

Karmarkarの新LP解法 (1)

刀根 薫

要 旨

線形計画法の新解法として登場してきた Karmarkar (米AT&T Bell 研究所)の方法について解説する。この方法はいわゆる多項式オーダーの解法に属する。1979年に Khachiyan(ソ連)によって発表された最初の多項式オーダーの解法(楕円体法)に比べてこの Karmarkar の方法のほうがはるかに優れていることは確かである。しかしそれが従来の単体法より良いかどうかについては、この原稿を書いている時点(1984年11月末)では不明である。その判定のためにはもっと多くの数値実験が必要である。またこの方法は多くの点で改良の余地を残していると思われる。なにしろ、ことは ORの最も重要なレポートリーLPに関することであり、その波紋は大きい。数理計画の研究者はこの新しいテーマをめぐるに当分、そがしい作業を余儀なくされるであろう。この解説は必ずしも Karmarkar の原論文に忠実にしたがったものではない。筆者なりの理解によってかなり大幅に書き直している部分があるし、また明らかに誤りと思われる部分は訂正しておいた。この点をあらかじめお断りしておきたい。ここでの解説では次のような項立てになる予定である。

1. 問題の背景
2. Karmarkar 法の基本
3. 諸定理
4. 仮定を外す方法
5. 予備的数値実験
6. 将来への展望(LPの高速化がもたらすもの)

1. 問題の背景

線形計画法 (linear programming=LP) の解法としては1947年に G. B. Dantzig によって発明された単体法 (simplex method) が唯一の実用的な方法として約40年間にわたって用いられてきた。その間、単体法は

ORを支える大黒柱として不動の地位を占めていることはもとより、最適化という数学の新分野を開拓し発展させる原動力となったのである。私見によれば、最適化法は今世紀を代表する数学のひとつである。そしてその動きを一貫して推進してきたものが LP であり単体法である。短期間にこれほど進歩した数学分野は少ないが、もとより社会の要請があればこそその進歩である。最近の調査によれば、コンピュータを用いる科学技術計算の中で LP 計算は最も使用頻度の高いものに属しており、その適用分野も社会全般におよぶ幅広さを示している。

しかし古くから知られているように単体法では計算量の上限が「変数や制約式の個数の多項式オーダー」で押さえられるという保証がない。ある特定のピボットリング規則に対して、可能解が構成する凸多面体のすべての頂点をたどらなければ最適解に到着できないような例題を作ることができ、そして凸多面体の頂点の数は変数や制約式の個数について組合せ的に増大するからである。したがって計算量の面からは指数オーダーの解法といわざるをえない。このことは単体法の欠点として指摘されてきた。しかし実用上はそのようなワーストケースがおこることはきわめて稀で、ある意味で許容しうる一多項式オーダーの一計算時間内で最適解が得られている。また理論的にも、単体法の平均的な計算量に関する研究が盛んになっており、S.Smale[1]をはじめとする最近の研究では単体法は平均的には多項式オーダーの解法であることが指摘されている。しかし平均値という概念は母集団として何を想定するかによっていろいろ変化するのでやや説得力に欠けるきらいがなきにしもあらずである。

いっぽう、単体法より良い方法を探す努力はさまざまな形で進められてきた。単体法の欠点のひとつは凸多面体の頂点をたどるので、多面体が最適点の近傍でフラットな場合、収束が遅くなることがある。そこで、多くの新解法と称するものは凸多面体の内側から最適点に近づくとこの考え方に立脚している。しかし一見よさそうに思われるそれらの方法は計算機実験の結果、単体法に遠く

およばないことが判明して幕となってきた。ところが1979年にソ連の数学者 Khachiyan が多項式オーダーの解法[2],[3]——楕円体法(ellipsoid method)——を発表し、LP には多項式オーダーの解法が存在しうることをはじめて世に示したのである。これはまさに画期的なできごとであり、波乱の幕明けとでもいうべき効果を世にもたらした。楕円体法自身は数値解法としては単体法に遠くおよばないことがやがて判明したが、多項式オーダーの解法が存在することを示した意義は大きく、今回の Bell 研究所の Karmarkar の研究もその延長上に位置するのである。

