

学習用テキスト 内点法 (2)

主内点法のアルゴリズム

水野 眞治

東京工業大学 大学院社会理工学研究科 経営工学専攻

http://www.me.titech.ac.jp/~mizu_lab/text/

2010年11月9日

概要

標準形の線形計画問題を解くための主内点法のアルゴリズムを解説する。解説するアルゴリズムは、アフィンスケーリング法、Karmarkar 法、パス追跡法、ポテンシャル減少法である。ここでは、主にアルゴリズムの解説をするが、収束性など理論的な性質については、あまり説明しない。

目次

1	主内点法のアルゴリズム	1
1.1	アフィンスケーリング法	2
1.2	Karmarkar 法	5
1.3	パス追跡法	10
1.4	ポテンシャル減少法	12
1.5	演習問題の略解	14

1 主内点法のアルゴリズム

標準形の線形計画問題を解く内点法として、アフィンスケーリング法、Karmarkar の射影変換法、パス追跡法、ポテンシャル減少法を解説する。

n 個の変数を持ち、 m 個の等式制約を持つ標準形の線形計画問題を

$$\begin{aligned} & \text{最小化} && c^T x \\ & \text{制約条件} && Ax = b \\ & && x \geq 0 \end{aligned} \tag{1}$$

とする。上の問題を主問題とすれば、その双対問題は

$$\begin{aligned} & \text{最大化} && b^T y \\ & \text{制約条件} && A^T y + z = c \\ & && z \geq 0 \end{aligned} \tag{2}$$

となる。

点 $x \in \mathcal{R}^n$ は, $x > 0$ を満たすならば, 主問題 (1) の内点と呼ばれ, さらに $Ax = b$ を満たすならば実行可能内点と呼ばれ, 満たさないならば実行不能内点と呼ばれる。同様に, 点 $(y, z) \in \mathcal{R}^m \times \mathcal{R}^n$ は, $z > 0$ を満たすならば, 双対問題 (2) の内点と呼ばれ, さらに $A^T y + z = c$ を満たすならば実行可能内点と呼ばれる。

1.1 アフィンスケーリング法

アフィンスケーリング法は, 線形計画問題を解く方法として, 1967年に Dikin [1] により提案された。しかし, この解法が世に広まったのは, 1984年に Karmarkar [3] が多項式オーダーの内点法を提案し, 多くの研究者が内点法に興味を持つようになってからである。アフィンスケーリング法は, 内点を更新するときに, 境界に近い内点であっても, アフィン変換によりその内点を中心部に移してから探索方向を求めることにより, 効率よく最適解を得ようという方法である。

線形計画問題 (1) に次の基本的な仮定をおく。

仮定 1.1 行列 A のランクが m である。

主アフィンスケーリング法では, 開始するための初期の内点が必要なので, 次の仮定も置く。

仮定 1.2 主問題の初期の実行可能内点 x^0 が既知である。

主アフィンスケーリング法では, この内点 x^0 を初期点として, 1つの内点から次の内点を計算することを繰り返すことにより, 実行可能内点の列 $\{x^k\}$ を生成する。 k 番目の内点 x^k がすでに求められているとして, 次の内点 x^{k+1} の計算方法を示す。

主アフィンスケーリングでは, 点 x^k において探索方向 Δx を求め, あるステップサイズ α を定めて, 次の点を

$$x^{k+1} = x^k + \alpha \Delta x$$

と計算する。この右辺の式を線形計画問題 (1) の x に代入すると, 問題

$$\begin{aligned} \text{最小化} \quad & c^T x^k + \alpha c^T \Delta x \\ \text{制約条件} \quad & Ax^k + \alpha A \Delta x = b \\ & x^k + \alpha \Delta x \geq 0 \end{aligned} \tag{3}$$

が得られる。ここで, 目的関数に定数項 $c^T x^k$ は不要である。また, x^k が実行可能解なので, $Ax^k = b$ より, 上の等式は $\alpha A \Delta x = 0$ と変形できる。ベクトル $x^k =$

$(x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k)^T$ の各要素を対角要素とする対角行列を

$$X_k = \text{diag}(x^k) = \begin{pmatrix} x_1^k & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & x_n^k \end{pmatrix}$$

と記し, すべての要素が 1 であるベクトル $(1, 1, \dots, 1)^T$ を e と記せば, $x^k = X_k e$ となる. 上の問題 (3) を解きたいのであるが, ステップサイズ α は探索方向 Δx に依存して決められるので, ここでは $\alpha = 1$ として探索方向を求めることにする. 以上のことから, 上の問題 (3) は

$$\begin{aligned} & \text{最小化} && c^T \Delta x \\ & \text{制約条件} && A \Delta x = 0 \\ & && -X_k^{-1} \Delta x \leq e \end{aligned}$$

と同値である. この問題は簡単に解けないので, 不等式条件 $-X_k^{-1} \Delta x \leq e$ をその十分条件である $\|X_k^{-1} \Delta x\| \leq 1$ に取り換えて, 次の問題

$$\begin{aligned} & \text{最小化} && c^T \Delta x \\ & \text{制約条件} && A \Delta x = 0 \\ & && \|X_k^{-1} \Delta x\| \leq 1 \end{aligned} \tag{4}$$

を考える. この問題は, 変数ベクトル $X_k^{-1} \Delta x$ を新しい変数ベクトルに置き換えれば, 線形制約を満たす部分空間上で, 線形関数を最小化する単位ベクトルを求める問題となる. したがって, その目的関数の係数ベクトルを等式制約を満たす部分空間上に射影することにより, 最適解を求めることができる. その解は,

$$y^k = (A X_k^2 A^T)^{-1} A X_k^2 c, \quad z^k = c - A^T y^k$$

に対して, $z^k \neq 0$ ならば

$$\Delta x^* = -\frac{X_k^2 z^k}{\|X_k z^k\|}$$

となる (演習問題). このとき, $z^k = 0$ ならば, x^k は主問題 (1) の最適解であり, 逆に x^k が主問題 (1) の最適解ならば, $z^k = 0$ である. 上の解 Δx^* を点 x^k における問題 (1) のアフィンスケーリング方向と呼ぶ.

