2.6 双対定理

LP の標準形

$$\text{(主問題)} \begin{cases} \text{最小化：} & \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{条件：} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \end{cases}$$

$\boldsymbol{x}$: 主変数

に対する双対問題は以下の通りである

$$\text{(双対問題)} \begin{cases} \text{最大化：} & \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{y} \\ \text{条件：} & \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{s} = \boldsymbol{c} \\ & \boldsymbol{s} \geq \boldsymbol{0} \end{cases}$$

$\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{s}$: 双対変数

定理 1 (弱双対定理)

$\bar{\boldsymbol{x}}$ と $\bar{\boldsymbol{y}}$ がそれぞれ主問題と双対問題の実行可能解であるならば

$$\boldsymbol{c}^T\bar{\boldsymbol{x}} \geq \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{y}$$

が成り立つ．

証明

$\bar{\boldsymbol{x}}$, $\bar{\boldsymbol{y}}$がそれぞれ実行可能解なので $\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b}$, $\bar{\boldsymbol{x}} \geq \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{A}^T\bar{\boldsymbol{y}} \leq \boldsymbol{c}$を満たす．従って，

$$\boldsymbol{c}^T\bar{\boldsymbol{x}} \geq (\boldsymbol{A}^T\bar{\boldsymbol{y}})^T\bar{\boldsymbol{x}} = \bar{\boldsymbol{y}}^T(\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}}) = \bar{\boldsymbol{y}}^T\boldsymbol{b}$$

が成り立つ． □

系2

(1) 主問題の実行可能解 $\hat{x}$ と双対問題の実行可能解 $\hat{y}$ に対して $c^T\hat{x} = b^T\hat{y}$ が成り立つならば，$\hat{x}$ と $\hat{y}$ はそれぞれ主問題，双対問題の最適解になる．

(2) 主問題の目的関数が下に有界でない (すなわち $-\infty$ になる) か，あるいは双対問題の目的関数が上に有界でない (すなわち $+\infty$ になる) ならば，他方の問題は実行可能ではない．

証明

(1) 主問題の任意の実行可能解 $\bar{x}$ をもってきたとする．弱双対定理と系の仮定より $c^T\bar{x} \geq b^T\hat{y} = c^T\hat{x}$ が成り立つので $\hat{x}$ が最適解になる．同様に $\hat{y}$ が双対問題の最適解に成ることが言える．

(2) 主問題の目的関数が下に有界でないと仮定する．すると $c^T\bar{x_k} \to -\infty$ となるような主問題の実行可能解からなる点列 $\{\bar{x_k}\}$ が存在する。双対問題に実行可能解 $\bar{y}$ が存在すると仮定すれば，弱双対定理より $c^T\bar{x_k} \geq b^T\bar{y}$ となり矛盾が起こる．同様に双対問題の目的関数が上に有界でない場合も証明できる． □

定理 3 (双対定理)

(1) 主問題が最適解をもつならば，双対問題も最適解をもち，それぞれの最適値は等しい．

(2) 主問題および双対問題がともに実行可能解をもつならば，両方とも最適解をもち，それぞれの最適値は一致する

証明
[矢部 2006] などを参照． □

これらの結果から線形計画問題の主問題と双対問題の実行可能性と最適値の関係が次のようにまとめられる．

双対問題 \ 主問題	実行可能な解が有る	実行可能な解が無い
実行可能な解が有る	$\boldsymbol{c}^T\hat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b}^T\hat{\boldsymbol{y}}$	$+\infty$
実行可能な解が無い	$-\infty$	ありえない

2.7 最適性条件

$$
\text{(主問題)} \begin{cases} \text{最小化：} & \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{条件：} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \end{cases}
$$

$$
\text{(双対問題)} \begin{cases} \text{最大化：} & \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{y} \\ \text{条件：} & \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{s} = \boldsymbol{c} \\ & \boldsymbol{s} \geq \boldsymbol{0} \end{cases}
$$

Karush-Kuhn-Tucker 最適性条件 (KKT 条件)

