数理計画法特論 (2)

2015 年 4 月 水野 眞治 (東京工業大学)

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

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{1}$$

とする．上の問題を主問題とすれば，その双対問題は

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

となる．点 $\boldsymbol{x} \in \mathcal{R}^n$ は，$\boldsymbol{x} > \boldsymbol{0}$ を満たすならば，**内点**と呼ばれ，さらに $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を満たすならば主問題 (1) の**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 $(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) \in \mathcal{R}^m \times \mathcal{R}^n$ は，$\boldsymbol{z} > \boldsymbol{0}$ を満たすならば，内点と呼ばれ，さらに $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{c}$ を満たすならば双対問題 (2) の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[2] が多項式オーダの内点法を提案し，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 $\boldsymbol{A}$ 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 $\boldsymbol{x}^0$ が既知である．

主アフィンスケーリング法では，この内点 $\boldsymbol{x}^0$ 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 $\{\boldsymbol{x}^k\}$ を生成する．今，k 番目の内点 $\boldsymbol{x}^k$ がすでに求められているとして，次の内点 $\boldsymbol{x}^{k+1}$ の計算方法を示す．

主アフィンスケーリングでは，点 $\boldsymbol{x}^k$ において探索方向 $\Delta\boldsymbol{x}$ を求め，あるステップサイズ α を定

めて，次の点を

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

と計算する．この右辺の式を線形計画問題 (1) の $\boldsymbol{x}$ に代入すると，問題

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

が得られる．ここで，目的関数に定数項 $\boldsymbol{c}^T \boldsymbol{x}^k$ は不要である．また，$\boldsymbol{x}^k$ が実行可能解なので，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{b}$ より，上の等式は $\alpha \boldsymbol{A} \Delta \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ と変形できる．ベクトル $\boldsymbol{x}^k = (x_1^k, x_2^k. \cdots, x_n^k)^T$ の各要素を対角要素とする対角行列を

$$\boldsymbol{X}_k = \mathrm{diag}(\boldsymbol{x}^k) = \begin{pmatrix} x_1^k & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & x_n^k \end{pmatrix}$$

と記し，すべての要素が 1 であるベクトル $(1, 1, \cdots, 1)^T$ を $\boldsymbol{e}$ と記せば，$\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{X}_k \boldsymbol{e}$ 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 $\Delta \boldsymbol{x}$ 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

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \boldsymbol{c}^T \Delta \boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A} \Delta \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \\ & -\boldsymbol{X}_k^{-1} \Delta \boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{e} \end{array}$$

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 $-\boldsymbol{X}_k^{-1} \Delta \boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{e}$ をその十分条件である $\|\boldsymbol{X}_k^{-1} \Delta \boldsymbol{x}\| \leq 1$ に取り換えて，次の問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \boldsymbol{c}^T \Delta \boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A} \Delta \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \\ & \|\boldsymbol{X}_k^{-1} \Delta \boldsymbol{x}\| \leq 1 \end{array} \tag{4}$$

を考える．この問題は，変数ベクトル $\boldsymbol{X}_k^{-1} \Delta \boldsymbol{x}$ 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．すなわち，問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \boldsymbol{d}^T \boldsymbol{u} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{B}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \\ & \|\boldsymbol{u}\| \leq 1 \end{array}$$

の最適解は，ベクトル $\boldsymbol{d}$ を部分空間 $\{\boldsymbol{u} | \boldsymbol{B}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}\}$ に射影したベクトル

$$\boldsymbol{u}' = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}^T (\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^T)^{-1} \boldsymbol{B}) \boldsymbol{d}$$

を長さ 1 にした逆方向のベクトル $-\boldsymbol{u}'/\|\boldsymbol{u}'\|(\|\boldsymbol{u}'\| = \boldsymbol{0}$ のときは $\boldsymbol{0})$ となる．したがって，問題 (4) の最適解は，$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{X}_k \boldsymbol{c}$, $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_k, \boldsymbol{u} = \boldsymbol{X}_k^{-1} \boldsymbol{c}$ と置き換えることにより，$\boldsymbol{y}^k =$