アルゴリズム 1.3 主アフィンスケーリング法は, 次のステップから成る.

ステップ 0 主問題 (1) の初期実行可能内点を x^0 とし, $k = 0$, $\alpha \in (0, 1)$ とする.

ステップ 1 点 x^k において, $y^k = (A X_k^2 A^T)^{-1} A X_k^2 c$, $z^k = c - A^T y^k$ を計算し, $z^k = 0$ ならば終了する. さもなければ $\Delta x^* = -\frac{X_k^2 z^k}{\|X_k z^k\|}$ を計算する.

ステップ 2 次の点を $x^{k+1} = x^k + \alpha \Delta x^*$ とし, 反復回数 k を 1 増加し, ステップ 1 へ戻る.

実際の計算では, 十分小さい $\epsilon > 0$ を用意して, $\|\Delta x^*\| \leq \epsilon$ が成立した時点で, アルゴリズムを終了し, x^k を近似解とする. ステップサイズ α は, 1 以上にとることも可能である. x^k が内点のとき, ステップサイズ α を, $x^{k+1} \geq 0$ を満たす最大の値

$$\bar{\alpha} = \max\{\alpha | x^k + \alpha \Delta x^* \geq 0\} \quad (5)$$

に対して, 定数 $\lambda \in (0, 1)$ を使って, $\alpha = \lambda \bar{\alpha}$ とすることができる. この場合にロングステップ・アフィンスケーリング法と呼ばれることがある.

演習問題 1.4 問題 (4) の最適解が, $y^k = (AX_k^2 A^T)^{-1} AX_k^2 c$, $z^k = c - A^T y^k$ に対して, $z^k \neq 0$ ならば, $\Delta x^* = -\frac{X_k^2 z^k}{\|X_k z^k\|}$ となることを示せ.

演習問題 1.5 主アフィンスケーリング法のアルゴリズム 1.3 で生成される各点 x^k が実行可能内点となることを示せ.

演習問題 1.6 主アフィンスケーリング法のアルゴリズム 1.3 の各反復で, 目的関数値が単調に減少することを示せ.

例 1.7 標準形の線形計画問題の例を

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & -x_1 - x_2 \\ \text{制約条件} & 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 \\ & x_1 + 3x_2 + x_4 = 5 \\ & (x_1, x_2, x_3, x_4)^T \geq 0 \end{array} \quad (6)$$

とする. この問題の内点解 $x^0 = (1, 1, 1, 1)^T$ が求められているとして, $\alpha = 1/2$ のときに, アフィンスケーリング法による次の点を計算する. $X_0 = \text{diag}(x^0)$ が 4×4 の単位行列となるので, ベクトル $y = (y_1, y_2)^T$ は, 一次方程式系

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 1 \end{pmatrix} X_0^2 \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 1 \end{pmatrix} X_0^2 \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

の解であるから, $y = (-13/41, -9/41)^T$ となる. これより

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -13/41 \\ -9/41 \end{pmatrix} = \frac{1}{41} \begin{pmatrix} -6 \\ -1 \\ 13 \\ 9 \end{pmatrix}$$

となり

$$\begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \Delta x_3 \\ \Delta x_4 \end{pmatrix} = -\frac{\mathbf{X}_0^2 z}{\|\mathbf{X}_0 z\|} = -\frac{1}{\sqrt{287}} \begin{pmatrix} -6 \\ -1 \\ 13 \\ 9 \end{pmatrix}$$

となる．したがって，次の点は

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{287}} \begin{pmatrix} -6 \\ -1 \\ 13 \\ 9 \end{pmatrix}$$

である．

1.2 Karmarkar 法

1984 年に Karmarkar [3] によって提案された新解法は，理論的に多項式オーダの計算量で線形計画問題を解くことができるだけでなく，線形計画問題を解く方法の代名詞であった単体法よりも実際に高速に問題を解けるということで，多くの研究者等の注目を集めた．この解法が起爆剤となって，その後，多くの内点法が研究されるようになった．

Karmarkar 法が対象とする線形計画問題は，

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ \text{制約条件} & \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{0} \\ & \mathbf{e}^T \mathbf{x} = n \\ & \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{array} \quad (7)$$

という形をしている．ここで， \mathbf{A} は $m \times n$ 行列であり， $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathcal{R}^n$ であり，その形から他のベクトルの次元も定まっている．標準形の線形計画問題を，この形の問題に帰着することもできるが，ここでは割愛する．この問題は，変数ベクトル \mathbf{x} が部分空間

$$T = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{0}\}$$

と単体

$$S = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{e}^T \mathbf{x} = n, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}$$

の交わり $T \cap S$ 上にあるという条件のもとで，線形関数 $\mathbf{c}^T \mathbf{x}$ の最小値を求める問題と解釈できる．Karmarkar 法では，次の仮定をおく．

仮定 1.8 線形計画問題 (7) には最適解が存在し，その最適値が 0 である．

仮定 1.9 線形計画問題 (7) の実行可能内点 x^0 が既知である .