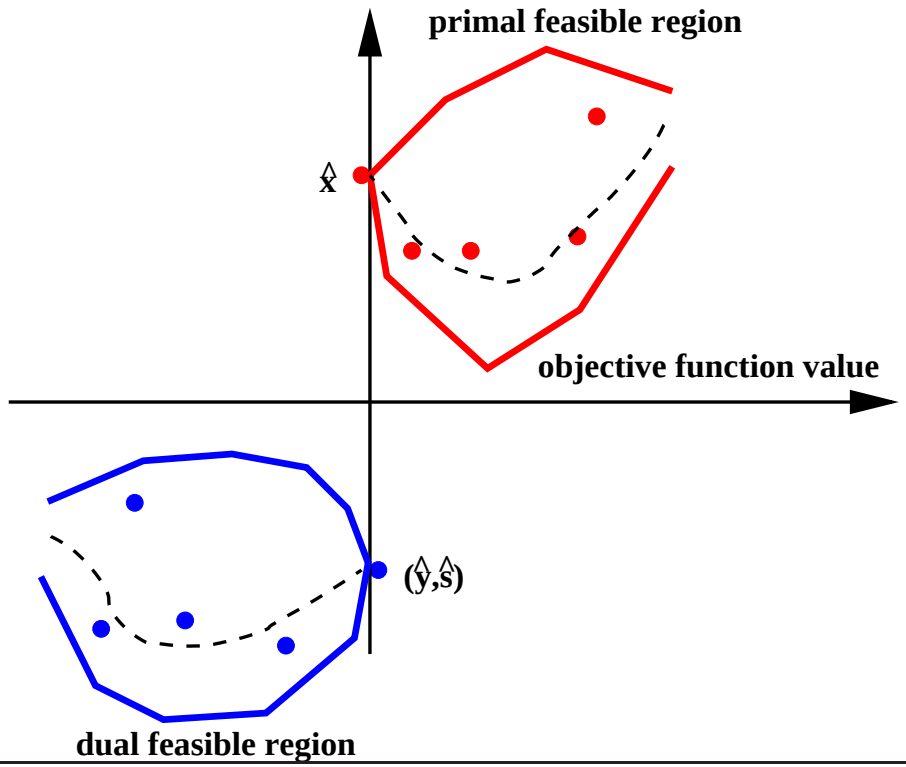
$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\
&\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{s} = \boldsymbol{c} \\
&\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0}, \ \ \boldsymbol{s} \geq \boldsymbol{0} \\
&x_i s_i = 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, n
\end{aligned}
$$

- つまり，$(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}}, \hat{\boldsymbol{s}}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ が KKT 条件を満たしているのならば $\hat{\boldsymbol{x}}$ は主問題の最適解であり，$(\hat{\boldsymbol{y}}, \hat{\boldsymbol{s}})$ は双対問題の最適解である．

2.8 内点法(Interior-Point Method)

- 単体法については触れない．[矢部2006]等を参照．
- 内点法の参考文献としては[矢部2006, 小島2001, WRIGHT1997]等を参照．
- 内点法にはいくつものヴァリエーションがある
  - Karmarkar法
  - アフィンスケーリング法
  - 解析的中心追跡法
  - 主双対内点法
    - パス追跡法
    - ポテンシャル減少法
    - Mehrotraの予測子・修正子法
    - 非実行可能点列内点法
    - *etc.*
- ここでは現在主流となっている非実行可能点列主双対パス追跡Mehrotraの予測子・修正子内点法を主に取りあげる

2.8.1 概要



仮定

$\mathrm{rank}(A) = m$
(full rank, A の行は線形独立)

$$
\text{中心パス} \equiv \mathcal{C} = \left\{ (x, y, s) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : \begin{array}{ll} Ax = b & \\ A^T y + s = c & \\ x > 0, \ \ s > 0 & \\ x_i s_i = \mu & (i = 1, 2, \ldots, n) \\ \mu > 0 & \end{array} \right\}
$$

- 中心パスを制限付き Newton 法を用いて数値的に追跡して最適解を求める.

2.8.2 中心パス

Karush-Kuhn-Tucker 最適性条件 (KKT 条件)

$$\boxed{\begin{array}{ll} Ax = b & \\ A^T y + s = c & \\ x \geq 0,\ \ s \geq 0 & \\ x_i s_i = 0, & (i = 1, 2, \ldots, n) \end{array}}$$

実行可能解の集合

$$\boxed{\mathcal{F} = \left\{ (x, y, s) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : \begin{array}{l} Ax = b \\ A^T y + s = c \\ x \geq 0,\ \ s \geq 0 \end{array} \right\}}$$

実行可能内点の集合

$$\boxed{\mathcal{F}^0 = \left\{ (x, y, s) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : \begin{array}{l} Ax = b \\ A^T y + s = c \\ x > 0,\ \ s > 0 \end{array} \right\}}$$

- $\mu > 0$ に対して凸集合 $\boxed{\mathcal{F}(\mu) = \left\{ (x, y, s) \in \mathcal{F} : \ \frac{x^T s}{n} = \mu \right\}}$

  の解析的中心 $(x(\mu), y(\mu), s(\mu))$ は以下の最適化問題の唯一の解である

$$\begin{cases} \text{最小化：} & -\sum_{i=1}^n (\log x_i + \log s_i) \\ \text{条件：} & Ax = b,\ \ A^T y + s = c,\ \ \frac{x^T s}{n} = \mu,\ \ x > 0, s > 0 \end{cases}$$

