# シンプレックス法入門

ざっきぃ

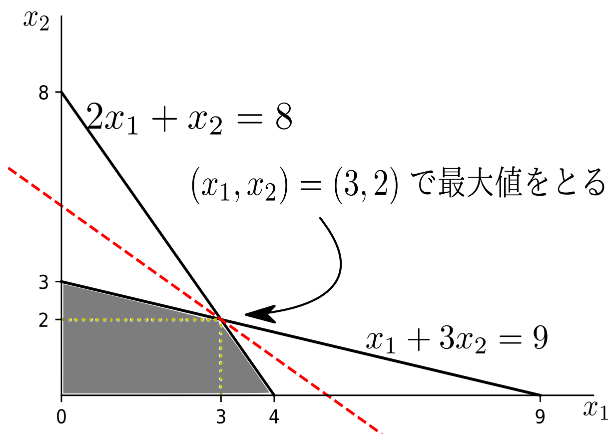
## 1　線形計画問題とは

こんにちは。
突然ですが、次の問題を考えてみて下さい。大学受験の「領域」という分野で一度は見たことがあるかと思います。

**例題 1**

$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$ とする。$2x_1 + x_2 \leq 8, x_1 + 3x_2 \leq 9$ を満たすように変数 $x_1, x_2$ を動かすとき、$x_1 + x_2$ のとりうる最大値はいくらか。また、その時の $x_1, x_2$ の値も求めよ。

ある条件の下で関数の値を最大化（または最小化）するようなモデルのことを**数理計画問題**または**最適化問題**と言います。特に上の問題のように、関数や制約条件が線形関数のみの式で表されるものを、**線形計画問題**（Linear Programming Problem, LP）といいます。
では、上の例題をどのように解きましょうか。高校では、下のように条件不等式が表す領域を図示し、$x_1 + x_2 = k$ の直線を、領域と被せるように動かすという方法をとりました。




しかし、条件や変数の数が増えると、このような原始的な手法では対応できなくなります。

## 2　シンプレックス法

そこで今回は、線形計画問題を解くためのアルゴリズムである**シンプレックス法**を紹介したいと思います。この方法は 1947 年に、米国の数学者 G.Dantzig によって開発されました。
シンプレックス法の原理を要約すると、「領域の頂点を一つ決め、そこから関数の値が大きくなるように、頂点を一つずつ辿っていく」ということになります。
まず、$x_3, x_4$ という新たな変数を導入し、例題の題意を、これと等価な等式標準形に書き換えます。新たな変数のことをスラック変数と言います。また、最大値を求める $x_1 + x_2$ も、$x_{max}$ という変数に格納しておきます。

$$\left\{\begin{aligned} x_{max} &= x_1 + x_2 \\ 2x_1 + x_2 &\leq 8 \\ x_1 + 3x_2 &\leq 9 \\ x_1 \geq 0, x_2 &\geq 0 \end{aligned}\right. \iff \left\{\begin{aligned} x_{max} &= 0 + x_1 + x_2 \\ x_3 &= 8 - 2x_1 - x_2 \\ x_4 &= 9 - x_1 - 3x_2 \\ x_1, x_2, x_3, x_4 &\geq 0 \end{aligned}\right. \tag{1}$$

ここで、等式の右辺に表れる変数を**非基底変数**、左辺の変数を**基底変数**といい、非基底変数の値を全て定めると、基底変数の値は自動的に計算できます。ここで、非基底変数を全て 0 にすると、下のような解を導くことが出来ます。これを**基底解**と言い、領域の図でいう原点に相当します。

| $x_{max}$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ |
|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 | 8 | 9 |

このとき、非基底変数を変化させて、$x_{max}$ の値を大きくしていきましょう。$x_2$ は 0 に固定したままで、$x_1$ の値を大きくしていきます（$x_{max}$ における $x_1$ の係数は正なので、$x_{max}$ の値は大きくなります）。しかし、$x_3, x_4 \geq 0$ という式上、$x_1$ は 4 までしか大きくすることはできません。このとき、以下のような解が得られます。

| $x_{max}$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ |
|---|---|---|---|---|
| 4 | 4 | 0 | 0 | 5 |

