未分枝問題の集合とよばれ , まだ子問題に分解されておらず , 分枝停止となっていないような問題の集まりを指す .

分枝限定法の計算効率に大きく影響を及ぼす要因として (1) よい上界値を与えるような緩和問題をどのように作るか , (2) 下界を与える実行可能解をどのように求めるか , (3) どのように分枝するか , (4) 生成された部分問題をどのような順番で処理するかを挙げられる .

6 確率を用いたORモデル

6.1 待ち行列理論 (queueing theory)

顧客がサービスを受けるために行列に並ぶような、確率的に挙動するシステムの混雑現象を数理モデルを用いて解析することを目的とした理論である。1909年のA. K. Erlangによる電話回線の混み合いに関する研究に遡る。ここでは、分析の対象となるシステムを待ち行列モデルとしてモデル化し、平均待ち時間などの計算式を簡単に紹介する。

6.1.1 待ちの発生例

サービス窓口が1つの簡単な例で待ちの発生を考えてみる。客はこのシステムに10分間隔でやってくるものとする。時刻0に最初の客が到着し、そのときシステムには誰もいないとする。到着した客はサービス窓口が空いていればすぐにサービスを受けられるが、他の客が窓口にいる時には、順番順に行列を作つて待つ。このモデルで次の3つの場合について考える。

- (a) 客のサービス時間は一定で8分である。
- (b) 客のサービス時間は一定ではないが、その平均は8分である。
- (c) 客のサービス時間は一定ではないが、その平均は12分である。

(b)の場合には、サービス時間が14分と2分の客が交互に来る、(c)の場合には、サービス時間が16分と8分の客が交互に来るとし、各場合での待ち時間を考える。

(a)では常に0、(b)では1人おきに4分待つので平均待ち時間は2分である。(c)では次第に待ち時間が増加していき、ついに発散してしまう(表1を参照)。

表1: (c)の場合の待ち行列

客の番号	1	2	3	4	5	6	7	8
到着時間	0	10	20	30	40	50	60	70
サービス時間	16	8	16	8	16	8	16	8
サービス開始時間	0	16	24	40	48	64	72	88
待ち時間	0	6	4	10	8	14	12	18

(a)と(b)を比較すると、サービス時間の平均は同じでも、サービス時間が変動すると待ちが発生することが分かる。同様なことは、客の到着間隔の時間についてもいえる。

6.1.2 ケンドールの記号

待ち行列のモデルは、客の到着の仕方(X)、サービス時間の分布(Y)、サーバー数(c)、待ち室数(m)によってモデルが特定される。これらの要素を順番に $X/Y/c/m$ と表記したものを、ケンドールの記号と呼ぶ。例えば、到着間隔が指数分布に従う場合、その到着の仕方をポアソン到着といい、記号 M で表す。サービス時間については、各客のサービス時間が指数分布に従う場合、そのサービ

スを指数サービスといい，やはり M で表す．待ち室数とは入ることのできる最大の客数（サービス中の客も含めた数）である．待ち室数に制限が無い場合には，これを省略することができる．ここでは，ポアソン到着，指数サービスでサーバ数が 1，入ることの出来る客数に制限の無いモデル，つまり $M/M/1$ を扱う．

6.1.3 $M/M/1$ モデル

到着率（単位時間あたりに到着する客数の平均） $\lambda (> 0)$ をパラメータにもつポアソン到着では，時間区間 $(t, t + \tau]$ の間に k 人の客が到着する確率がポアソン分布：

$$p_k(\tau) := \frac{(\lambda\tau)^k e^{-\lambda\tau}}{k!}$$

で与えられ，区間の起点 t とは独立であることを仮定する．このとき，長さ τ の時間区間に内に到着する平均客数は $\lambda\tau$ で与えられる．客の到着は，到着間隔によって表わすこともできる．1番目の客の到着時間を T_1 ， n 番目の客と $n+1$ 番目の客の到着間隔を T_{n+1} （ただし， $n \geq 1$ ）としよう． $x \geq 0$ に対して，

$$P(T_n \leq x) = 1 - p_0(x) = 1 - e^{-\lambda x}$$

であり，すなわち，到着間隔 T_n は平均 $u = 1/\lambda$ の指数分布をもつ．

また，ポアソン到着では，2人以上の客が同時に来ることはない．なぜなら， x 時間に内に2人以上の客が来る確率は，

$$1 - p_0(x) - p_1(x) = 1 - e^{-\lambda x} - (\lambda x)e^{-\lambda x}$$

であり，

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - e^{-\lambda x} - (\lambda x)e^{-\lambda x}}{x} = 0$$

が成り立つからである．

サービス時間 S_n が平均 $h = 1/\mu$ の指数分布

$$P(S_n \leq x) = 1 - e^{-\mu x}$$

に従う場合，そのサービスをサービス率（単位時間あたりの平均サービス数） μ の指数サービスという．

ポアソン到着，指数サービスは待ち行列モデルにおいて頻繁に用いられており，ランダムな到着間隔やサービス時間を数学的に表したものと言える．ここでランダムとは「指数分布の無記憶性(memoryless)」と呼ばれる性質がもとにある．例えば，ランダムな到着とは，今迄にたくさんの客が到着したからといってこれからもたくさんの客が到着するとは限らないし，また客が少なくなるとも限らない，といったことを意味している．

利用率（トラフィック密度）とは $\rho = \lambda/\mu$ で定義される． $\rho < 1$ の場合， $M/M/1$ モデルでは待ち行列は時間の経過とともに平衡状態に落ち着くことが知られている．また， ρ が 1 より大きければ，待ち人数は増加し発散してしまう．ここでは $\rho < 1$ を仮定する．