- $\mu > 0$ に対して

凸集合 $\boxed{\mathcal{F}(\mu) = \left\{(x, y, s) \in \mathcal{F} : \ \frac{x^T s}{n} = \mu\right\}}$

の解析的中心 $(x(\mu), y(\mu), s(\mu))$ はまた以下の等式不等式系を満たす唯一の解でもある

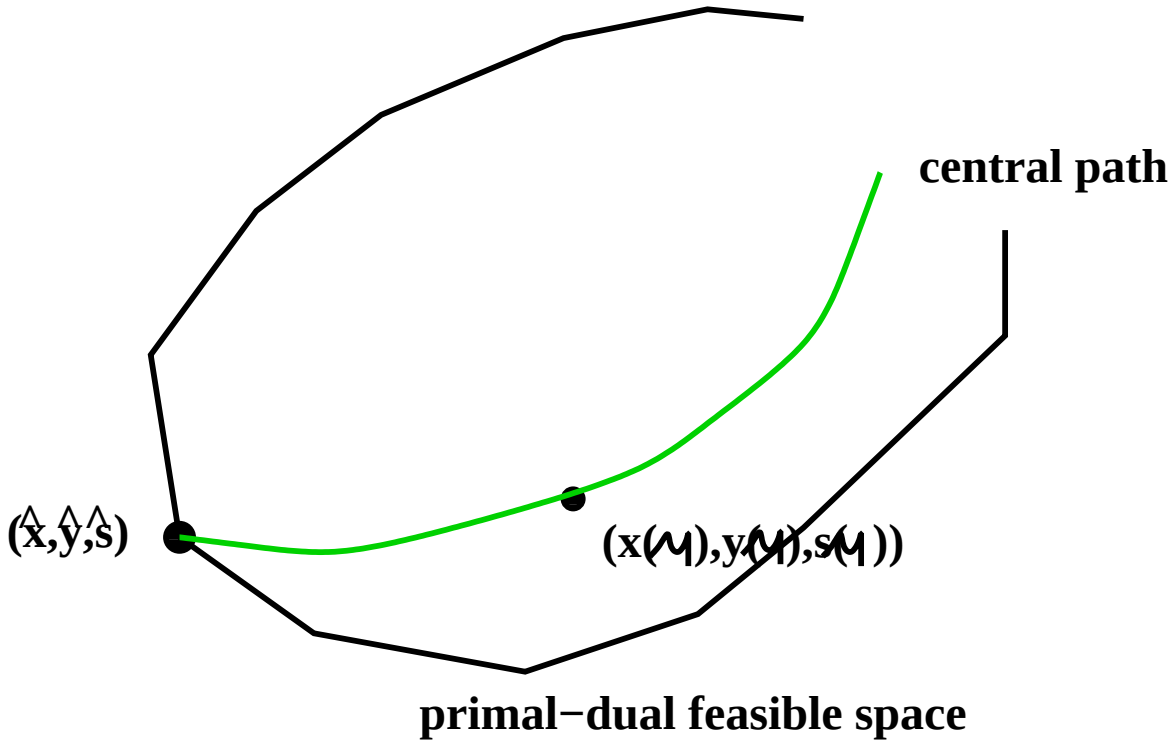
$$\boxed{\begin{cases} Ax - b = 0 \\ A^T y + s - c = 0 \\ x > 0, s > 0 \\ x_i s_i - \mu = 0, \ i = 1, 2, \ldots, n \end{cases}}$$

- $\mathcal{F}(0)$ は線形計画問題の解集合と一致する.

さらに $(x(\mu), y(\mu), s(\mu))$ の集合は中心パスと呼ばれる.

$$\boxed{\begin{aligned} \mathcal{C} &= \{(x(\mu), y(\mu), s(\mu)) : \mu > 0\} \\ &= \left\{(x, y, s) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : \begin{array}{l} Ax = b, \ A^T y + s = c, \ x > 0, \ s > 0, \\ x_i s_i = \mu, \ (i = 1, 2, \ldots, n), \ \mu > 0 \end{array} \right\} \end{aligned}}$$

- 中心パスは実行可能内点の集合において滑らかなパスを形成している.