いま、$(x_1, x_2) = (4, 0)$ の点にいるわけですね。
すると、変数 $x_3$ の値が 0 になりました（当たり前ですが)。そこで、$x_3$ を基底変数に、逆に $x_1$ を非基底変数にしてみます。(1) 式を変形して、基底変数 $x_{max}, x_1, x_4$ を、非基底変数 $x_2, x_3$ の式で表してみましょう。

$$\left\{\begin{aligned} x_{max} &= 4 + \frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{2}x_3 \\ x_1 &= 4 - \frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{2}x_3 \\ x_4 &= 5 - \frac{5}{2}x_2 + \frac{1}{2}x_3 \\ x_1, x_2, x_3, x_4 &\geq 0 \end{aligned}\right.$$

さきほどと同じように、非基底変数を変化させて $x_{max}$ の値を大きくします。非基底変数は 2 つありますが、$x_3$ を選択してしまうと、これを正にすると同時に $x_{max}$ が負になってしまい、話になりません。ですので、$x_2$ を大きくしていくことになります。$x_1, x_4 \geq 0$ より、$x_2$ は 2 までしか増やせないですので、このときの解は

| $x_{max}$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ |
|---|---|---|---|---|
| 5 | 3 | 2 | 0 | 0 |

となります。
では、次は 0 になった $x_3, x_4$ を非基底変数にしましょう。とりあえず、基底変数の $x_{max}$ を $x_3, x_4$ で表してみます。

$$x_{max} = 5 - \frac{2}{5}x_3 - \frac{1}{5}x_4$$

さて、どの変数を動かしますか？ $x_3, x_4$ のいずれも、$x_{max}$ の係数が負なので、大きくすればするほど $x_{max}$ が小さくなってしまいます。ということで、ここでアルゴリズムは終了し、$x_1 = 3, x_2 = 2$ のときに最大値 5 をとる、とわかるのです。無事、$(x_1, x_2) = (3, 2)$ に辿り着けましたね。

## 2.1 Python によるシンプレックス法

　では Python で、シンプレックス法により最適化問題を解いてみましょう。Scipy にも、最適化問題を解くための linprog という関数が用意されていますが、僕は PuLP という数理モデリングパッケージをお勧めします。
Anaconda を利用して環境構築した方（ほとんどだと思います）は、Anaconda Prompt に以下のコードを打ち込むだけで、PuLP のインストールは完了します。

```
pip install pulp
```

そのうえで、Python に以下のように書き込みます。

```
import pulp
lp = pulp.LpProblem('lp', pulp.LpMaximize)
x1 = pulp.LpVariable('x1', 0)
x2 = pulp.LpVariable('x2', 0)
lp += x1 + x2
lp += 2*x1 + x2 <= 8
lp += x1 + 3*x2 <= 9
lp.solve()
print('x1=',x1.value())
print('x2=',x2.value())
```

これで、最小値を取るときの $x_1, x_2$ の値が求まりました。便利〜〜笑

## 2.2 双対性とその応用

　上の例題では、$x_{max}$ の最大値は 5 となりました。しかしこのような難しい手順を踏まなくても、最大値の大ざっぱな推定は可能です。例えば、$x_{max}$ が 17 より大きくなることはありえません。なぜなら、$2x_1 + x_2 \leq 8, x_1 + 3x_2 \leq 9$ を辺々加えると $3x_1 + 4x_2 \leq 17$ が成り立ち、$x_1, x_2 \leq 0$ より、

$$x_{max} = x_1 + x_2 \leq 3x_1 + 4x_2 \leq 17$$

という関係式が導けるのです。
では、もっと厳しい推定をすることはできないでしょうか。先ほどと同じように、$2x_1 + x_2 \leq 8$ の両辺を $y_1$