さて、Karmarkar の研究は1984年4月末に ACM の Symposium on Theory of Computing (Washington D.C.) で最初に発表されたようである。しかしその存在はきわめて少数の人にしか知られていなかった。それがアメリカはもとより世界各国に知らされたのは雑誌 Science の9月21日号の記事によってであった。その見出しは「難問題を解く速い方法」となっており、さらに「LP の新解法はあまり速いのでこの分野のエキスパートも驚嘆している」「5000変数の問題が IBM コードより50倍速く解けた」とつづく。

この記事は Science の記者 Gina Kolata 女史によるものであった。私はこの記事の存在を、たまたま滞在中のテキサス大学の A. Charnes 教授から9月24日に知らされたが、同時に「Kolata は前回の Khachiyan の発表の際にも単体法がもう不要になったような印象を与える記事を書き、さらに巡回セールスマン問題も解くことができるという読み違いをした」ことを知らされ、内容に関して十分注意する必要があるといわれた。その後 UCLA に立寄った際、A. Geoffrion 教授から Karmarkar が書いたと思われる小文 “Why in the new algorithm better than simplex method and ellipsoid method?” と肝心の論文の奇数頁だけという奇妙なものを手渡された。帰国後、10月11日、12日に博多で行なわれた第5回数値計画シンポジウムの際、速報として参加者に報告したが、それを聞いていた東大の今井浩氏がどこかで見たような気がするということで帰京後探し出してくれたのが、まさに前記 ACM Symposium の Proceedings に出ていた論文[4]

“A New Polynomial-Time Algorithm for Linear Programming”

であった。この後、在カリフォルニアの伊倉義郎氏、Karmarkar 自身、Maryland 大学の S. Gass 教授からも同じ論文が筆者宛送られてきた。この解説はその論文によるものである。ここに上記の方々に対して謝意を表する次第である。

なお、New York Times (1984年11月19日付第1面)によれば、Narendra Karmarkar 博士は数学者を父としてインドの Gwalior に生れ、Bombay 近くの Poona で育ち、米国の California Institute of Technology (Pasadena) で学んだのち、University of California at Berkeley で博士号を取得している。1983年に AT & T の Bell Laboratories (Murray Hill) に入社したそうである。28才とある。同じ記事の中で Dantzig 教授は “We have to separate theory from practice. It is a remarkable theoretical result and it has a lot of promise in it, but the results are not all in yet.” とコメントしている。

2. Karmarkar 法の基本

2.1 基本問題

次の問題を基本問題と呼ぶ。

目的関数 $Z = \mathbf{c}^T \mathbf{x} \rightarrow \text{最小化}$ 制約条件 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{o}$ $\sum_{i=1}^n x_i = 1$ $\mathbf{x} \geq \mathbf{o}$	(2.1)
---	-------

ここに $\mathbf{x} \in R^n$, \mathbf{A} は (m, n) 型定数行列, \mathbf{c}^T は定数ベクトル \mathbf{c} の転置を表す。

ただし基本問題は次のような仮定(特徴)を満足しているものとする。

- | |
|---|
| 仮定 1. Z の最小値は 0 である。
2. $\mathbf{x}^{(0)} > \mathbf{o}$ を満足する可能解が既知である。
3. $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{o}$ という同次式である。 |
|---|

これらの仮定は後ほどすべて除去される。

2.2 簡単な例題

Karmarkar 法の働きがどんなものであるかをわかってもらうために簡単な例題をまず示すことにしよう。

目的関数 $Z = x_1 + x_2 \rightarrow \text{最小化}$ 制約条件 $x_1 + x_2 + x_3 = 1$ $x_1, x_2, x_3 \geq 0$	(2.2)
---	-------