中心パス

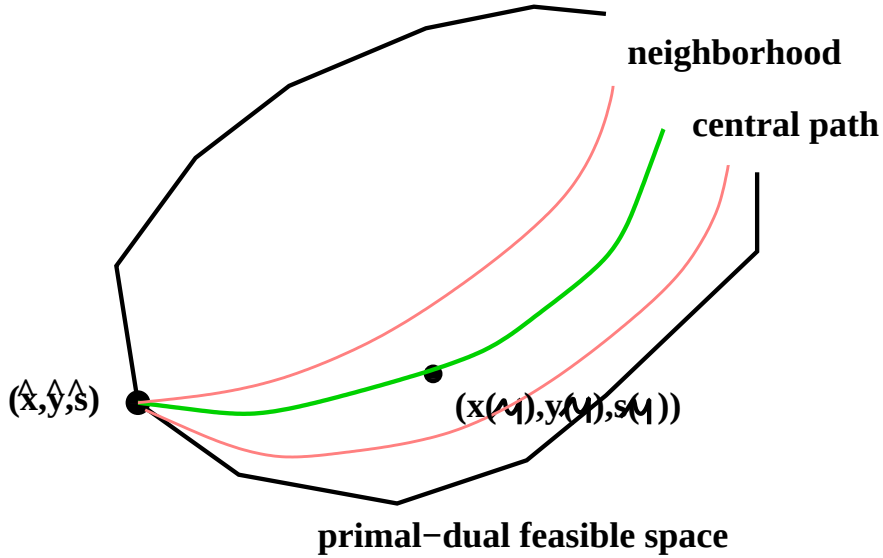
$$
\begin{aligned}
\mathcal{C} &= \{(x(\mu), y(\mu), s(\mu)) : \mu > 0\} \\
&= \left\{ (x, y, s) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n : \begin{array}{l} Ax = b,\ A^T y + s = c,\ x > 0,\ s > 0, \\ x_i s_i = \mu,\ (i = 1, 2, \ldots, n),\ \mu > 0 \end{array} \right\}
\end{aligned}
$$

2.8.3 近傍

定数 $\beta \in [0,1]$ から中心パスの近傍を

$$\mathcal{N}(\beta) = \left\{ (x,y,s) \in \mathcal{F}^0 : \ x_i s_i \geq (1-\beta)\mu, \ \mu = \frac{x^T s}{n} \right\}$$

と定義する．



- $\beta = 0$ の時に，近傍 $\mathcal{N}(0)$ は中心パスと一致する
- $\beta = 1$ の時に，実行可能内点の集合と一致する

2.8.4 非実行可能点列主双対パス追跡内点法

- $\mu > 0$ に対する $\mathcal{F}(\mu)$ の解析的中心をターゲット点とする.

$$\boxed{\begin{cases} \boldsymbol{Ax - b = 0} \\ \boldsymbol{A^T y + s - c = 0} \\ \boldsymbol{x > 0, s > 0} \\ \boldsymbol{x_i s_i - \mu = 0} \qquad \boldsymbol{i = 1, 2, \ldots, n} \end{cases}} \tag{2.1}$$

- ある $(\boldsymbol{x^0, y^0, s^0})$ (ただし，$\boldsymbol{x^0, s^0 > 0}$) を初期点として上記を満たすような $(\boldsymbol{x^0 + \Delta x, y^0 + \Delta y, s^0 + \Delta s})$ を求めたいので (2.1) に代入すると

$$\begin{cases} \boldsymbol{A(x^0 + \Delta x) - b = 0} \\ \boldsymbol{A^T(y^0 + \Delta y) + (s^0 + \Delta s) - c = 0} \\ \boldsymbol{x^0 + \Delta x > 0, s^0 + \Delta s > 0} \\ \boldsymbol{(x^0 + \Delta x)_i (s^0 + \Delta s)_i - \mu = x_i^0 (\Delta s)_i + (\Delta x)_i s_i^0 + (\Delta x)_i (\Delta s)_i + x_i^0 s_i^0 - \mu = 0} \end{cases}$$

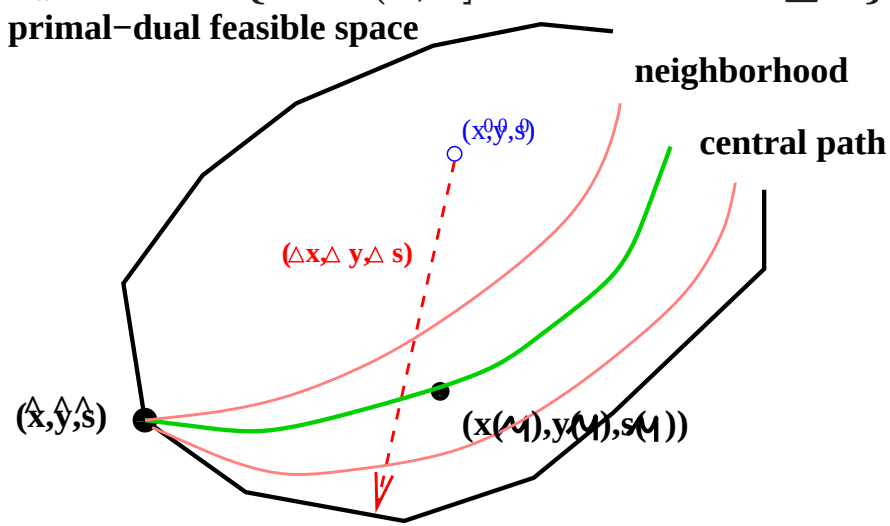
- 上記の 2 次項 $\boldsymbol{(\Delta x)_i (\Delta s)_i}$ を零とおき，非負条件を無視すると次の連立 1 次方程式がたてられる.