Karmarkar 法では , x^0 を初期点として , 実行可能内点の列 $\{x^k\}$ を生成する . いま , k 番目の実行可能内点 x^k が得られているとして , 次の点の求め方を示す .

内点法では , 多くの場合 , 現在の内点 x^k から探索方向とステップサイズを使って , 次の内点を計算するが , 最適解に近づくと x^k の要素の一部が非常に小さな値となるので , うまく探索方向を計算しないとステップサイズが極端に小さくなり , 効率よく内点を更新することができない . アフィンスケーリング法では , 線形変換 $x \rightarrow X_k^{-1}x$ を使って , 現在の点 x^k を e に移すことにより , 大きなステップサイズをとることが可能となった .

Karmarkar 法では , 次の射影変換

$$u_i = n \frac{x_i/x_i^k}{\sum_{i=1}^n x_i/x_i^k}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

を導入する . これを Karmarkar の射影変換と呼ぶ . 対角行列 $X_k = \text{diag}(x^k)$ とベクトル $e = (1, 1, \dots, 1)^T$ を使うと , 上の変換は

$$u = n \frac{X_k^{-1}x}{e^T X_k^{-1}x} \quad (8)$$

と表すことができる . この変換により , 現在の点 $x = x^k$ は , $X_k^{-1}x^k = e$ より

$$u = n \frac{X_k^{-1}x^k}{e^T X_k^{-1}x^k} = e$$

に写される . 各成分が 1 となるので , 長さ 1 の方向ベクトル Δu なら , ステップサイズ α が 1 以下であれば , 次の点

$$e + \alpha \Delta u \quad (9)$$

の各要素が非負となる . また , $e^T x = n$ ならば $e^T u = n$ となる . この射影変換の逆変換は , $e^T u = n$ を満たす u に対して

$$x = \frac{n X_k u}{e^T X_k u} \quad (10)$$

となる . この関係式 (10) を問題 (7) の x に代入し , 条件 $e^T u = n$ を加えると , 問題

$$\begin{aligned} \text{最小化} & \quad \frac{n c^T X_k u}{e^T X_k u} \\ \text{制約条件} & \quad \begin{aligned} & A X_k u = 0 \\ & e^T u = n \\ & u \geq 0 \end{aligned} \end{aligned} \quad (11)$$

が得られる．仮定 1.8 より，この問題の最適値が 0 であり， $u \in S$ のとき目的関数の分母は明らかに正であるので，目的関数を分子にある $c^T X_k u$ に置き換えることができる．また，

$$\tilde{c} = X_k c, \quad \tilde{A} = A X_k \quad (12)$$

とすれば，上の問題 (11) は

$$\begin{aligned} \text{最小化} \quad & \tilde{c}^T u \\ \text{制約条件} \quad & \tilde{A}u = 0 \\ & e^T u = n \\ & u \geq 0 \end{aligned} \quad (13)$$

となる．探索方向を Δu ，ステップサイズを $\alpha = 1$ として，実行可能解 e を使って， $u = e + \Delta u$ を代入すると

$$\begin{aligned} \text{最小化} \quad & \tilde{c}^T \Delta u \\ \text{制約条件} \quad & \tilde{A}\Delta u = 0 \\ & e^T \Delta u = 0 \\ & -\Delta u \leq e \end{aligned} \quad (14)$$

が得られる．アフィンスケーリング法の場合と同様に，最後の不等式の条件 $-\Delta u \leq e$ を，その十分条件である， $\|\Delta u\| \leq 1$ に置き換えると

$$\begin{aligned} \text{最小化} \quad & \tilde{c}^T \Delta u \\ \text{制約条件} \quad & \tilde{A}\Delta u = 0 \\ & e^T \Delta u = 0 \\ & \|\Delta u\| \leq 1 \end{aligned} \quad (15)$$

となる．この問題 (15) の最適解は，目的関数の係数ベクトル \tilde{c} を制約条件の行列によって定まる部分空間に直交射影することにより，簡単に求めることができる．実際，単位行列 E を使って

$$d = \left(E - \tilde{A}^T (\tilde{A}\tilde{A}^T)^{-1} \tilde{A} - \frac{1}{n} e e^T \right) \tilde{c} \quad (16)$$

とすれば， $\Delta u = -d/\|d\|$ となり， $u^* = e - d/\|d\|$ が得られる．ここで，もし $d = 0$ ならば $u = e$ は問題 (13) の最適解である (演習問題)．Karmarkar 法は，この方向 d を採用し，更新式

$$u = e - \alpha \frac{d}{\|d\|} \quad (17)$$

により u を求める．更新した u から逆変換により x を求め，それを x^{k+1} として採用する．以上のことから，Karmarkar 法は，次のようになる．

アルゴリズム 1.10 Karmarkar 法は，次のステップから成る．

ステップ 0 問題 (7) の初期実行可能内点を x^0 とし, $k = 0, \alpha \in (0, 1)$ とする.

ステップ 1 点 x^k から式 (12) により $\tilde{A} = AX_k$ と $\tilde{c} = X_k c$ を計算する. 式 (16) により d をもとめ, 式 (17) により u を計算する.

ステップ 2 逆変換 (10) により u から x を求め, それを x^{k+1} とする. 反復回数 k を 1 増加し, ステップ 1 へ戻る.

