Vol.2012-MPS-90 No.14
2012/9/19

LP-Newton 法の考察とその改良

石津 祐馬[1,a)]　施 建明[1]

概要：本稿は，線形計画問題の解法として 2009 年に Fujishige が発案し, 論文にて発表した「LP-Newton 法」[4] の紹介と考察を行い, その解法において多面体の端点の生成するアルゴリズムの手法を述べたものである. また LP-newton 法の概要説明の際に , Wolfe の最小ノルムアルゴリズム [3] の概要説明なども行う.

1. 研究背景

最適化問題とは, 適当な空間 X の部分集合 S と X 上で定義された実数値関数 f が与えられた時 , f を最小化, あるいは最大化する解 $x \in S$ を求める問題である. 一般に f を目的関数 , S を許容領域,S を定める条件式を制約式 , S の要素を許容解という. 最適化問題の許容解の中で目的関数 f を最小化, または最大化するものを最適解という. 最適化問題において, 目的関数及び制約式が一次式（線形）であり, 制約式の本数が有限, また制約不等式が等号付きである問題を線形計画問題という. 線形計画問題は, 適用範囲の広さと効率的な解法の存在の両者の要素を満たすという観点から, 最適化問題の中で非常に重要な問題であると言える.

線形計画問題に対する最初の解法は,1974 年に G.B.Dantzig により提案された単体法がある. 単体法は, 実用的な解法として認知され, 十分大きな問題も解けることが知られている. しかし, この解法は入力サイズに関して指数的な時間が必要な場合があり, 多項式時間内に解が得られる解法であるかは未解決である.

多項式時間内で線形計画問題を解ける解法として , L.G.Khachian による楕円体法 [5] , N.Karmarkar による内点法などが提案された. 楕円体法は理論的な貢献は大きいが, 解法としては実用性が乏しいとされている. また内点法は, 非線形最適化で用いられている手法を利用しているところに特徴がある.

また Klee-Minty Cube [2] のような, ある特定の線形計画問題においては, 単体法よりも内点法の方が計算の効率性において上回ることが研究されている.

凸包などの幾何的対象の最適解を効率的に求めるアルゴリズムの研究もされていて, その中の一つに最小ノルムアルゴリズム [3] がある. このアルゴリズムは, ある次元の線形空間においての有限個の点集合 P について, 凸包 $C(P)$ の最小ユークリッドノルム $\mathrm{Nr}(C(P))$ を見つける問題である. 最小ノルムアルゴリズムのような技法を用いて, 単体法や内点法とは異なる解法が提案されている. 例としては LP-Newton 法 [4] がある. 内容としては「Zonotope」と呼ばれる多面集合上で線形計画問題が簡単に解けることを利用して, 最小ノルムアルゴリズムを基にした解法である.

本研究では, 線形計画問題の解法である LP-Newton 法 [4] について紹介と考察をし, その解法の改良案を述べたいと思う.

2. LP-Newton 法の考察

まず , LP-Newton 法内で用いられる最小ノルムアルゴリズムの概要の説明をする.

2.1 最小ノルムアルゴリズム

最小ノルムアルゴリズムの概要として , $\mathbb{R}^n$ の有限個の点集合 P が存在し, その凸包 $C(P)$ の最小ユークリッドノルム $\mathrm{Nr}(C(P))$ を見つける問題を考える.

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & ||x||^2 \\ \text{subject to} \quad & x = \sum_{p \in P} \lambda_p p \\ & \sum_{p \in P} \lambda_p = 1 \\ & \lambda_p \geq 0 \ \text{ for all } \ p \in P \end{aligned}$$

一般的に凸包とは, 凸結合で表わされる点 x によって形成される多面体である. 条件としては上記にある条件式を満たす時にのみ形成される. このように形成された凸包に対して, 原点から一番距離が短い点を算出する問題である.

LP-Newton 法では , Wolfe の最小ノルムアルゴリズム [4]

1 室蘭工業大学
Muroran Institute of Technology
a) yuma3270@gmail.com

© 2012 Information Processing Society of Japan

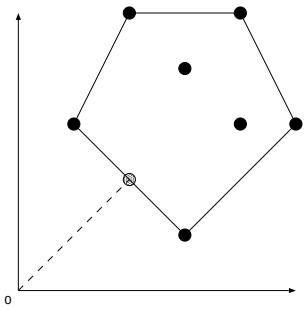

図 1 最小ノルムアルゴリズムのイメージ

を利用している. 以下に Wolfe の最小ノルムアルゴリズムの手順を示す.