基本問題と比べると $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{o}$ に当る制約が欠けていることに注意してもらいたい。仮定 1. は満足されているし、仮定 2. の出発点としては

$$x_1^{(0)} = 0.5, x_2^{(0)} = 0.4, x_3^{(0)} = 0.1$$

を用いることにする。制約条件を満たす領域(可能領域)は図 2.1 の正三角形 ABC (単体 S) であり、最適点は

$$x_1 = 0, x_2 = 0, x_3 = 1 \text{ (点 } C)$$

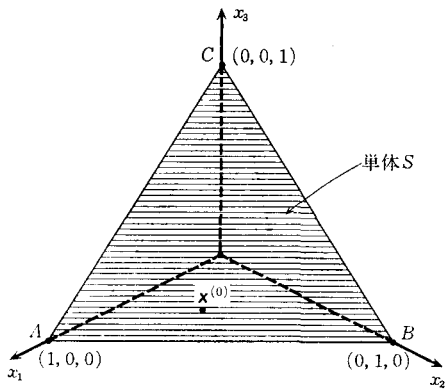


図 2.1 可能領域と出発点

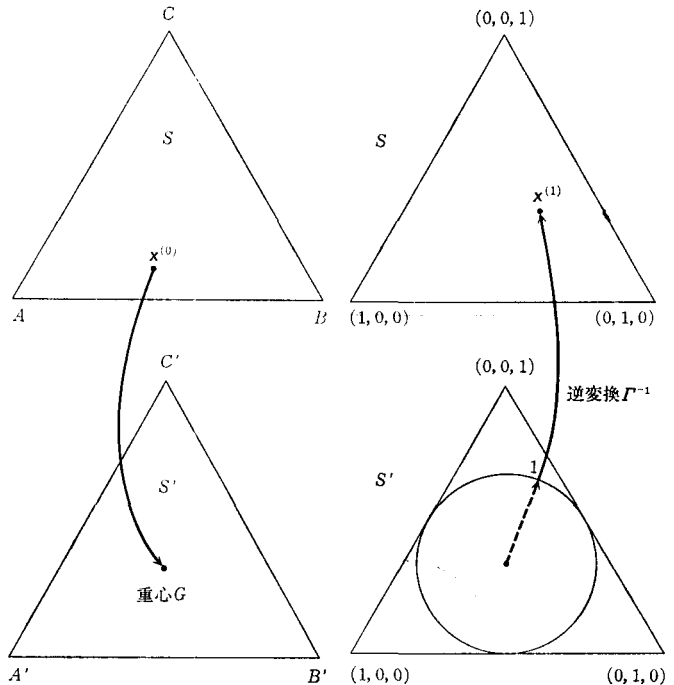


図 2.2 射影変換 T

図 2.3 内接円上での最小化と逆変換

である。

ここである点を $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)})$ 起点とした x 座標から x' 座標への射影変換 T を次のように定義する。

$$\begin{aligned} x_1' &= \frac{\frac{x_1}{x_1^{(0)}}}{\frac{x_1}{x_1^{(0)}} + \frac{x_2}{x_2^{(0)}} + \frac{x_3}{x_3^{(0)}}} \\ x_2' &= \frac{\frac{x_2}{x_2^{(0)}}}{\frac{x_1}{x_1^{(0)}} + \frac{x_2}{x_2^{(0)}} + \frac{x_3}{x_3^{(0)}}} \\ x_3' &= \frac{\frac{x_3}{x_3^{(0)}}}{\frac{x_1}{x_1^{(0)}} + \frac{x_2}{x_2^{(0)}} + \frac{x_3}{x_3^{(0)}}} \end{aligned} \quad (2.3)$$

この変換により x 空間の単体 S は x' 空間の単体 S' に移り、逆に S' から S へは次の逆変換 T^{-1} により移る (図 2.2)。

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{x_1^{(0)} x_1'}{x_1^{(0)} x_1' + x_2^{(0)} x_2' + x_3^{(0)} x_3'} \\ x_2 &= \frac{x_2^{(0)} x_2'}{x_1^{(0)} x_1' + x_2^{(0)} x_2' + x_3^{(0)} x_3'} \\ x_3 &= \frac{x_3^{(0)} x_3'}{x_1^{(0)} x_1' + x_2^{(0)} x_2' + x_3^{(0)} x_3'} \end{aligned} \quad (2.4)$$