このアルゴリズムは, 各反復で射影変換した問題の目的関数値が減少するが, 元の問題 (7) の目的関数値が減少するとは限らない. したがって, ここまでの議論だけでは, ステップサイズ α の決め方が不明であり, 生成した点列が元の問題の最適解に近づくかどうかもわからない. これを解決するために, Karmarkar は, ポテンシャル関数

$$f_c(x) = n \log c^T x - \sum_{i=1}^n \log x_i = \log \frac{(c^T x)^n}{\prod_{i=1}^n x_i}$$

を導入した. このポテンシャル関数が, 十分小さくなれば, 目的関数値 $c^T x$ が 0 に近づき, 最適解の近似解が得られる. したがって, このポテンシャル関数を減少させるように, ステップサイズを決めればよい. 一方, 点列の更新は, 変換した変数 u の空間で行われるため, 変換した空間におけるポテンシャル関数

$$f_{\tilde{c}}(u) = n \log \tilde{c}^T u - \sum_{i=1}^n \log u_i$$

を導入する. このポテンシャル関数の値を減少させるように u を更新すれば, x の空間でのポテンシャル関数も同じだけ減少することを示すことができる. したがって, x の空間でのポテンシャル関数を減少させる点列を生成するためには, 各反復で, 射影した空間においてポテンシャル関数 $f_{\tilde{c}}(u)$ を減少させるように, ステップサイズ α を決めればよいことになる. 例えば, アルゴリズム 1.10 で $\alpha = 1/2$ とすれば, 少なくともポテンシャル関数値が $1/4$ だけ減少することが分かっている. また, ポテンシャル関数に次元探索を使ってステップサイズを求めることにより, さらなるポテンシャル関数の減少が可能である.

演習問題 1.11 問題 (15) の最適解が式 (16) の d を使って, $\Delta u = -d/\|d\|$ となることを示せ. また, $d = 0$ ならば $u = e$ が問題 (13) の最適解であることを示せ.

演習問題 1.12 Karmarkar 法のアルゴリズム 1.10 によって求められる各点 x^k が実行可能内点となることを示せ.

演習問題 1.13 Karmarkar 法のアルゴリズム 1.10 の各反復において, $\tilde{c}^T u \leq \tilde{c}^T e$ となることを示せ.

例 1.14 次の問題

$$\begin{aligned} \text{最小化} \quad & 36x_1 + 72x_2 - 36x_3 \\ \text{制約条件} \quad & x_1 + x_2 - x_3 - x_4 = 0 \\ & x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 4 \\ & x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0, x_4 \geq 0 \end{aligned} \tag{18}$$

を例として, Karmarkar 法 1.10 による内点の更新を具体的に示す. これは,

$$A = (1, 1, -1, -1), \quad c = (36, 72, -36, 0)^T$$

とすれば, 問題 (7) の形をしているので, Karmarkar 法を適用できる. ちなみに, 最適解が $(x_1, x_2, x_3, x_4) = (2, 0, 2, 0)$ であり, 最適値が 0 であるので, 仮定 1.8 が満たされる. 初期内点を $(x_1^0, x_2^0, x_3^0, x_4^0) = (3/2, 1/2, 1, 1)$ とする. 射影変換は,

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \frac{4}{(2/3)x_1 + 2x_2 + x_3 + x_4} \begin{pmatrix} (2/3)x_1 \\ 2x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$$

であり, その逆変換は

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \frac{4}{(3/2)u_1 + (1/2)u_2 + u_3 + u_4} \begin{pmatrix} (3/2)u_1 \\ (1/2)u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

である.

初期内点を $(x_1^0, x_2^0, x_3^0, x_4^0) = (3/2, 1/2, 1, 1)$, $\alpha = 1/2$ として, Karmarkar 法による反復計算を実行する. まずはじめに, 式 (12) より

$$\tilde{A} = (3/2, 1/2, -1, -1), \quad \tilde{c} = (54, 36, -36, 0)^T$$

を計算する. 式 (16) より d を計算するために,

$$\tilde{A}\tilde{A}^T = \frac{9}{4} + \frac{1}{4} + 1 + 1 = \frac{9}{2}$$

を前もって求めると

$$d = \tilde{c} - \tilde{A}^T (\tilde{A}\tilde{A}^T)^{-1} \tilde{A}\tilde{c} - \frac{1}{n} ee^T \tilde{c}$$

$$\begin{aligned}
 &= \begin{pmatrix} 54 \\ 36 \\ -36 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{2}{9}(81 + 18 + 36) \begin{pmatrix} 3/2 \\ 1/2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} - \frac{54 + 36 - 36}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -9 \\ 15 \\ -39 \\ 33 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

と計算できる．ここで，

$$\|d\| = 32$$

となるので，式 (17) により u を計算すると

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \frac{1}{64} \begin{pmatrix} -9 \\ 15 \\ -39 \\ 33 \end{pmatrix} = \frac{1}{128} \begin{pmatrix} 137 \\ 113 \\ 167 \\ 95 \end{pmatrix}$$

となる．これから，逆変換により x^1 を求めると

$$\begin{pmatrix} x_1^1 \\ x_2^1 \\ x_3^1 \\ x_4^1 \end{pmatrix} = \frac{4}{(3/2)137 + (1/2)113 + 167 + 95} \begin{pmatrix} (3/2)137 \\ (1/2)113 \\ 167 \\ 95 \end{pmatrix} = \frac{1}{262} \begin{pmatrix} 411 \\ 113 \\ 334 \\ 190 \end{pmatrix}$$