Wolfe の最小ノルムアルゴリズムの手順

入力 : $\mathbb{R}^n$ 上の点 $p_i (i \in I)$ の有限の点集合 P

出力 : 点 p_i $(i \in I)$ の凸包上 $C(P)$ の最少ノルム点 z^*, 添字の部分集合 $J \subseteq I$, $z^* = \sum_{i \in J} \lambda_i p_i$ における $\sum_{i \in J} \lambda_i = 1$ であるような λ_i $(i \in J)$

Step 1 : P の任意の点 p を選択 , $S := p$, $\hat{z} := p$ とおく.

Step 2 : $\min\{\hat{z}^\top p \,|\, p \in P\}$ となるような P の点 $\hat{p}$ を求める. もし $\hat{z}^\top \hat{p} = \hat{z}^\top \hat{z}$ ならば , $z^* = \hat{z}$ を返り値として停止. そうでなければ $S := S \cup \hat{p}$ とおき Step 3 へ.

Step 3 : S の点のアフィン包上の最少ノルム点 y を求める. y が S の凸包の相対内点にあれば , $\hat{z} := y$ とおき Step 2 へ. それ以外は Step 4 へ.

Step 4 : S の凸包と , y と $\hat{z}$ を結ぶ線分 $[y, \hat{z}]$ との共通集合の中で , y に最も近い点を ω とする . $S' \subseteq S$ は ω が S' の凸包の相対内点にあるような唯一の部分集合であるとする. $S := S'$, $\hat{z}$:=ω とおき , Step 3 へ.

(END)

Step 2 と Step 3 のアルゴリズムのサイクルをメジャーサイクルといい , Step 3 と Step 4 のサイクルをマイマーサイクルという. アルゴリズムの動作中, メジャーサイクルは単一の S のサイズが増加するし, マイナーサイクルは減少する.

Step 3 において, 最小ノルム点 y は, 集合 $S = \{p_i \,|\, i \in I\}$ 上で $\sum_{i \in I} \mu_i = 1$ のとき $y = \sum_{i \in I} \mu_i p_i$ と表わされる . y が S の凸包の相対内点にあるということは, すべての $i \in I$ で $\mu_i > 0$ である. またこのとき, 集合 S はアフィン独立であると思われる . Step 4 では , $\hat{z}$ と y の 2 つはそれぞれ $\hat{z} = \sum_{i \in I} \lambda_i p_i$ と $y = \sum_{i \in I} \mu_i p_i$ と表わされる. この時, 点 ω はすべての $i \in I$ で , $\omega = (1-\beta)\hat{z} + \beta y$, $(1-\beta)\lambda_i + \beta \mu_i$, また β はできるだけ大きくするように設定することによって決定される.

図 2 においての具体的な挙動

(1) (Step 1) まず凸包 $C(P)$ から初期点 $\hat{z} := p^1$ を選択し, 集合 $S := \{p^1\}$ と定義する.

(2) (Step 2) 最小内積 $\min\{\hat{z}^\top p \,|\, p \in P\}$ となるような P の点 $\hat{p}$ を求める. 図 2 では , $\hat{p} := p^4$ である. さらに , 集合 S を再定義し , $S := \{p^1 , p^4\}$ とする.

(3) (Step 3) 集合 $S := \{p^1 , p^4\}$ の点のアフィン包上の最少ノルム点 y を求める. y が S の凸包の相対内点ではないので , Step 4 へ.

(4) (Step 4) 集合 $S := \{p^1 , p^4\}$ の凸包と , y と $\hat{z} = p^1$ を結ぶ線分 $[y , \hat{z}]$ との共通集合の中で , y に最も近い点を ω とし, この図では $\omega = p^4$ とする. S の部分集合 $S' = \{p^4\}$ とし , $S := S' = \{p^4\}$, $\hat{z} := \omega = p^4$ とし , Step 3 へ.

(5) (Step 3) 集合 $S := \{p^4\}$ の点のアフィン包上の最少ノルム点 y を求める. 図 2 では $y := p^4$ である. y が S の凸包の相対内点であるので , $\hat{z} := y = p^4$ として , Step 2 へ.