これらの仮定のもと，次のように統計量が計算される．

- 待っている客の人数が n 人である確率： $P_n = \rho^n(1 - \rho)$
- 窓口で待たされない確率： $P_0 = 1 - \rho$

- 窓口で待たされる確率 : $1 - P_0 = \rho$
- 客の平均人数 : $\frac{\rho}{1-\rho}$
- 待っている客の平均人数 : $\frac{\rho^2}{1-\rho}$
- 平均滞在時間: $W = \frac{1}{\mu-\lambda}$
- 平均待ち時間 : $W_q = \frac{\rho}{\mu-\lambda}$
- 実際に待たされた客の平均待ち時間 : $\tilde{W}_q = \frac{1}{\mu-\lambda}$

6.2 在庫管理

生産から消費にいたる間には、原材料・仕掛品・製品などの形をした種々の在庫が存在する。大きな在庫の理由は、需要やリードタイム（注文してから納入するまでの期間）の不確実性である。もしこれらが確定していれば、そのリードタイム分だけ先行させて作れば在庫は持たないで済むからである。

6.2.1 経済的発注量の求め方

毎期の需要が θ 単位で一定しているある商品を考える。この商品に対する需要はすべて時間遅れなく、必ず満たされなければならない。この商品はいくらでも発注でき、しかも直ちに入手できるものとする。発注量を小さくすると発注の頻度が多くなり発注費用がかかりすぎるが、在庫量は平均的に少なくなるので在庫保管費の点からは経済的となる。在庫保管費と発注費用のバランスをうまくとり、単位時間あたりの発注費と単位時間あたりの在庫費の合計が最小になるような経済的発注量を求めたい。

発注費は 1 回あたり K 円とする。問題は、長期的に見た場合の単位時間あたりの費用（単位時間あたりの発注費用と単位時間あたりの在庫保持費用の和）が最小になる発注量を決定することである。この発注量を経済的発注量（EOQ: economic order quantity）という。

1 回の発注における発注量を q 単位とする。この発注量 q が発注時点での在庫量となり、これが時間の経過とともに一定量（単位時間あたり θ 単位）ずつ減っていくから、 q/θ 単位時間後には底をつくことになる。従って、 q/θ が発注間隔となる。1 単位の製品を 1 単位期間保持することによる費用（在庫保持費用）を h とすると、1 回の発注における総在庫費用は

$$h \times q(q/\theta)/2$$

となる。よって、1 回の発注による総費用は、これに発注費 K を加えて計算される。単位時間あたりの費用 $v(q)$ は、この総費用を発注間隔 q/θ で割ることにより

$$v(q) = \frac{K\theta}{q} + \frac{h}{2}q$$

と得られる。 $v(q)$ を最小にする発注量 q は方程式 $dv(q)/dq = 0$ の解

$$q^* = \sqrt{\frac{2K\theta}{h}}$$

で与えられる。これを EOQ という。このとき単位時間あたりの最小費用 v^* は

$$v^* = v(q^*) = \sqrt{2K\theta h},$$

発注間隔 t^* は

$$t^* = \frac{q^*}{\theta} = \sqrt{\frac{2K}{\theta h}}$$

となる。

6.2.2 確率的モデル：定期・定量発注方式

需要の不確実性に対して、過去のデータから推定されるその平均やバラツキに基づいて対処した、在庫管理方法が提案されている。この方法は大きく2つに分けられる：

- 定量発注（発注点）方式：在庫が一定（発注点）以下になったら定量を発注
- 定期発注方式：一定期間ごとに適切な量を発注

定量発注方式：問題は、発注を促す在庫水準（発注点）とそのときの発注量をどのように決めるかである。もし、毎期の需要が μ で一定しており、リードタイムも 0 であれば、経済的発注量は $q^* = \sqrt{\frac{2K\mu}{h}}$ となる。

ここで、リードタイムを τ と仮定する。このとき、発注は、その発注による納品がなされる時点よりも τ 日前の時点 t_0 でなされなければならない。この時点 t_0 はまたそれ以前に発注し、入荷した q^* 単位の在庫がちょうど $\tau\mu$ 単位に達する時点でもある。従って、 $\tau\mu$ 単位が発注点となる。

さらに、単位期間での需要が正規分布 $N(\mu, \sigma^2)$ に従うものとする（リードタイムは τ ）。この仮定のもとでは、リードタイム中の τ 日間における需要は平均 $\tau\mu$ 、分散 $\tau\sigma^2$ の正規分布に従うことになる。一回の発注あたりに許容される品切れの確率を α 以下にするように、発注点方式の発注点 s は次の式で与えられる。

$$s = \tau\mu + k_\alpha \sqrt{\tau}\sigma$$

ただし、 k_α は標準正規分布 $N(0, 1)$ の上側 $100\alpha\%$ 点とする。以上より、「在庫が発注点 s に達したら経済的発注量 q^* 単位を発注する」という発注方式が得られる。これは発注量が一定であることを強調して、定量発注方式と呼ばれる。

定期発注方式：ある一定の発注間隔 T を所与のものとして与え、各発注時点での発注量 q は将来の需要予測に基づいてその都度決めていくという発注方式である。この方式では、次の発注時点までの需要量の予測が大切になる。

品切れ損失を考慮する場合には、新聞売り子の問題とよばれるタイプが基本的なものとなる。これは「新聞スタンドで毎日売る新聞を何部仕入れるのが最適か」という問題である。売れ残りの新聞が多いと損失を招き、仕入れが少な過ぎると儲け損なう。毎日の売れ行きが確率的に変動するため、期待利益を最大にするように最適な仕入れ数が求められる。