となる．以上が，Karmarkar 法による 1 反復である．この x^1 を新しい内点として，アルゴリズムを続けることができる．

1.3 パス追跡法

線形計画問題の実行可能領域の内部に中心パスと呼ばれるなめらかなパスが存在し，このパスの一方の端点が最適解に収束する．パス追跡法は，中心パスを追跡することにより，最適解の近似解を求める方法である．中心パスについてより詳しくは，例えば水野 [4] を参照してください．

n 次元ユークリッド空間の正象限 $\mathcal{R}_+^n = \{x \in \mathcal{R}^n : x \geq 0\}$ の対数障壁関数を

$$p(x) = - \sum_{i=1}^n \log x_i \tag{19}$$

とする．これは， \mathcal{R}_+^n の内部を定義域とし， x がその境界に近づくとときに発散する狭義凸関数である．線形計画問題 (1) の目的関数にパラメータ $\mu > 0$ を重みとして対数障壁関数

$p(x)$ を加えた問題

$$\begin{aligned} & \text{最小化} && c^T x + \mu p(x) \\ & \text{制約条件} && Ax = b \end{aligned} \tag{20}$$

を考える．ここで， $p(x)$ の定義域は， $x > 0$ である．これは凸計画問題である．

仮定 1.15 問題 (1) に実行可能内点 x^0 と最適解が存在し，最適解の集合が有界である．

このとき，問題 (20) は唯一つの最適解を持つ ([4] 参照)．問題 (20) の最適条件は，制約条件 $Ax = b$ のラグランジュ乗数を $y \in \mathcal{R}^m$ とすれば

$$\begin{aligned} c - \mu X^{-1}e - A^T y &= 0 \\ Ax &= b \end{aligned} \tag{21}$$

と表される (演習問題)． $z = \mu X^{-1}e$ とすれば，

$$\begin{aligned} Ax &= b, \\ A^T y + z &= c, \\ Xz &= \mu e \end{aligned} \tag{22}$$

と書き換えられる．この条件と $x > 0$ ， $z > 0$ を満たす解を $(x(\mu), y(\mu), z(\mu))$ とする． $x(\mu)$ は凸計画問題 (20) の唯一つの解であり，解析的中心と呼ばれる．任意の $\mu > 0$ に対して，解析的中心 $x(\mu)$ が唯一つ存在し，集合 $P = \{x(\mu) : \mu > 0\}$ はパスになる ([4] 参照)．これを主問題の中心パスと呼ぶ．問題 (22) の条件は， $\mu \rightarrow 0$ のときに線形計画問題の最適条件に一致する．このことから推察できるように， $\mu \rightarrow 0$ のとき $x(\mu)$ は主問題 (1) の最適解に収束し， $(y(\mu), z(\mu))$ は双対問題 (2) の最適解に収束する．

パス追跡アルゴリズムは，初期パラメータ値 $\mu_0 > 0$ と解析的中心 $x(\mu_0)$ の近似点 x^0 が与えられたとき，数列 $\{\mu_k\}$ が 0 に収束するように μ_k を更新するステップとその μ_k に対する問題 (20) の最適解 $x(\mu_k)$ の近似点 x^k を求めるステップをから成る．このとき， μ_k が十分小さくなれば，得られた点 x^k は問題 (1) の近似解となる．

アルゴリズム 1.16 主問題のパス追跡法は，次のステップからなる．

ステップ 0 初期のパラメータを $\mu_0 > 0$ ，実行可能内点を x^0 とし， $k = 0$ とする．

ステップ 1 μ の値を定め， x^k から問題 (20) の近似解 x^{k+1} を求める．

ステップ 2 $\mu_{k+1} \in (0, \mu_k)$ を定める． k を一つ増加して，ステップ 1 へ行く．

このときのパラメータ μ_k の更新方法と問題 (20) の近似解法については様々な方法が提案されている．詳細については，Gonzaga [4] に各種のパス追跡法が要領よくまとめられている．理論的な結果としては，定数 $\gamma > 0$ に対して $\mu_{k+1} = (1 - \gamma/\sqrt{n})\mu_k$ として，

ニュートン法を使い問題 (20) の近似解を求めることにより，反復回数を $O(\sqrt{nL})$ とすることができる．

演習問題 1.17 問題 (20) の最適条件が (21) となることを示せ．

1.4 ポテンシャル減少法

ポテンシャル関数は，Karmarkar [3] により導入された．Karmarkar は，射影変換と組み合わせるアルゴリズムを提案したが，ここでは射影変換を使わないポテンシャル減少法を解説する．

主問題 (1) の最適値 ω^* の下界値 ω が既知であると仮定する．この下界値と定数 $\nu > 0$ を使い主問題のポテンシャル関数

$$f_\nu^P(\mathbf{x}, \omega) = (n + \nu) \log(\mathbf{c}^T \mathbf{x} - \omega) - \sum_{i=1}^n \log x_i$$

を定義する． \mathbf{x} が有界ならば，このポテンシャル関数の値を十分小さくすることにより，目的関数値 $\mathbf{c}^T \mathbf{x}$ と下界値 ω がともに最適値 ω^* に近づく．ポテンシャル減少法は，ポテンシャル関数値を減少させるように点 \mathbf{x} を更新するステップと下界値 ω を更新するステップから成る．

アルゴリズム 1.18 主問題 (1) のポテンシャル減少法は，次のステップからなる．

ステップ 0 初期実行可能内点を \mathbf{x}^0 とし， $k = 0$ とする．最適値の下界値 $\omega > 0$ を定める．

ステップ 1 $A\Delta\mathbf{x} = \mathbf{0}$ を満たす探索方向 $\Delta\mathbf{x}$ を求める．ポテンシャル関数 $f_\nu^P(\mathbf{x}^k + \alpha\Delta\mathbf{x}, \omega)$ をなるべく減少させるステップサイズ α を求め， $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha\Delta\mathbf{x}$ とする．