変換 T, T^{-1} により単体 S と S' のあいだに 1 対 1 の対応が付き、

$$A \rightarrow A', \quad B \rightarrow B', \quad C \rightarrow C'$$

さらに点 $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)})$ には単体 S' の重心 $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$ が対応する。

また、この変換によって元の問題は x' 空間の問題として次のようになる。

$$\begin{aligned} \text{目的関数} \quad Z' &= \frac{0.5x_1' + 0.4x_2'}{0.5x_1' + 0.4x_2' + 0.1x_3'} \rightarrow \text{最小化} \\ \text{制約条件} \quad x_1' + x_2' + x_3' &= 1 \\ x_1', x_2', x_3' &\geq 0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

目的関数は分数式となるが、ここで分母を無視して分子 $0.5x_1' + 0.4x_2'$ (2.6)

を単体 S' の内接円上で最小化する。そのためには目的式の勾配方向 $(0.5, 0.4, 0)$ を単体 S' 上に直角に投影してその逆方向に進み内接円に交わる点を求めればよい (図 2.3 参照)。

その方法については後に述べるとして結果は

$$x_1' = 0.115, \quad x_2' = 0.224, \quad x_3' = 0.661$$

となる (図 2.3 の点 1)。

この点を逆変換 T^{-1} によって x 空間にもどす。

$$x_1^{(1)} = 0.270, \quad x_2^{(1)} = 0.420, \quad x_3^{(1)} = 0.310$$

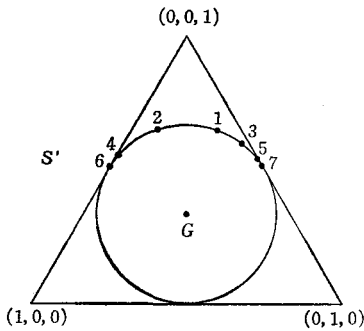
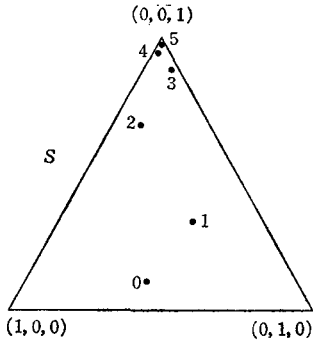


図 2.4 点列 $\{x^{(k)}\}$ の収束

を得る。次にこの点 $x^{(1)}$ を単体 S' の重心 $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$ に移す射影変換 ((2.3) 式で $x^{(0)}$ の代りに $x^{(1)}$ を用いる) を同じように行ない、内接円上で

$$0.27x_1' + 0.42x_2' \quad (\text{変換した目的関数の分子}) \quad (2.7)$$

を最小化する点を求める。その点は

$$x_1' = 0.279, \quad x_2' = 0.075, \quad x_3' = 0.645$$

である。それを逆変換で元にもどして

$$x_1^{(2)} = 0.246, \quad x_2^{(2)} = 0.103, \quad x_3^{(2)} = 0.651$$

を得る。このように

射影変換 → 内接円上での最小化 → 逆変換

をくりかえすと次のような点列が生じる。

x 空間	x' 空間
$x^{(0)} = (0.5, 0.4, 0.1)$	$x'^{(1)} = (0.115, 0.224, 0.661)$
$x^{(1)} = (0.270, 0.420, 0.310)$	$x'^{(2)} = (0.279, 0.075, 0.645)$
$x^{(2)} = (0.246, 0.103, 0.651)$	$x'^{(3)} = (0.031, 0.364, 0.605)$
$x^{(3)} = (0.017, 0.086, 0.897)$	$x'^{(4)} = (0.442, 0.006, 0.552)$
$x^{(4)} = (0.015, 0.001, 0.984)$	$x'^{(5)} = (0.001, 0.482, 0.517)$
$x^{(5)} = (0.000, 0.001, 0.999)$	$x'^{(6)} = (0.495, 0.000, 0.505)$
$x^{(6)} = (0.000, 0.000, 1.000)$	$x'^{(7)} = (0.000, 0.499, 0.501)$
$x^{(7)} = (0.000, 0.000, 1.000)$	