$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_k^2\boldsymbol{A}^T)^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_k^2\boldsymbol{c}$，$\boldsymbol{z}^k = \boldsymbol{c} - \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}^k$ に対して，$\boldsymbol{z}^k \neq \boldsymbol{0}$ ならば

$$\Delta\boldsymbol{x}^* = -\frac{\boldsymbol{X}_k^2\boldsymbol{z}^k}{\|\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{z}^k\|}$$

となる． このとき，$\boldsymbol{z}^k = \boldsymbol{0}$ ならば，$\boldsymbol{x}^k$ は主問題 (1) の最適解であり，逆に $\boldsymbol{x}^k$ が主問題 (1) の最適解ならば，$\boldsymbol{z}^k = \boldsymbol{0}$ である．上の解 $\Delta\boldsymbol{x}^*$ を点 $\boldsymbol{x}^k$ 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) の初期内点を $\boldsymbol{x}^0$ とし，$k = 0$，$\alpha \in (0,1)$ とする．
ステップ 1　点 $\boldsymbol{x}^k$ において，$\boldsymbol{y}^k = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_k^2\boldsymbol{A}^T)^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_k^2\boldsymbol{c}$，$\boldsymbol{z}^k = \boldsymbol{c} - \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}^k$ を計算し，$\boldsymbol{z}^k = \boldsymbol{0}$ ならば終了する．さもなければ $\Delta\boldsymbol{x}^* = -\frac{\boldsymbol{X}_k^2\boldsymbol{z}^k}{\|\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{z}^k\|}$ を計算する．
ステップ 2　次の点を $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \alpha\Delta\boldsymbol{x}^*$ 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，$\|\boldsymbol{z}^k\| \leq \epsilon$ が成立した時点で，アルゴリズムを終了し，$\boldsymbol{x}^k$ 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．$\boldsymbol{x}^k$ が内点のとき，ステップサイズ α を，$\boldsymbol{x}^{k+1} \geq \boldsymbol{0}$ を満たす最大の値

$$\bar{\alpha} = \max\{\alpha | \boldsymbol{x}^k + \alpha\Delta\boldsymbol{x}^* \geq \boldsymbol{0}\} \tag{5}$$

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**という．

1.2　Karmarkar 法

1984 年に Karmarkar[2] 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，

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \\ & \boldsymbol{e}^T\boldsymbol{x} = n \\ & \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{6}$$

という形をしている．ここで，行列 $\boldsymbol{A}$ は $m \times n$ であり，$\boldsymbol{e} = (1, 1, \cdots, 1)^T$ 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 $\boldsymbol{x}$ が部分空間

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

と単体

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

の交わり $T \cap S$ 上にあるという条件のもとで，線形関数 $\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x}$ 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 1.4　線形計画問題 (6) には最適解が存在し，その最適値が 0 である．

仮定 1.5　線形計画問題 (6) の実行可能内点 $\boldsymbol{x}^0$ が既知である．

Karmarkar 法では，$\boldsymbol{x}^0$ を初期点として，実行可能内点の列 $\{\boldsymbol{x}^k\}$ を生成する．いま，k 番目の実行可能内点 $\boldsymbol{x}^k$ 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 $\boldsymbol{x}^k$ 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 $\boldsymbol{x}^k$ 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 $\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{X}_k^{-1}\boldsymbol{x}$ を使って，現在の点 $\boldsymbol{x}^k$ を $\boldsymbol{e}$ 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

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

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

$$\boldsymbol{u} = n\frac{\boldsymbol{X}_k^{-1}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{X}_k^{-1}\boldsymbol{x}} \tag{7}$$

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

$$\boldsymbol{u} = n\frac{\boldsymbol{X}_k^{-1}\boldsymbol{x}^k}{\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{X}_k^{-1}\boldsymbol{x}^k} = \boldsymbol{e}$$

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 $\Delta\boldsymbol{u}$ なら，ステップサイズ α が 1 以下であれば，次の点

$$\boldsymbol{e} + \alpha\Delta\boldsymbol{u} \tag{8}$$

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

$$\boldsymbol{x} = \frac{n\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{u}}{\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{u}} \tag{9}$$

となる．この関係式 (9) を問題 (6) の $\boldsymbol{x}$ に代入し，条件 $\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{u} = n$ を加えると