ステップ 2 可能ならば最適値の下界値 $\omega \leq \omega^*$ を更新する． k を一つ増加して，ステップ 1 へ行く．

ステップ 1 では，変数 α に関して次元探索を使うことにより，ポテンシャル関数の最小値を求めることもできる．探索方向 $\Delta\mathbf{x}$ を求めるには，ポテンシャル関数がなるべく減少するように問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & f_\nu^P(\mathbf{x}^k + \Delta\mathbf{x}, \omega) \\ \text{制約条件} & A\Delta\mathbf{x} = \mathbf{0} \\ & \mathbf{x}^k + \Delta\mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{array}$$

を考える．これは非線形計画問題であるので簡単に解けない．そこで，目的関数を一次関数

$$f_\nu^P(\mathbf{x}^k, \omega) + \nabla f_\nu^P(\mathbf{x}^k, \omega)^T \Delta \mathbf{x}$$

で近似し，アフィンスケーリング法の場合と同様に不等式制約をその十分条件である $\|\mathbf{X}_k^{-1} \Delta \mathbf{x}\| \leq 1$ に変更した問題

$$\begin{aligned} \text{最小化} \quad & \nabla f_\nu^P(\mathbf{x}^k, \omega)^T \Delta \mathbf{x} + f_\nu^P(\mathbf{x}^k, \omega) \\ \text{制約条件} \quad & \mathbf{A} \Delta \mathbf{x} = \mathbf{0} \\ & \|\mathbf{X}_k^{-1} \Delta \mathbf{x}\| \leq 1 \end{aligned} \quad (23)$$

を考える．ここで

$$\nabla f_\nu^P(\mathbf{x}^k, \omega) = \left(\frac{n + \nu}{\mathbf{c}^T \mathbf{x}^k - \omega} \mathbf{c} - \mathbf{X}_k^{-1} \mathbf{e} \right) \quad (24)$$

である． $\Delta \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{X}_k^{-1} \Delta \mathbf{x}$, $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} \mathbf{X}_k$ とすれば，問題 (23) は

$$\begin{aligned} \text{最小化} \quad & \nabla f_\nu^P(\mathbf{x}^k, \omega)^T \mathbf{X}_k \Delta \tilde{\mathbf{x}} + f_\nu^P(\mathbf{x}^k, \omega) \\ \text{制約条件} \quad & \tilde{\mathbf{A}} \Delta \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{0} \\ & \|\Delta \tilde{\mathbf{x}}\| \leq 1 \end{aligned} \quad (25)$$

と書き換えられる．アフィンスケーリング法の場合と同様に，この問題の最適解は，単位行列を \mathbf{E} とすれば

$$\mathbf{d} = (\mathbf{E} - \tilde{\mathbf{A}}^T (\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{A}}^T)^{-1} \tilde{\mathbf{A}}) \mathbf{X}_k \nabla f_\nu^P(\mathbf{x}^k, \omega)$$

を使い

$$\Delta \tilde{\mathbf{x}} = -\frac{\mathbf{d}}{\|\mathbf{d}\|} \quad (26)$$

となる (演習問題)．そして，問題 (23) の最適解は

$$\Delta \mathbf{x} = \mathbf{X}_k \Delta \tilde{\mathbf{x}}$$

となる．

ステップ 2 での下界値の更新方法を解説する．式 (24) と (26) より

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= \frac{\mathbf{c}^T \mathbf{x}^k - \omega}{n + \nu} (\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{A}}^T)^{-1} \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{X}_k \nabla f_\nu^P(\mathbf{x}^k, \omega) \\ \mathbf{z} &= \frac{\mathbf{c}^T \mathbf{x}^k - \omega}{n + \nu} \mathbf{X}_k^{-1} (\mathbf{e} + \mathbf{d}) \end{aligned}$$

とすれば

$$A^T y + z = c \tag{27}$$

が成立する (演習問題) . したがって, $z \geq 0$ ならば (y, z) が双対問題の実行可能解となり, $b^T y$ は最適値 ω^* の下界値となる . この下界値が現在の下界値 ω よりも大きい場合に値を更新する . 下界値が最適値よりも小さいとき, x^k が問題 (23) の最適解に十分近づけば, (y, z) が双対実行可能となり下界値が更新できる . Gonzaga [2] あるいは水野 [5] には, $O(\sqrt{n}L)$ 反復を達成するためのパラメータ値 ν とステップサイズ α の決め方が示されている .

演習問題 1.19 問題 (23) の最適解が, $d = (E - \tilde{A}^T (\tilde{A} \tilde{A}^T)^{-1} \tilde{A}) X_k \nabla f_\nu^P(x^k, \omega)$ を使い (26) により計算できることを示せ .

演習問題 1.20 式 (27) が成り立つことを示せ .

1.5 演習問題の略解

1.5.1 演習問題 1.4 の略解

問題 (4) において, $\tilde{x} = X_k^{-1} \Delta x$, あるいは $\Delta x = X_k \tilde{x}$ として, 変数ベクトル Δx を \tilde{x} に置き換えると

$$\begin{aligned} \text{最小化} & \quad c^T X_k \tilde{x} \\ \text{制約条件} & \quad A X_k \tilde{x} = 0 \\ & \quad \|\tilde{x}\| \leq 1 \end{aligned}$$

が得られる . ここで, $\tilde{c} = X_k c$, $\tilde{A} = A X_k$ とすれば,

$$\begin{aligned} \text{最小化} & \quad \tilde{c}^T \tilde{x} \\ \text{制約条件} & \quad \tilde{A} \tilde{x} = 0 \\ & \quad \|\tilde{x}\| \leq 1 \end{aligned} \tag{28}$$