(6) (Step 2) 最小内積 $\min\{\hat{z}^\top p \,|\, p \in P\}$ となるような P の点 $\hat{p}$ を求める. 図 2 では , $\hat{p} := p^3$ である. また集合 $S := \{p^3 , p^4\}$ と再定義する.

(7) (Step 3) 集合 $S := \{p^3 , p^4\}$ の点のアフィン包上の最少ノルム点 y を求める. y が S の凸包の相対内点であるので , $\hat{z} := y$ とし , Step 2 へ.

(8) (Step 2) 最小内積 $\min\{\hat{z}^\top p \,|\, p \in P\}$ となるような P の点 $\hat{p}$ を求める. 図 2 では , $\hat{p} := p^3$, p^4 でり . それぞれの $\hat{z}^\top \hat{p} = \hat{z}^\top \hat{z}$ が成り立つので , $z^* = \hat{z}$ として終了.

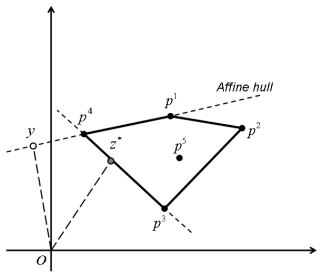

図 2 Wolfe の最小ノルムアルゴリズムの挙動を表わした図

2.2 LP-Newton 法

この節では , Fujishige 等の LP-Newton 法 [4] を紹介する. 以下の線形計画問題を考える：

$$\text{(LP)}' \quad \begin{array}{ll} \text{maximize} & c^\top x \\ \text{subject to} & Ax = b, l \le x \le u \end{array}$$

ただし , $x \in \mathbb{R}^n$ は決定変数,$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$,$c \in \mathbb{R}^n$,$b \in \mathbb{R}^n$ は定数行列・ベクトルとし,$l, u \in \mathbb{R}^n$ は $l \le u$ を満たす定数

ベクトルである.

この線形計画問題に対して,「Zonotope」というものを定義する. Zonotope とは単位超立方体を線形変換したものである.

ここでは, $\bar{A}=\begin{pmatrix} A \\ c^\top \end{pmatrix}$ とし,

$\bar{Z}=\left\{ z \middle| z=\bar{A}x=\begin{pmatrix} Ax \\ c^\top x \end{pmatrix},\ l \le x \le u \right\}$ となる Zonotope を定義する. すると, 上記の線形計画問題は以下の問題に帰着される.

$$\begin{aligned} \text{(LP)}' \quad \text{maximize} \quad & \gamma \\ \text{subject to} \quad & \begin{pmatrix} b \\ \gamma \end{pmatrix} \in \bar{Z} \end{aligned} \tag{1}$$

だだし, $\gamma \in \mathbb{R}^n$ は決定変数とする.

これで m 変数の問題が 1 変数の問題に帰着される. そして以下のように制約条件を再定義し,

$L=\left\{ \begin{pmatrix} b \\ \gamma \end{pmatrix} \middle| \gamma \in \mathbb{R} \right\}$ とすると, L は第 $m+1$ 軸と平行な直線となり, この線形計画問題は,「Zonotope $\bar{Z}$ と直線 L の共通集合上で, 第 $m+1$ 軸の値が最大となる点を見つける問題」となる.

その際に, 最小ノルムアルゴリズムを適用していき目標の解を導く. また $\bar{c} \in \mathbb{R}^{m+1}$ が与えられた時, Zonotope 上で $\bar{c}^\top z$ を最大化する線形計画問題は容易に解くことができる. 理由としては, 以下の線形計画問題考えることで示すことができる.

$$\begin{aligned} \text{(LP}_\text{z}\text{)} \ \text{maximize} \quad & \bar{c}^\top z \\ \text{subject to} \quad & z \in \bar{Z} \end{aligned} \tag{2}$$

このとき, 目的関数 $\bar{c}^\top z$ は $\bar{c}^\top \bar{A}x$ として扱うことができ, 最適解 x^* は, 以下の条件で簡単に解くことができる.

$$x_j^* = \begin{cases} u_j & (\bar{c}^\top \bar{a}^j > 0) \\ l_j & (\text{otherwise}) \end{cases} \ (j=1,\ldots,n), \tag{3}$$

$\bar{a}^j$ とは行列 $\bar{A}$ の j 番目の列ベクトルである.
このようにして最適解 x^* を求めることにより Zonotope 上での最適解 $z^*=Ax^*$ が得られる. ゆえに, Zonotope 上で $\bar{c}^\top z$ を最大化する線形計画問題は容易に解くことができる.