倍、$x_1+3x_2 \leq 9$ の両辺を $y_2$ 倍して加え、$(2y_1+y_2)x_1+(y_1+3y_2)x_2 \leq 8y_1+9y_2$ の形を作ってみましょう。$2y_1+y_2 \leq 1, y_1+3y_2 \leq 1$ が成り立てば、前のような関係式が導け、$8y_1+9y_2$ はより厳密な推定値になりそうです。さて、この推定値を出来る限り小さくしたいと思います。
上の段落の内容をまとめると、以下の式のようになります。

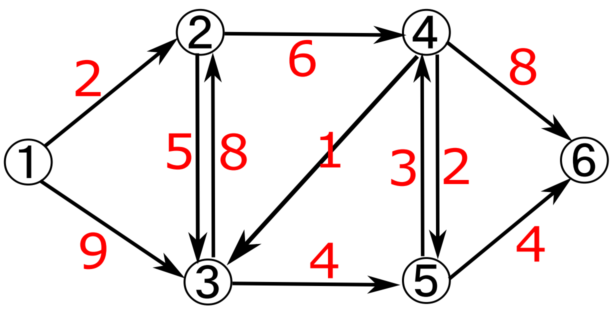
$$\begin{cases} y_{min} = 8y_1+9y_2 \\ 2y_1+y_2 \geq 1 \\ y_1+3y_2 \geq 1 \\ y_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{cases}$$

すると、元の問題とは別の最小化問題ができました。これを、元の問題の**双対問題** (dual problem,D) と言い、元の問題のことを**主問題** (primal problem,P) と言います。双対問題の双対問題は主問題であり（試してみてください)、この 2 つは互いにペアになる関係だといえます。
主問題と双対問題の関係を一般化すると、次のようになります。

$$c=\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}, x=\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, b=\begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}, y=\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, A=\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \text{ のとき、}$$

$$(P)\begin{cases} \text{最大化 } c^T x \\ \text{条　件 } Ax \leq b(x \geq 0) \end{cases}, (D)\begin{cases} \text{最小化 } b^T y \\ \text{条　件 } A^T y \geq c(y \geq 0) \end{cases}$$

ここで、主問題と双対問題がいずれも実行可能ならば、2 つの最適解は等しいという定理が存在します。
この定理は、グラフの最短距離を考える際に応用できます。下の図で、地点 1 から 6 の最短経路を求めたいとします。




ここで、地点 $i$ から $j$ に向かう矢印に対して、変数 $x_{ij}$ を導入します。経路にこの矢印が含まれれば $x_{ij}=1$、含まれなければ $x_{ij}=0$ です。すると、経路を幾何的に成り立たせるために必要な条件が出てきます。起点から出る矢印の本数の合計は 1 本で、終点に入る矢印の本数も一本、その他の点に関しては、入る矢印と出る矢

印の本数が同じでないといけませんね。従って、この最短経路問題は、次の最小化問題に帰着できます。

$$\begin{cases} x_{min} = 2x_{12} + 9x_{13} + 5x_{23} + 6x_{24} + 8x_{32} + 4x_{35} + x_{43} + 2x_{45} + 8x_{46} + 3x_{54} + 4x_{56} \\ x_{12} + x_{13} = 1 \\ x_{12} - x_{23} - x_{24} + x_{32} = 0 \\ x_{13} + x_{23} - x_{32} - x_{35} + x_{43} = 0 \\ x_{24} - x_{43} - x_{45} - x_{46} + x_{54} = 0 \\ x_{35} + x_{45} - x_{54} - x_{56} = 0 \\ x_{46} + x_{56} = 1 \\ x_{ij} = \{0, 1\} \end{cases}$$

最終行の $x_{ij}$ が 0 か 1 という条件さえなければ、上にあげた一般形で書けますね。ということでこの条件を一旦、$x_{ij} \geq 0$ に変えてしまいます。このとき、一般形の $A$ は下のような行列になります。この行列 A を、路線図の**接続行列** (incidence matrix) といいます。