となる . この問題は, 部分空間 $T = \{u | \tilde{A}u = 0\}$ 上で, 線形関数 $\tilde{c}^T \tilde{x}$ を最小化する単位ベクトルを求める問題である . その解 \tilde{x}^* は, 係数ベクトル \tilde{c} を部分空間 T に射影したベクトル u を長さ 1 にして逆符号にすれば求められる . したがって, 単位行列を E とすれば, 部分空間 T への射影行列が

$$P_T = E - \tilde{A}^T (\tilde{A} \tilde{A}^T)^{-1} \tilde{A}$$

であるので,

$$\begin{aligned} u &= (E - \tilde{A}^T (\tilde{A} \tilde{A}^T)^{-1} \tilde{A}) \tilde{c} \\ &= X_k (c - A^T (A X_k^2 A^T)^{-1} A X_k^2 c) \end{aligned}$$

となる．ゆえに， $u \neq 0$ ならば， $\tilde{x}^* = -u/\|u\|$ であり，

$$\begin{aligned} \Delta x^* &= X_k \tilde{x}^* \\ &= -\frac{X_k^2(c - A^T(A X_k^2 A^T)^{-1} A X_k^2 c)}{\|X_k(c - A^T(A X_k^2 A^T)^{-1} A X_k^2 c)\|} \end{aligned}$$

となる．

1.5.2 演習問題 1.5 の略解

数学的帰納法を使って証明する．まず，ステップ 0 から x^0 は実行可能内点である．次に， x^k が実行可能内点であると仮定する． Δx^* が問題 (4) の実行可能解であるので

$$A\Delta x^* = 0, \quad -X_k^{-1}\Delta x^* \leq e$$

が成立する．ここで， $\alpha \in (0, 1)$ であることに注意すれば

$$x^{k+1} = x^k + \alpha\Delta x^* = X_k(e + \alpha X_k^{-1}\Delta x^*) > 0$$

かつ

$$Ax^{k+1} = Ax^k + \alpha A\Delta x^* = b$$

となるので， x^{k+1} も実行可能内点である．

1.5.3 演習問題 1.6 の略解

問題 (4) あるいは (28) の最適値 $\tilde{c}^T \tilde{x}^*$ が 0 以下であることを示せばよい．それは， $x = 0$ が実行可能解であることからすぐに導くことができるが，以下では別証明をする．

u は \tilde{c} を部分空間 T に射影したベクトルであるので

$$u^T(\tilde{c} - u) = 0$$

が成立し，これより

$$\tilde{c}^T u = \|u\|^2$$

となる．ゆえに

$$\tilde{c}^T \tilde{x}^* = \frac{-\tilde{c}^T u}{\|u\|} = -\frac{\|u\|^2}{\|u\|} = -\|u\| \leq 0$$

である．

1.5.4 演習問題 1.11 の略解

問題 (15) は部分空間 $T = \{v | \tilde{A}v = 0, e^T v = 0\}$ 上で，線形関数 $\tilde{c}^T \Delta u$ を最小化する単位ベクトルを求める問題である．その解 Δu^* は，係数ベクトル \tilde{c} を部分空間 T に射影したベクトル d を長さ 1 にして逆符号にすれば求められる．単位行列を E とすれば，部分空間 T への射影行列は

$$P_T = E - \begin{pmatrix} \tilde{A}^T & e \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ e^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{A}^T & e \end{pmatrix} \right)^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{A} \\ e^T \end{pmatrix}$$

となる．ここで， $\tilde{A}e = Ax^k = \mathbf{0}$ より

$$\left(\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ e^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{A}^T & e \end{pmatrix} \right)^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{A}\tilde{A}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & e^T e \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} (\tilde{A}\tilde{A}^T)^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{1}{n} \end{pmatrix}$$

となるので

$$P_T = E - \tilde{A}^T (\tilde{A}\tilde{A}^T)^{-1} \tilde{A} - \frac{1}{n} ee^T$$

である．したがって

$$d = \left(E - \tilde{A}^T (\tilde{A}\tilde{A}^T)^{-1} \tilde{A} - \frac{1}{n} ee^T \right) \tilde{c}$$

となる．ゆえに， $d \neq \mathbf{0}$ ならば， $\Delta u^* = -d/\|d\|$ であり

$$\begin{aligned} u^* &= e + \Delta u^* \\ &= e - d/\|d\| \end{aligned}$$

となる．また $d = \mathbf{0}$ のとき， $\tilde{A}\Delta u = \mathbf{0}$ ， $e^T \Delta u = 0$ を満たす Δu について

$$0 = \Delta u^T d = \Delta u^T \tilde{c} - \Delta u^T \tilde{A}^T (\tilde{A}\tilde{A}^T)^{-1} \tilde{A} \tilde{c} - \frac{1}{n} \Delta u^T ee^T \tilde{c} = \Delta u^T \tilde{c}$$

であるので

$$\tilde{c}^T u = \tilde{c}^T (e + \alpha \Delta u) = \tilde{c}^T e$$

となる．ゆえに，問題 (13) の任意の実行可能解が最適解であり， $u = e$ も最適解となる．

1.5.5 演習問題 1.12 の略解

初期点が実行可能内点なので， $u = e$ が問題 (13) の実行可能内点であることを仮定し， $u = e + \alpha \Delta u$ が問題 (13) の実行可能内点となることを示せばよい． $\tilde{A}e = \mathbf{0}$ であることに注意すれば，式 (14) より

$$\begin{aligned} \tilde{A}u &= \tilde{A}e + \alpha \tilde{A}\Delta u = \mathbf{0} \\ e^T u &= e^T e + \alpha e^T \Delta u = n \end{aligned}$$