2.3 LP-Newton Method の挙動

具体的にある線形計画問題に LP-Newton Method を用いて, どのような挙動を成すか図を用いて述べる.

直線 L 上に現れる各々の点を $\bar{b} := (b^\top, \gamma)^\top$ と定義し, 超平面 H_z を次のように定義するものとする.

$$(\bar{b}-z)^\top (y-z) = 0$$

y は $\mathbb{R}^{n+1}$ 上の変数ベクトルである.

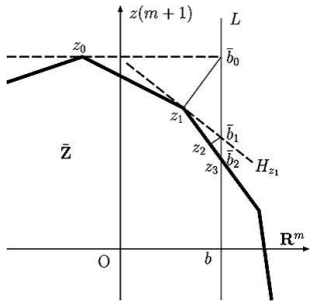

図 3 LP-Newton Method の挙動を表わした図

図 3 においての具体的な挙動

(1) $\bar{Z}$ 上で $z(m+1)$ 軸の値が最大の z_0 を初期点として選び, 直線 L に射影し, $\bar{b}_0$ を得る.
(2) $\bar{b}_0$ とのノルムが最小となる点 z_1 を求める.
(3) $\bar{b}_0$ と z_1 から超平面 H_{z_1} を求め, H_{z_1} と L との交点を $\bar{b}_1$ とする.
(4) $\bar{b}_1$ とのノルムが最小となる点 z_2 を求める.
(5) $\bar{b}_1$ と z_2 から超平面 H_{z_2} を求め, H_{z_2} と L との交点を $\bar{b}_2$ とする.
(6) $\bar{b}_2$ とのノルムが最小となる点 z_3 を求める.
(7) $z_3=\bar{b}_2$ となり, L と $\bar{Z}$ の交点のうち $(m+1)$ 次の値が最大となる点に到達したため終了する.

3. LP-Newton Method の改良案

LP-Newton 法の挙動において疑問点がある. それは最小ノルムアルゴリズムの適用についてである. 最小ノルムアルゴリズムは点の情報のみに対して働くアルゴリズムであるが, Zonotope の形状は具体的には表現するのは難しく, いかに Zonotope の各々の頂点の情報を効率良く得ていくことかを考えるべきである. ただし上記で述べた通り, Zonotope 上で $\bar{c}^\top z$ を最小化, 最大化する線形計画問題は定義式の内容からも容易に解くことができる [4]. よって, その最適化に対応した最適解 z^* を算出可能であり, それが Zonotope の頂点の情報となる. 既存の解法との変更点としては, $\bar{b}$ が算出された際に, 分かっている頂点の点集合に対して最小ノルムアルゴリズムを適用させる. そして, 算出された最小ノルム解を y としたとき, $\lambda=\bar{b}-y$ として, $\lambda^\top z$ の最大化を考え, 最適解 z^* を得ていく. さらに, その際に生成される超平面 H と直線 L との交点を $\bar{b}$ として更新する. これらの手順を繰り返して, 最終的には Zonotope $\bar{Z}$ と直線 L の共通集合上で、第 $m+1$ 軸の値が最大となる点を見つける. 終了条件については, 曖昧さがあり, 詳しい説明は省くとする. 次に図を用いた詳しい挙動説明をしたいと思う.