こうして $x^{(k)}$ は次第に最適点 $(0, 0, 1)$ に近づいてゆくこ

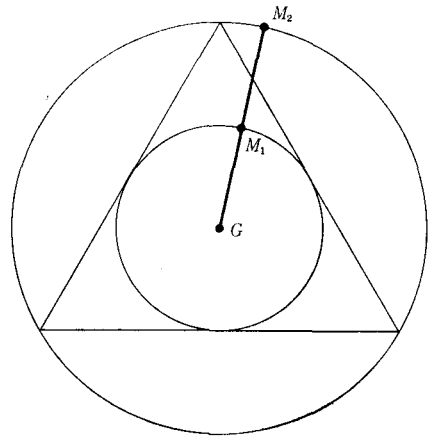


図 2.5 内接円と外接円

とがわかる。これが Karmarkar 法の発想の原点である。図 2.4 にその収束の様子を示す。 S' の円上ではかなり散らばっている点列が S 上では $C=(0, 0, 1)$ に収束することに注意してもらいたい。

さて、次に S' の内接円上の線形目的関数の最小化によって、重心 $(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})$ における目的関数値がどのくらい小さくなるかを考察してみよう。図 2.5 に単体 S' とその内接円、外接円を示す。いま、 S' 上での線形目的関数の最小値を f_S 、内接円 D 上での最小値を f_D 、外接円 E 上での最小値を f_E とする。また重心 G における関数値を f_G とする。

集合として

$$D \subset S' \subset E \quad (2.8)$$

であるから当然次式が成立する。

$$f_G \geq f_D \geq f_S \geq f_E \quad (2.9)$$

よって

$$0 \leq f_G - f_D \leq f_G - f_S \leq f_G - f_E \quad (2.10)$$

が成立するが、この最後の項 $f_G - f_E$ は、内接円の半径 r と外接円の半径 R の比を $\nu (=R/r)$ とすれば

$$f_G - f_E = \nu(f_G - f_D) \quad (2.11)$$

という等式で書きかえることができる。

なぜなら、図 2.5 で f_D と f_E を実現する点を M_1, M_2 とすれば、それらは目的関数の線形性から G と同一線分上にあり、その関数の落差は単純に半径の比に比例するからである。

よって

$$1 \geq \frac{f_G - f_D}{f_G - f_S} \geq \frac{1}{\nu}$$

であり

$$1 - \frac{f_G - f_D}{f_G - f_S} = \frac{f_D - f_S}{f_G - f_S} \leq 1 - \frac{1}{\nu} \quad (2.12)$$

となる。正三角形の場合 $n=2$ であり、また $f_S=0$ であることから

$$\frac{\text{内接円上での最小目的関数値}}{\text{重心における目的関数値}} \leq 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \quad (2.13)$$

という不等式を得る。こうして1回の最小化によって、線形目的関数値は半分以下になることがわかる。この操作をくりかえしてゆけば目的関数値は0に収束することが予想される。ただし上の考察は x' 空間上のことであって x 空間の話ではないが、後に示すように x' 空間上で線形目的関数が0に向うことは x 空間の元の目的関数も0に向うのである。

さて、これまで3次元空間で話を進めてきたが、これを n 次元空間に移すとどうなるだろうか。

単体 S, S' は

$$\begin{aligned} x_1 + \dots + x_n &= 1 & (S) \\ x'_1 + \dots + x'_n &= 1 & (S') \end{aligned} \quad (2.14)$$

となり、 S' の重心 G は

$$x'_1 = \dots = x'_n = \frac{1}{n} \quad (2.15)$$

である。重心 G を中心とし S' に内接する球を $B(G, r)$ とし、 G を中心とし S' を含む半径最小の球を $B(G, R)$ とすれば、それぞれの半径 r, R は次式により与えられる。

$$r = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)}} \quad R = \sqrt{\frac{n-1}{n}} \quad (2.16)$$