である．また， $\Delta u = -d/\|d\|$ と $\alpha \in (0, 1)$ であることに注意すれば，

$$u = e - \alpha d/\|d\| > \mathbf{0}$$

となる．よって， $u = e + \alpha \Delta u$ は問題 (13) の実行可能内点である．

1.5.6 演習問題 1.13 の略解

d が \tilde{c} を部分空間へ直交射影したベクトルなので

$$\tilde{c}^T d = \|d\|^2$$

となる．したがって，

$$\tilde{c}^T u = \tilde{c}^T (e - \alpha d/\|d\|) = \tilde{c}^T e - \alpha \|d\| \leq \tilde{c}^T e$$

となる．

1.5.7 演習問題 1.17 の略解

問題 (20) のラグランジュ関数は, ラグランジュ乗数ベクトルを \mathbf{y} とすれば

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} - \mu \sum_{i=1}^n \log x_i - \mathbf{y}^T (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})$$

となる. したがって, $(\log x_i)' = 1/x_i$ より, 問題 (20) の最適条件は

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \mathbf{c} - \mu \mathbf{X}^{-1} \mathbf{e} - \mathbf{A}^T \mathbf{y} = \mathbf{0} \\ \mathbf{A}\mathbf{x} &= \mathbf{b} \end{aligned}$$

となる.

1.5.8 演習問題 1.19 の略解

問題 (23) は, $\Delta \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{X}_k^{-1} \Delta \mathbf{x}$, $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}\mathbf{X}_k$ とすれば, 問題 (25), すなわち

$$\begin{aligned} \text{最小化} \quad & \nabla f_{\nu}^P(\mathbf{x}^k, \omega)^T \mathbf{X}_k \Delta \tilde{\mathbf{x}} + f_{\nu}^P(\mathbf{x}^k, \omega) \\ \text{制約条件} \quad & \tilde{\mathbf{A}} \Delta \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{0} \\ & \|\Delta \tilde{\mathbf{x}}\| \leq 1 \end{aligned}$$

に書き換えることができる. この問題は部分空間 $T = \{\Delta \tilde{\mathbf{x}} | \tilde{\mathbf{A}} \Delta \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{0}\}$ 上で, 線形関数 $\nabla f_{\nu}^P(\mathbf{x}^k, \omega)^T \mathbf{X}_k \Delta \tilde{\mathbf{x}}$ を最小化する単位ベクトルを求める問題である. その解 $\Delta \tilde{\mathbf{x}}^*$ は, 係数ベクトル $\mathbf{X}_k \nabla f_{\nu}^P(\mathbf{x}^k, \omega)$ を部分空間 T に射影したベクトル \mathbf{d} を長さ 1 にして逆符号にすれば求められる. したがって, 単位行列を \mathbf{E} とすれば, 部分空間 T への射影行列が

$$\mathbf{P}_T = \mathbf{E} - \tilde{\mathbf{A}}^T (\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{A}}^T)^{-1} \tilde{\mathbf{A}}$$

であるので,

$$\mathbf{d} = (\mathbf{E} - \tilde{\mathbf{A}}^T (\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{A}}^T)^{-1} \tilde{\mathbf{A}}) \mathbf{X}_k \nabla f_{\nu}^P(\mathbf{x}^k, \omega)$$

となる. ゆえに, $\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$ ならば, $\Delta \tilde{\mathbf{x}}^* = -\mathbf{d}/\|\mathbf{d}\|$ となる.

1.5.9 演習問題 1.20 の略解

$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}\mathbf{X}_k$ と (24) より

$$\begin{aligned} \mathbf{z} &= \frac{\mathbf{c}^T \mathbf{x}^k - \omega}{n + \nu} \mathbf{X}_k^{-1} (\mathbf{e} + \mathbf{d}) \\ &= \frac{\mathbf{c}^T \mathbf{x}^k - \omega}{n + \nu} \left(\mathbf{X}_k^{-1} \mathbf{e} + \nabla f_{\nu}^P(\mathbf{x}^k, \omega) - \mathbf{A}^T (\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{A}}^T)^{-1} \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{X}_k \nabla f_{\nu}^P(\mathbf{x}^k, \omega) \right) \\ &= \mathbf{c} - \mathbf{A}^T \mathbf{y} \end{aligned}$$

となる. ゆえに, $\mathbf{A}^T \mathbf{y} + \mathbf{z} = \mathbf{c}$ が成り立つ.

謝辞: 本テキストの演習問題の略解の作成を手伝ってくれた清卓馬君 (東工大大学院生) に感謝します.

参考文献

- [1] Dikin, I. I., Iterative Solution of Problems of Linear and Quadratic Programming, *Soviet Mathematics Doklady* **8** (1967) 674-675.
- [2] Gonzaga, C. C.: “Large Step Path-Following Methods for Linear Programming, Part II: Potential Reduction Method”, *SIAM Journal on Optimization* **1** (1991) 280-292.
- [3] Karmarkar, N., A New Polynomial-Time Algorithm for Linear Programming, *Combinatorica* **4** (1984) 373-395.
- [4] 水野眞治：学習・研究用テキスト内点法 (1A) 解析的中心と中心パス，Web 上のテキスト，http://www.me.titech.ac.jp/~mizu_lab/text/ (2010)
- [5] 水野眞治：学習・研究用テキスト内点法 (2D) 主ポテンシャル減少法，Web 上のテキスト，http://www.me.titech.ac.jp/~mizu_lab/text/ (2010)