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

この問題を普通に解いてもいいのですが、変数が 11 個とあまりにも多く、効率が悪そうです。そこで、双対問題の出番です。上の問題の双対問題は、以下のようになります。

$$\begin{cases} y_{max} = y_1 + y_6 \\ y_1 + y_2 \leq 2 \\ y_1 + y_3 \leq 9 \\ -y_2 + y_3 \leq 5 \\ -y_2 + y_4 \leq 6 \\ y_2 - y_3 \leq 8 \\ -y_3 + y_5 \leq 4 \\ y_3 - y_4 \leq 1 \\ -y_4 + y_5 \leq 2 \\ -y_4 + y_6 \leq 8 \\ y_4 - y_5 \leq 3 \\ -y_5 + y_6 \leq 4 \end{cases} \iff \begin{cases} y_{max} = y_1 + y_6 \\ y_2 \leq -y_1 + 2 \\ y_3 \leq -y_1 + 9 \\ y_3 \leq y_2 + 5 \\ y_4 \leq y_2 + 6 \\ y_2 \leq y_3 + 8 \\ y_5 \leq y_3 + 4 \\ y_3 \leq y_4 + 1 \\ y_5 \leq y_4 + 2 \\ y_6 \leq y_4 + 8 \\ y_4 \leq y_5 + 3 \\ y_6 \leq y_5 + 4 \end{cases}$$

このように、変数の数を 6 つにでき、このようなシンプルな不等式で表すことができました。
ここで、$y_1 = 0$ と固定すると、各変数を最大化した値が、各地点までの距離の最小値となります（ややこしい)。この不等式をどうやって解くかというと、文字通り一つずつの地点に至る距離を更新していくわけです。具体的にいうと、$y_1 = 0, y_2 \sim y_6 = \infty$ を初期状態とします。次に、不等式を一つずつ実行していきます。例えば最初の不等式なら、$y_2 \leq -y_1 + 2$ ですので、$y_2 \leq 2$ ですね。なので、$y_2$ の値を 2 に更新します。同じように $y_3$ の値が 9 に更新されますね。三番目の不等式は $y_3 \leq y_2 + 5$ なので、$y_3$ の値は 7 と、さらに小さい値に置き換わります。
この作業を、不等式の個数 11*変数の個数 6=66 回繰り返すアルゴリズムを組めば、自動的に最短距離を求めることが出来ます。この方法を**ベルマン-フォード法** (Bellman-Ford algorithm) といい、最短経路問題の代表的な解法として知られているものです。

## 2.3 二段階シンプレックス法

では、次の問題を考えてみましょう。

**例題 2**

$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$ とする。$-x_1 + 2x_2 \geq 2, x_1 + x_2 \geq 2, x_1 + 2x_2 \leq 6$ を満たすように変数 $x_1, x_2$ を動かすとき、$x_1 + 3x_2$ のとりうる最大値はいくらか。また、その時の $x_1, x_2$ の値も求めよ。

等式標準形は、以下のようになります。

$$\begin{cases} x_{max} = x_1 + 3x_2 \\ x_3 = -2 - x_1 + 2x_2 \\ x_4 = -2 + x_1 + x_2 \\ x_5 = 6 - x_1 - 2x_2 \\ x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \geq 0 \end{cases} \tag{2}$$

ここで、$x_1, x_2$ をいずれも 0 にすると、$x_3 = -2, x_4 = -2$ となり、$x_3, x_4 \geq 0$ が成り立ちません。最初の例ではたまたま原点が領域の端点でしたが、この場合は原点は領域にすら含まれないようです。
そこで、計算機などでシステマティックに端点を見付けるために、**二段階シンプレックス法**を用います。この方法により、端点を探すだけでなく、問題自体が実行可能かどうかを同時に判別することもできます。まず、次のような補助問題を導入します。

$$\begin{cases} x_{min} = x_6 + x_7 \\ x_6 = x_3 - (-2 - x_1 + 2x_2) \\ x_7 = x_4 - (-2 + x_1 + x_2) \\ x_5 = 6 - x_1 - 2x_2 \\ x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7 \geq 0 \end{cases} \tag{3}$$