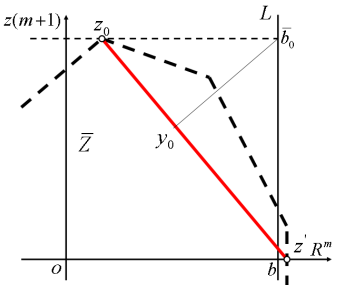

図 4 挙動 1

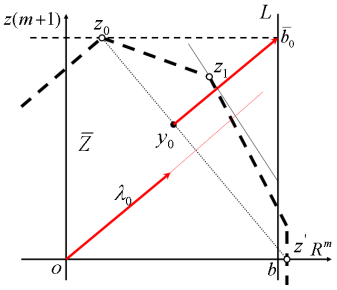

図 5 挙動 2

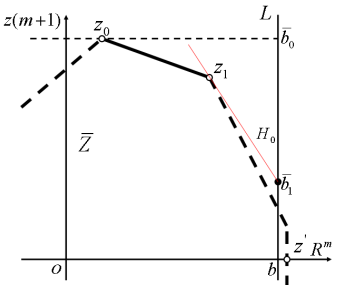

図 6 挙動 3

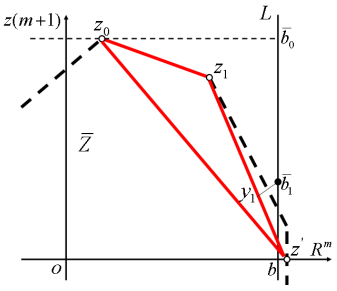

図 7 挙動 4

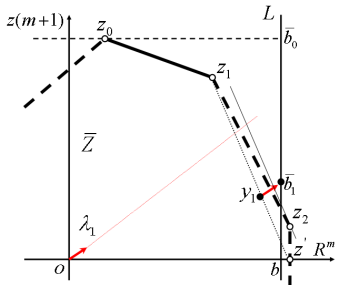

図 8 挙動 5

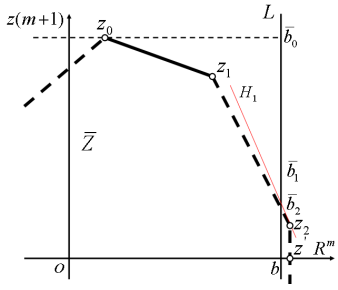

図 9 挙動 6

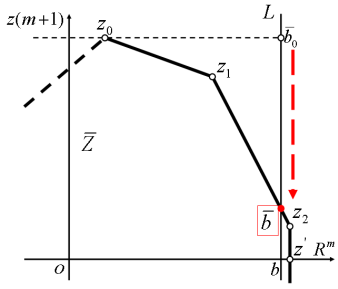

図 10 挙動 7

上記の図においての具体的な挙動

(1) $\bar{Z}$ 上で $z(m+1)$ 軸の値が最大の点 z_0 と最小の点 z' を算出し, 点集合 $S := \{z_0, z'\}$ を定める. 点 z_0 から直線 L に対して射影した点を $\bar{b}_0$ とする. そして, $\bar{b}_0$ と点集合 $S := \{z_0, z'\}$ との最小ノルム点 y_0 を算出.[図 4]

(2) $\lambda_0 = \bar{b}_0 - y_0$ として, $\lambda_0^\top z$ の最大化を考え, その最適解 $z^* = z_1$ を得る. そして点集合 $S := \{z_0, z', z_1\}$ として更新.[図 5]

(3) 超平面 H_0 を生成し, H_0 と直線 L との交点を $\bar{b}_1$ とする.[図 6]

(4) $\bar{b}_0$ と点集合 $S := \{z_0, z', z_1\}$ との最小ノルム点 y_1 を算出.[図 7]

(5) $\lambda_1 = \bar{b}_1 - y_1$ として, $\lambda_1^\top z$ の最大化を考え, その最適解 $z^* = z_2$ を得る. そして点集合 $S := \{z_0, z', z_1, z_2\}$ として更新. [図 8]

(6) 超平面 H_1 を生成し, H_1 と直線 L との交点を $\bar{b}_2$ とする.[図 9]

(7) 繰り返し上記で示した手順を踏んで $\bar{b}$ を更新していき, 値が変わらなくなるまで計算し, その値を「Zonotope$\bar{Z}$ と直線 L の共通集合上で, 第 $m+1$ 軸の値が最大となる点」とする. この図においては $\bar{b}$ とする.[図 10]

© 2012 Information Processing Society of Japan

3.1 計算機実験

現在, 改良案に対して計算機実験を行うためにプログラム作成を行っている．プログラム作成および実装の環境は, MATLAB バージョン 6.5.1 でリリース年は 2003 年のものである．また使用計算機のスペックは, CPU 1.6GHz とメモリ 1024MB の計算機である．プログラムだが, 現在作成中である.

4. 今後の研究の方針

今後の研究の方針として, まず改良案のプログラムの作成を完了させ, 既存の LP-Newton 法との比較を行う．そして, 別の線形計画問題の解法, 具体的には, 単体法, 内点法などとも比較し, 考察していく. さらに, 単体法, 内点法, 既存の LP-Newton 法, 改良案の LP-Newton 法に対して,Klee-Minty の線形計画問題の例題を適用させ, それぞれの解法でどのような作用があるかを考察していきたいと思う.