$$\begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ S^0 & 0 & X^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b - Ax^0 \\ c - A^T y^0 - s^0 \\ \mu e - X^0 s^0 \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

ただし，X^0, S^0 とはそれぞれ x^0,s^0 を対角要素としてもった行列であり，$e \in \mathbb{R}^n$ は全ての要素が 1 のベクトルである．さらに $\mathrm{rank}(A) = m$ なので，一つの解が定まる．

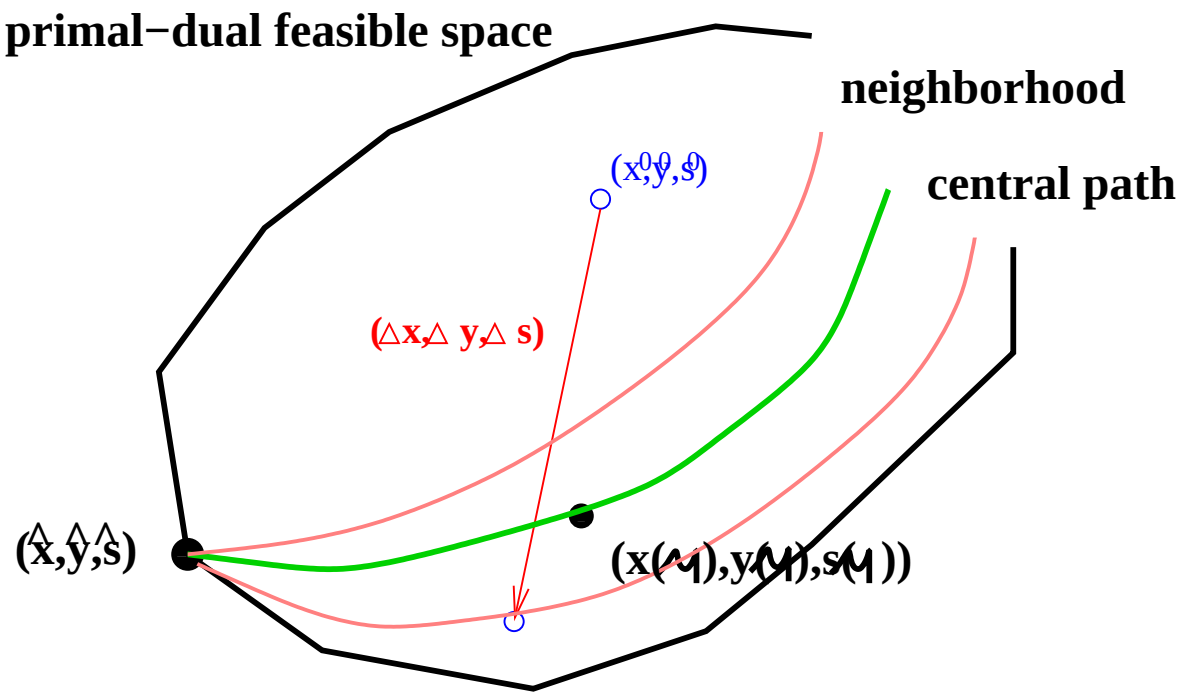
- 連立 1 次方程式 (2.2) は (2.1) に対する Newton 法にすぎない．
- ただし，$x^0 + \Delta x^0 > 0$, $s^0 + \Delta s^0 > 0$ は必ずしも満たされていないので，次のように探索方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta s)$ を制限した制限付き Newton 法を考える

$$\begin{aligned} \alpha_p &= \max\{\alpha \in (0,1] : \ x^0 + \alpha \Delta x^0 \geq 0\} \\ \alpha_d &= \max\{\alpha \in (0,1] : \ s^0 + \alpha \Delta s^0 \geq 0\} \end{aligned}$$