何をしているのかというと、先に $x_1 = 0, x_2 = 0$ を仮定した際に成り立たなかった二つの式に、人工変数を導入しているのです。この変数 $x_6, x_7$ は (2) 式の左辺から右辺を引いたものなので、仮に $x_{min} = x_6 + x_7$ の最適値が 0 より大きいとするならば、そもそも (2) 式を満たす $x_1, x_2$ は存在しないことになります。最適値が 0 になれば、元の問題は実行可能であり、その時の解を端点として、シンプレックス法を実行します。
とりあえず、問題 (3) をシンプレックス法で解いてみましょう。

**基底解** $\rightarrow$

| $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $x_7$ | $x_{min}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0 | 0 | 0 | 6 | 2 | 2 | 4 |

$$\begin{cases} \textbf{非基底変数；} x_1, x_2, x_3, x_4 \\ x_{min} = 4 - 3x_2 + x_3 + x_4 \\ x_6 = 2 + x_1 - 2x_2 + x_3 \\ x_7 = 2 - x_1 - x_2 + x_4 \\ x_5 = 6 - x_1 - 2x_2 \\ x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7 \geq 0 \end{cases}$$

| $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $x_7$ | $x_{min}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1 | 0 | 0 | 4 | 0 | 1 | 1 |

$$\begin{cases} \textbf{非基底変数；} x_1, x_3, x_4, x_6 \\ x_{min} = 1 - \frac{3}{2}x_1 - \frac{1}{2}x_3 + x_4 + \frac{3}{2}x_6 \\ x_2 = 1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{2}x_3 - \frac{1}{2}x_6 \\ x_5 = 4 - 2x_1 - x_3 + x_6 \\ x_7 = 1 - \frac{3}{2}x_1 - \frac{1}{2}x_3 + x_4 + \frac{3}{2}x_6 \\ x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7 \geq 0 \end{cases}$$

| $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $x_7$ | $x_{min}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\frac{2}{3}$ | $\frac{4}{3}$ | 0 | 0 | $\frac{8}{3}$ | 0 | 0 | 0 |

というわけで $x_{min}$ が 0 になったので、元の問題 (2) は実行可能です。実行可能な基底解は $(x_1, x_2) = (\frac{2}{3}, \frac{4}{3})$ であり、これが端点だということですね。ここから元の問題で、二段階目のシンプレックス法を開始します。

基底解 $\rightarrow$

| $x_{max}$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $\frac{14}{3}$ | $\frac{2}{3}$ | $\frac{4}{3}$ | 0 | 0 | $\frac{8}{3}$ |

$$\begin{cases} \text{非基底変数；} x_3, x_4 \\ x_{max} = \frac{14}{3} + \frac{2}{3}x_3 + \frac{5}{3}x_4 \\ x_1 = \frac{2}{3} - \frac{1}{3}x_3 + \frac{2}{3}x_4 \\ x_2 = \frac{4}{3} + \frac{1}{3}x_3 + \frac{1}{3}x_4 \\ x_5 = \frac{8}{3} - \frac{1}{3}x_3 - \frac{4}{3}x_4 \\ x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \geq 0 \end{cases}$$

| $x_{max}$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 8 | 0 | 2 | 2 | 0 | 2 |

$$\begin{cases} \text{非基底変数；} x_1, x_4 \\ x_{max} = 6 - 2x_1 + 3x_4 \\ x_2 = 2 - x_1 + x_4 \\ x_3 = 2 - 3x_1 + 2x_4 \\ x_5 = 2 + x_1 - 2x_4 \\ x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \geq 0 \end{cases}$$

| $x_{max}$ | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 9 | 0 | 3 | 4 | 1 | 0 |

$$\begin{cases} \text{非基底変数；} x_1, x_5 \\ x_{max} = 9 - \frac{1}{2}x_1 - \frac{3}{2}x_5 \quad \Rightarrow \text{アルゴリズム終了} \\ x_1, x_5 \geq 0 \end{cases}$$

$(x_1, x_2) = (0, 3)$ のときに、最大値 9 をとることがわかりました。
以上の流れを、図で表すとこのようになります。