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \frac{n\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{u}}{\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{u}} \\ \text{制約条件} & \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_k\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \\ & \boldsymbol{e}^T\boldsymbol{u} = n \\ & \boldsymbol{u} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{10}$$

となる．仮定 1.4 より，この問題の最適値が 0 であり，$\boldsymbol{u} \in S$ 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 $\boldsymbol{c}^T \boldsymbol{X}_k \boldsymbol{u}$ に置き換えることができる．また，

$$\tilde{\boldsymbol{c}} = \boldsymbol{X}_k \boldsymbol{c},\ \tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_k \tag{11}$$

とすれば，上の問題 (10) は

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \tilde{\boldsymbol{c}}^T \boldsymbol{u} \\ \text{制約条件} & \tilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \\ & \boldsymbol{e}^T \boldsymbol{u} = n \\ & \boldsymbol{u} \geq \boldsymbol{0} \end{array} \tag{12}$$

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

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \tilde{\boldsymbol{c}}^T \Delta\boldsymbol{u} \\ \text{制約条件} & \tilde{\boldsymbol{A}}\Delta\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \\ & \boldsymbol{e}^T \Delta\boldsymbol{u} = 0 \\ & -\Delta\boldsymbol{u} \leq \boldsymbol{e} \end{array}$$

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 $-\Delta\boldsymbol{u} \leq \boldsymbol{e}$ を，その十分条件である，$\|\Delta\boldsymbol{u}\| \leq 1$ に置き換えると

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & \tilde{\boldsymbol{c}}^T \Delta\boldsymbol{u} \\ \text{制約条件} & \tilde{\boldsymbol{A}}\Delta\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \\ & \boldsymbol{e}^T \Delta\boldsymbol{u} = 0 \\ & \|\Delta\boldsymbol{u}\| \leq 1 \end{array} \tag{13}$$

となる．この問題 (13) の最適解は，目的関数の係数ベクトル $\tilde{\boldsymbol{c}}$ 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 I を使って

$$\boldsymbol{d} = \left(I - \tilde{\boldsymbol{A}}^T (\tilde{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{A}}^T)^{-1} \tilde{\boldsymbol{A}} - \frac{1}{n}\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^T \right) \tilde{\boldsymbol{c}} \tag{14}$$

とすれば，$\boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{e} - \boldsymbol{d}/\|\boldsymbol{d}\|$ である．ここで，もし $\boldsymbol{d} = \boldsymbol{0}$ ならば $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{e}$ は問題 (12) の最適解である．Karmarkar 法は，この方向 $\boldsymbol{d}$ を採用し，更新式

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{e} - \alpha\boldsymbol{d}/\|\boldsymbol{d}\| \tag{15}$$

により $\boldsymbol{u}$ を求める．更新した $\boldsymbol{u}$ から逆変換により $\boldsymbol{x}$ を求め，それを $\boldsymbol{x}^{k+1}$ 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 1.6　Karmarkar 法は，次のステップから成る．

ステップ 0　問題 (6) の初期内点を $\boldsymbol{x}^0$ とし，$k = 0$，$\alpha \in (0, 1)$ とする．

ステップ 1　点 $\boldsymbol{x}^k$ から式 (11) により $\tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_k$ と $\tilde{\boldsymbol{c}} = \boldsymbol{X}_k \boldsymbol{c}$ を計算する．式 (14) により $\boldsymbol{d}$ をもとめ，式 (15) により $\boldsymbol{u}$ を計算する．

ステップ 2　逆変換 (9) により $\boldsymbol{u}$ から $\boldsymbol{x}$ を求め，それを $\boldsymbol{x}^{k+1}$ 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 (6) 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

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

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 $\boldsymbol{c}^T \boldsymbol{x}$ 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 $\boldsymbol{u}$ 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

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

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 $\boldsymbol{u}$ を更新すれば，$\boldsymbol{x}$ 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，$\boldsymbol{x}$ 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 $f_{\tilde{\boldsymbol{c}}}(\boldsymbol{u})$ 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 1.6 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一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．

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] Karmarkar, N., A New Polynomial-Time Algorithm for Linear Programming, *Combinatorica* **4** (1984) 373-395