5. 備考

5.1 数学的準備 [1]

5.1.1 記号

- $\mathbb{R}^n \stackrel{\text{def}}{=} n$ 次元実線形空間
- $S \cup T \stackrel{\text{def}}{=} \{s \,|\, s \in S$ または $s \in T\}$
- $S \cap T \stackrel{\text{def}}{=} \{s \,|\, s \in S$ かつ $s \in T\}$
- $c^\top x \stackrel{\text{def}}{=} c$ と x の内積 $\langle c, x\rangle$
- $||x|| \stackrel{\text{def}}{=}$ ベクトルの長さ (ノルム)

5.1.2 内積

この原稿では内積を $c^\top x$ などと表わす. ベクトル c とベクトル x との間の内積計算の際に用いる．また, $c^\top x$ は次のような式でも表わせる.

$$c^\top x = ||c|| \cdot ||x|| \cos\alpha$$

α はベクトル c とベクトル x からなる角度を表わしている. この式は, Wolfe の最小ノルムアルゴリズムの終了条件の計算の理論として用いる.

5.1.3 線形結合, アフィン結合, 凸結合

線形結合 有限な k 個のベクトル $x^1, \ldots, x^k \in \mathbb{R}^n$ および実数 $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ に対して, 次のように表わされるベクトル

$$x \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{j=1}^{k} \lambda_j x^j \tag{4}$$

を $x^1, \ldots, x^k$ の線形結合 (liner combination) と呼ぶ。

非負結合 線形結合において係数 $\lambda_1, \ldots, \lambda_k \in \mathbb{R}$ が

$$\lambda_j \geq 0 \ (j = 1, \ldots, k) \tag{5}$$

を満たすとき (5) において等号を許す場合非負結合と呼ぶ.

アフィン結合 線形結合において係数 $\lambda_1, \ldots, \lambda_k \in \mathbb{R}$ が

$$\sum_{j=1}^{k} \lambda_j = 1 \tag{6}$$

を満たすとき (4) で表わされる x を $x^1, \ldots, x^k$ のアフィン結合 (affine combination) と呼ぶ.

凸結合 線形結合において係数 $\lambda_1, \ldots, \lambda_k \in \mathbb{R}$ が (5), (6) を満たすとき, (4) で表わされる x を $x^1, \ldots, x^k$ の凸結合と呼ぶ.

5.1.4 アフィン包, 凸包

アフィン包 集合 $F \in \mathbb{R}^n$ に対して, F の有限個の点のアフィン結合で表わせるベクトル全体の集合を F のアフィン包 (affine hull) と呼ぶ.

凸包 集合 $F \in \mathbb{R}^n$ に対して, F の有限個の点の凸結合で表わせるベクトル全体の集合を F の凸包 (convex hull) と呼ぶ.

5.1.5 超平面, 半空間

超平面 超平面 H は一般的に次のように定義される.

$$H(p, \alpha) = \{x \,|\, p^\top x = \alpha\}$$

$p \in \mathbb{R}^n$ は非ゼロのベクトルで, α はスカラーである. ベクトル p は超平面の法線ベクトルと呼ばれる.

半空間 半空間は一般的に次のように定義される.

$$H^+ = H^+(p, \alpha) = \{x : p^\top x \geq \alpha\}$$
$$H^- = H^-(p, \alpha) = \{x : p^\top x \leq \alpha\}$$

超平面を境界として, 2 つの空間ができる. その際に, 上記の式を満たす x が存在する領域のことを半空間という. ちなみに, (7) をみたす x は超平面上に存在する.

参考文献

[1] 田村朋久・松村正和:「最適化法」, 共立出版 196-199 . (2002)
[2] A.Deza , E.Nematollahi , T.Terlaky. : How good are interior point methods? Klee-Minty cubes tighten interation-complexity bounds. (2008)
[3] P. Wolfe : Finding the nearest point in a polytope. Mathematical Programming 11 128-149. (1976)
[4] S. Fujishige, T. Hayashi, K. Yamashita and U. Zimmermann : Zonotopes and the LP-Newton method, *Optimization and Engineering* 10, 193-205. (2009)
[5] M.Grotschel , L.Lovasz and A.Schrijver : The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization , *COMBINATORICA* 1, 169-197. (1981)

© 2012 Information Processing Society of Japan