したがって内接球と外接球の半径の比は

$$v = \frac{R}{r} = n-1 \quad (2.17)$$

である。

3次元の場合と同様の考察により次の不等式を得る。

$$\frac{f_D - f_S}{f_G - f_S} \leq 1 - \frac{1}{n-1} \quad (2.18)$$

このことは1回の最小化により線形目的関数値が約 $\frac{1}{n}$ だけ相対的に減少することを示す。

$$\left(1 - \frac{1}{n}\right)^n \rightarrow e^{-1} = 0.3679$$

に注意すれば、 $O(n)$ 回の最小化によりある一定の量だけの減少が期待できる。よって $O(nL)$ 回の反復で目的関数は $2^{-O(nL)}$ に達するであろう。ここに L は精度に関連した定数である。

しかも1回当りの計算量——その大部分は目的関数の勾配を単体 S' 上に直交投影する計算が占める——は $O(n^{2.5}L)$ であることがわかるので、全体としての計算複雑度は

$$O(n^{3.5}L^2) \quad (2.19)$$

になって多項式オーダーの解法であることがわかるというのが Karmarkar 法の根拠である。ちなみに同じような見方をするならば、Khachiyan の楕円体法の計算複雑度は

$$O(n^6L^2) \quad (2.20)$$

である。

2.3 同次式の追加

基本問題 (2.1) には、制約として同次式

$$Ax = \mathbf{o} \quad (2.21)$$

が入っている。これに加わると今までの議論はどう変わるだろうか。仮定3より初期点 $x^{(0)}$ は

$$Ax^{(0)} = \mathbf{o} \quad (2.22)$$

を満足している。

ここで対角行列 D を次のように作る。

$$D = \begin{bmatrix} x_1^{(0)} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & x_n^{(0)} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

この記号を用いると射影変換 T, T^{-1} は次のように書くことができる。

$$T: x' = \frac{D^{-1}x}{c^T D^{-1}x} \quad (2.24)$$

$$T^{-1}: x = \frac{Dx'}{c^T Dx'} \quad (2.25)$$

ここに $c^T = (1, \dots, 1)$ とする。

さらに次の集合を定義する。

$$\Omega = \{x | Ax = \mathbf{o}\} \quad (\text{アフィン空間})$$

$$S = \{x | x \geq \mathbf{o}, \sum_{i=1}^n x_i = 1\} \quad (\text{単体})$$

$$\Omega' = \{x' | ADx' = \mathbf{o}\} \quad (\text{変換されたアフィン空間})$$

$$S' = \{x' | x' \geq \mathbf{o}, \sum_{i=1}^n x'_i = 1\} \quad (\text{単体})$$

これらの記号を用いるならば、基本問題の可能領域は $\Omega \cap S$ 、 T 変換された問題の可能領域は $\Omega' \cap S'$ であり $\Omega \cap S \leftrightarrow \Omega' \cap S'$ (2.26)

という1対1の対応がつく。そして $x^{(0)} \in \Omega \cap S$ は $\Omega' \cap S'$ の重心 $\mathbf{a}_0 = \left(\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right)$ に射影されることは容易に確かめることができる (図 2.6 参照)。

ここで S' の内接球 $B(\mathbf{a}_0, r)$ と外接球 $B(\mathbf{a}_0, R)$ を前と同じように定義する。そのとき

$$B(\mathbf{a}_0, r) \leq S' \leq B(\mathbf{a}_0, R)$$

であり、したがって次の包含関係が成立する。

$$B(\mathbf{a}_0, r) \cap \Omega' \leq S' \cap \Omega' \leq B(\mathbf{a}_0, R) \cap \Omega' \quad (2.27)$$

球 $B(\mathbf{a}_0, r)$ 、 $B(\mathbf{a}_0, R)$ とアフィン空間 Ω' との交わりは低次元の球 $B'(\mathbf{a}_0, r)$ 、 $B'(\mathbf{a}_0, R)$ となるが、 $\mathbf{a}_0 \in \Omega'$ であることから半径の大きさは変わらない。よって $S' \cap \Omega'$ 上の線形目的関数の最小値 f_S 、球 $B'(\mathbf{a}_0, r)$ 上の最小値 f_D 、重心 \mathbf{a}_0 での関数値 f_G のあいだには前と同じ