- さらに，後程示すが探索方向を中心パスの近傍$\mathcal{N}(\beta)$からはみ出ないように制限して反復を繰りかえすと多項式時間（「最大で問題の次元に対する多項式に比例する反復回数」）で終了することがいえる

$$\bar{\alpha} = \max\{\alpha \in (0, \min\{\alpha_p, \alpha_d\}] : \ (x^0 + \alpha\Delta x, y^0 + \alpha\Delta y, s^0 + \alpha\Delta s) \in \mathcal{N}(\beta)\}$$



- 以上，初期点 (x^0, y^0, s^0) から求まる次点侯補 $(x^0 + \bar{\alpha}\Delta x, y^0 + \bar{\alpha}\Delta y, s^0 + \bar{\alpha}\Delta s)$ を (2.1) に代入すると

$$\begin{cases} A(x^0 + \bar{\alpha}\Delta x) & = \bar{\alpha}b + (1-\bar{\alpha})Ax^0 \\ A^T(y^0 + \bar{\alpha}\Delta y) + (s^0 + \bar{\alpha}\Delta s) & = \bar{\alpha}c + (1-\bar{\alpha})(A^T y^0 + s^0) \\ x^0 + \bar{\alpha}\Delta x > 0,\ s^0 + \bar{\alpha}\Delta s > 0 & \\ (x^0 + \bar{\alpha}\Delta x)_i (s^0 + \bar{\alpha}\Delta s)_i & = \bar{\alpha}\mu + (1-\bar{\alpha})x_i^0 s_i^0 + \bar{\alpha}^2 \Delta x \Delta s,\ i = 1, 2, \ldots, n \end{cases}$$

となり，$\bar{\alpha} = 1$ にとれると，初期点 (x^0, y^0, s^0) が実行可能解でなくても $(x^0 + \bar{\alpha}\Delta x, y^0 + \bar{\alpha}\Delta y, s^0 + \bar{\alpha}\Delta s)$ は実行可能解になっている．その時はさらに最後の項の右辺が μ に等しくないので中心パス上には乗っていないことが分かる．

- この反復を μ を逐次減少させながら行なうと最適解が近似的に求まることがいえる

非実行可能点列主双対パス追跡内点法

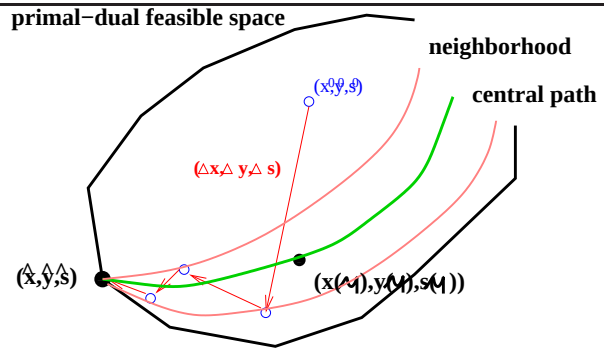
Step 0: $x^0, s^0 > 0$ となるような初期点 (x^0, y^0, s^0) を決め，$\sigma, \beta \in (0,1)$，$\epsilon > 0$，$k = 0$ とする．

終了条件: もし (x^k, y^k, s^k) が実行可能解であり，$\mu = \frac{(x^k)^T s^k}{n} < \epsilon$ ならば終了する

Step 1: $\begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ S^k & 0 & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b - Ax^k \\ c - A^T y^k - s^k \\ \sigma\mu e - X^k s^k \end{pmatrix}$ より探索方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta s)$ を求める．

Step 2: $(x^k + \bar{\alpha}\Delta x, y^k + \bar{\alpha}\Delta y, s^k + \bar{\alpha}\Delta s) \in \mathcal{N}(\beta)$ となるような $\bar{\alpha} \in (0,1)$ を求める．

Step 3: $(x^{k+1}, y^{k+1}, s^{k+1}) = (x^k + \bar{\alpha}\Delta x, y^k + \bar{\alpha}\Delta y, s^k + \bar{\alpha}\Delta s)$，$k = k + 1$ とし，終了条件を調べる．



2.8.5 内点法の多項式時間性

- 簡単に主双対パス追跡内点法が多項式時間アルゴリズムであることを示す
- 議論を簡単にするために前のページのアルゴリズムにおいて初期点 (x^0, y^0, s^0) は主双対実行可能解であるとする

補題 4
もし $(x^k, y^k, s^k) \in \mathcal{N}(\beta)$ かつ $\bar{\alpha} \in \left[0, 2\sqrt{2}(1-\beta)\frac{\beta\sigma}{(2-\beta)n}\right]$ ならば，$(x^{k+1}, y^{k+1}, s^{k+1}) \in \mathcal{N}(\beta)$ が成り立つ．