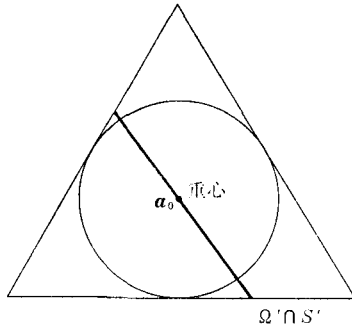
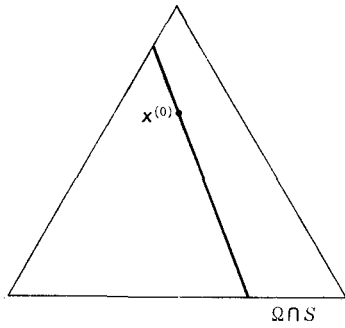


図 2.6 同次式の追加

不等式が成立する.

$$\frac{f_D - f_S}{f_G - f_S} \leq 1 - \frac{1}{n-1} \quad (2.28)$$

以上の考察より, 同次式 $Ax = 0$ の追加によっても, 収束率に関する議論は不変であることがわかる. ただし目的関数の勾配は $S' \cap \Omega'$ 上に直交投影する必要がある. また図 2.6 からもわかるように $B'(a_0, R)$ による評価はワーストケースであり, (2.28) の右辺は一般にはこの値より小さくなることが期待される.

2.4 基本問題の解法

(2.1)式で定義された基本問題を解くために点列 $x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(k)}, \dots$ を規則

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}) \quad (2.29)$$

により生成する. 一般に入力 $a = (a_1, \dots, a_n)$ から出力 $b = \phi(a)$ を得る手順を次に示す.

ステップ 1

$$B = \begin{bmatrix} AD \\ -c^T \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

とする.

ここに

$$D = \begin{bmatrix} a_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_n \end{bmatrix}, \quad c^T = (1, \dots, 1) \text{ とする.}$$

ステップ 2

$$c_p = [I - B^T(BB^T)^{-1}B] Dc \quad (2.31)$$

とする. (これは変換された目的関数の係数ベクトル Dc の $S' \cap \Omega'$ 上への直交投影である)

ステップ 3

$$\bar{c} = c_p / |c_p| \quad (\text{正規化}) \quad (2.32)$$

とする.

ステップ 4

$$b' = a_0 - \alpha r \bar{c} \quad (2.33)$$

とする.

ここに $a_0 = \left(\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right)^T$, $r = 1 / \sqrt{n(n-1)}$,

$$\alpha \in (0, 1) \quad .$$

ステップ 5

$$b = \frac{Db'}{c^T Db'} \quad (\text{逆変換}) \quad (2.34)$$

とする.

(注意) ステップ 4 で用いる定数 α を 1 にすれば内接円上の点になる. 前の例題ではそうしている. Kar-markar は $\alpha = 1/4$ とすることをすすめている. 筆者の経験では α を 1 に近くすると $x^{(k)}$ の系列が振動する場合がおこるが, 一般に収束は速い. α を小さくする理由は, 後に述べる収束性との関連による. 計算量の立場からはステップ 2 の (2.31) の計算が大部分を占める. この計算によって新しい点の実行可能性が保証される. またこの点列の収束判定基準については後に述べる.

参考文献

- [1] S.Smale, "On the average number of steps of the simplex method of linear programming" *Mathematical Programming* 27 (1983) 241-262
- [2] L.G. Khachiyan, "A polynomial algorithm in linear programming", *Doklady Academia Nauk SSSR* 244:S(1979)1093-1096, translated in *Soviet Mathematics Doklady* 20:1 (1979) 191-194
- [3] 伊理正夫, "線形計画法の計算複雑度", 第 1 回数理計画シンポジウム論文集, 1980
- [4] N.Karmarkar, "A new polynomial-time algorithm for linear programming", *Proceedings of 16th Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, Washington D.C., 1984