証明
[矢部2006] 参照． □

補題 5
アルゴリズムで生成された点列を $\{(x^k, y^k, s^k)\}$ とする．全ての $k \geq 0$ に対して次のことが言える

$$\mu_{k+1} \leq \left(1 - \frac{\delta}{n}\right)\mu_k.$$

ただし，δ は次元 n に無関係な値

$$\delta = 2\sqrt{2}(1-\beta)\frac{\beta}{2-\beta}\sigma(1-\sigma).$$

証明
[矢部2006] 参照. □

定理 6
$\epsilon \in (0,1)$ および $\beta \in (0,1)$ に対して実行可能解である初期点 $(x^0, y^0, s^0) \in \mathcal{N}(\beta)$ と仮定する．この時，$\frac{(x^k)^T s^k}{n} = \mu_k \leq \epsilon$ となるような実行可能解 (x^k, y^k, s^k) は $\mathcal{O}(n \log \frac{1}{\epsilon})$ 反復で求められる．

証明
[矢部2006] 参照. □

- 各反復においては探索方向を求めるのに連立 1 次方程式等を解く必要がある．よって，線形計画問題を内点法で解く時の計算時間は上記の反復回数の上限 $\mathcal{O}(n \log \frac{1}{\epsilon})$ に各反復にかかる計算機時間 (高々次元の多項式時間) をかけた値になるので，全体で多項式時間のアルゴリズムであることが分かる．

- 一般的に（線形計画問題に対する）内点法にはかなりの変形版が存在する．

- 例えば [YE1994] では線形計画問題を同次形の自己双対線形計画問題として定式化し，反復回数が $\mathcal{O}(\sqrt{n}\frac{1}{\epsilon})$ である方法を提案している．また，これ以下の反復回数を要する内点法が今だ知られていない．

- 正確には上記の計算量にデータの量を表す L が入る．線形計画問題に対して、この L に依存しない（強）多項式時間アルゴリズムを提案することは連続・組合せ最適化の研究者にとって未解決問題の一つとして認識されている．

2.8.6 Mehrotraの予測子・修正子法

- 実装上，もう少し効率が良い方法に Mehrotra の予測子・修正子法がある
- 探索方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta s)$ を 2 つに分ける：予測ステップの探索方向 $(\Delta x_p, \Delta y_p, \Delta s_p)$ と修正ステップの探索方向 $(\Delta x_c, \Delta y_c, \Delta s_c)$
- 実際に用いる探索方向はそれらの和である $(\Delta x, \Delta y, \Delta s) = (\Delta x_p, \Delta y_p, \Delta s_p) + (\Delta x_c, \Delta y_c, \Delta s_c)$
- $0 < \beta_c < \beta_p < 1$ を決め，内点法の各反復において

予測子ステップ

連立 1 次方程式 (2.2) において，$\sigma = 0$ としてアフィンスケーリング方向 $(\Delta x_p, \Delta y_p, \Delta s_p)$ を

$$\begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ S^k & 0 & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_p \\ \Delta y_p \\ \Delta s_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b - Ax^k \\ c - A^T y^k - s^k \\ -X^k s^k \end{pmatrix}$$

から求め，$(x^k + \bar{\alpha}_p \Delta x_p, y^k + \bar{\alpha}_p \Delta y_p, s^k + \bar{\alpha}_p \Delta s_p) \in \mathcal{N}(\beta_p)$ と成るようなステップサイズ $\bar{\alpha}_p$ を決める．

修正子ステップ

次点の予測される双対ギャップとの比率を

$$\tau = \left(\frac{(x^k + \bar{\alpha}_p \Delta x_p^k)^T (s^k + \bar{\alpha}_p \Delta s_p^k)}{(x^k)^T s^k} \right)^3 < 1$$

から求め，予測される双対ギャップを次のように求める

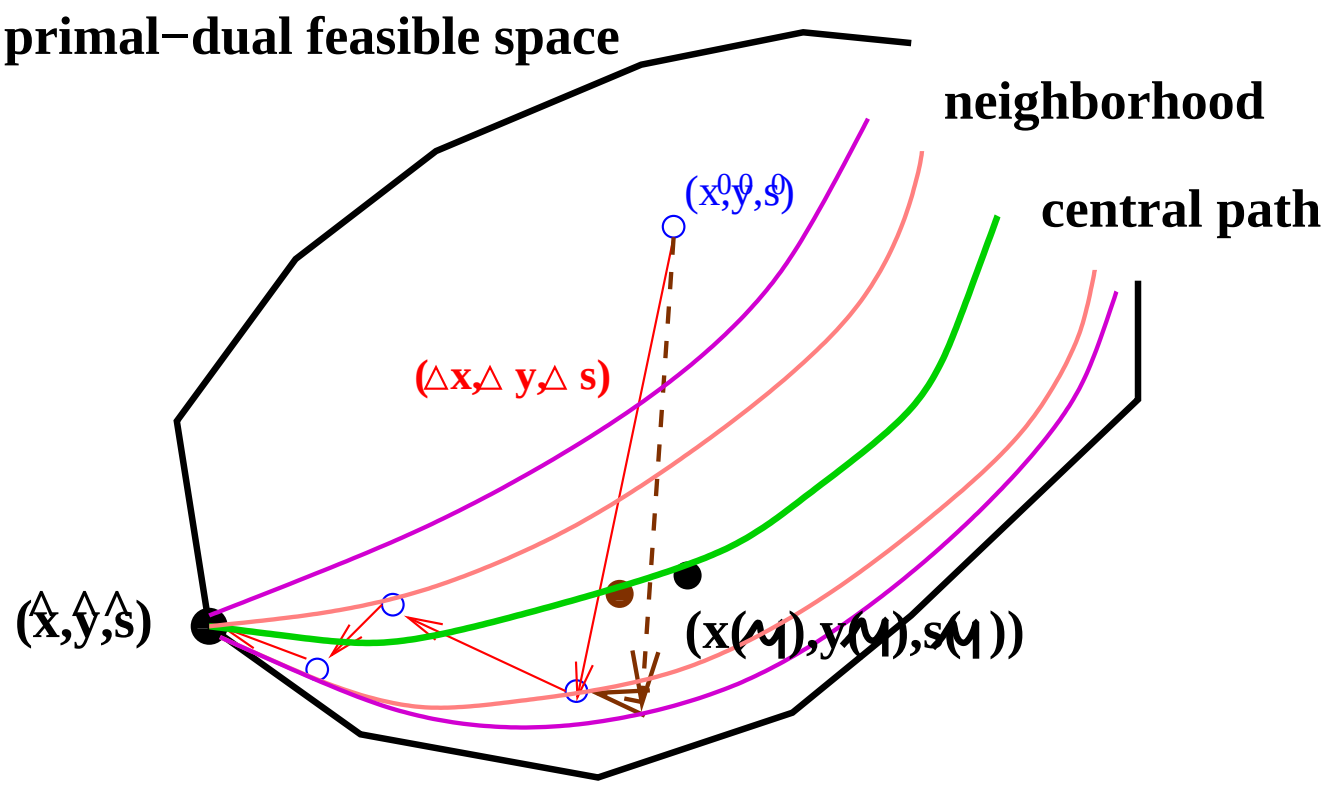
$$\bar{\mu} = \tau \mu^k.$$

連立 1 次方程式 (2.2) において，$(x^k, y^k, s^k) + \bar{\alpha}_p(\Delta x_p, \Delta y_p, \Delta s_p) + (\Delta x_c, \Delta y_c, \Delta s_c)$ を代入すると

$$\begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ S^k & 0 & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_c \\ \Delta y_c \\ \Delta s_c \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} b - Ax^k - \bar{\alpha}_p A \Delta x_p^k \\ c - A^T y^k - s^k - \bar{\alpha}_p (A^T \Delta y_p + \Delta s_p) \\ \bar{\mu} e - X^k s^k - \bar{\alpha}_p (X^k \Delta s_p - S^k \Delta x_p - \Delta X_p \Delta s_c - \Delta X_c \Delta s_p) - \Delta X_c \Delta s_c - \bar{\alpha}_p^2 \Delta X_p \Delta s_p \end{pmatrix}$$

となる．

右辺の Δx_c, Δs_c 項を無視して，修正子の探索方向 $(\Delta x_c, \Delta y_c, \Delta s_c)$ を

$$\begin{pmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & A^T & I \\ S^k & 0 & X^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_c \\ \Delta y_c \\ \Delta s_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b - Ax^k - \bar{\alpha}_p A \Delta x_p^k \\ c - A^T y^k - s^k - \bar{\alpha}_p (A^T \Delta y_p + \Delta s_p) \\ \bar{\mu} e - X^k s^k - \bar{\alpha}_p (X^k \Delta s_p - S^k \Delta x_p) - \bar{\alpha}_p^2 \Delta X_p \Delta s_p \end{pmatrix}$$

から求め，$(x^k + \bar{\alpha}_p \Delta x_p + \bar{\alpha}_c \Delta x_c, y^k + \bar{\alpha}_p \Delta y_p + \bar{\alpha}_c \Delta y_c, s^k + \bar{\alpha}_p \Delta s_p + \bar{\alpha}_c \Delta s_c) \in \mathcal{N}(\beta_c)$
と成るようなステップサイズ $\bar{\alpha}_c$ を決める．