

学習用テキスト 内点法 (4)

インフィージブル内点法

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

線形計画問題を解く内点法は、初期点として実行可能な内点が得られるときには、実行可能な内点列を生成するが、そのような内点が得られないときには、実行可能な内点を初期点として、実行可能とは限らない内点列を生成する。その場合の内点法をインフィージブル内点法という。ここでは、線形計画問題の主問題と双対問題を同時に解くインフィージブル内点法のアルゴリズムを解説する。取り上げるアルゴリズムは、中心パスを追跡するパス追跡法、Lustig et al. [2] のアルゴリズム、Mehrotra [3] のプレディクタ・コレクタ法、それにインフィージブル中心パスを追跡する場合の Mizuno, Todd, and Ye [7] のプレディクタ・コレクタ法である。

目次

1	インフィージブル内点法	1
1.1	パス追跡法	2
1.2	Lustig et al. のアルゴリズム	7
1.3	近傍を使ったパス追跡法	7
1.4	Mehrotra のプレディクタ・コレクタ法	9
1.5	インフィージブル中心パス	11
1.6	MTY プレディクタ・コレクタ法	13
1.7	おわりに	15

1 インフィージブル内点法

実行可能とは限らない初期点を使うことのできる内点法をインフィージブル内点法と呼ぶ。初期点の実行不能な場合には、多くの場合アルゴリズムの途中で生成される点も実行不能である。インフィージブル内点法は、実際に計算効率がよいと言われ、最適化問題を解くほとんどのソフトウェアパッケージに採用されている。アルゴリズムとして、とても

単純であり，その手順を理解する，あるいはプログラムを作成するといったことが簡単にできるという長所も持ち合わせている．インフィージブル内点法は，主に主問題と双対問題を同時に解くアルゴリズムとして提案され，研究されてきた．ここでは線形計画問題の主双対問題を解くインフィージブル内点法を解説する．

インフィージブル内点法は，アルゴリズムとして単純である反面，理論的解析が実行可能内点を初期点とする場合に比べ難しい．主双対問題の実行可能な初期点を使う内点法では，解くべき問題が実行可能であり，最適解を持つことが問題を解く前から理論的に判明している．しかし，インフィージブル内点法で解く問題の実行可能性などは不明である．したがって，与えられた問題をインフィージブル内点法で解くためには，実行可能性または解の存在性を判定し，さらに解が存在する場合には一つの近似解を求めることが必要となる．

次の 1.1 節ではインフィージブル内点法のパス追跡法を解説し，1.2 節で Lustig et al. [2] のアルゴリズムを紹介する．このアルゴリズムは，実用的ではあるが，生成された点列が最適解に収束するか，理論的に保証されていない．そこで，1.3 節では，中心パスの近傍を使ったパス追跡法を説明する．その後，1.4 節で，実用的に効率よいといわれている Mehrotra [3] のプレディクタ・コレクタ法を紹介する．1.5 節では，初期点の近くから出発するインフィージブル中心パスを解説し，そのパスを追跡する Mizuno, Todd, and Ye [7] によるプレディクタ・コレクタ法を 1.6 節で紹介する．なお，インフィージブル主双対ポテンシャル減少法も Mizuno, Kojima, and Todd [6] により提案されているが，少し複雑であるため，ここでは取り上げていない．

1.1 パス追跡法

m と n を正の整数とし， $m \times n$ 行列 A ， m 次元ベクトル b ， n 次元ベクトル c に対して，標準形の線形計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & c^T x \\ \text{制約条件} & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{array} \quad (1)$$

とその双対問題

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

を扱う．これらの問題に対する主双対問題は，条件

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ A^T y + z &= c \\ Xz &= 0 \\ x \geq 0, z &\geq 0 \end{aligned} \quad (3)$$

を満たす変数ベクトル (x, y, z) を求める問題である．ここで， $X = \text{diag}(x)$ は，ベクトル $e = (1, 1, \dots, 1)^T$ に対して， $Xe = x$ を満たす対角行列である．この主双対問題の任意の解を (x^*, y^*, z^*) とすれば， x^* は線形計画問題 (1) の解であり， (y^*, z^*) はその双対問題 (2) の解である．主双対問題の解析的中心は，パラメータを $\mu > 0$ とするとき，方程式系

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ A^T y + z &= c \\ Xz &= \mu e \\ x \geq 0, z &\geq 0 \end{aligned} \quad (4)$$

の解である．主双対問題 (3) に実行可能内点が存在すれば，任意の $\mu > 0$ に対して解析的中心が存在する．それを $(x(\mu), y(\mu), z(\mu))$ とすれば，解析的中心の集合

$$P_1 = \{(x(\mu), y(\mu), z(\mu)) : \mu > 0\} \quad (5)$$

は，なめらかなパスとなる． $\mu \rightarrow 0$ のとき，パス上の点 $(x(\mu), y(\mu), z(\mu))$ は，最適解集合上の一点 (x^*, y^*, z^*) に収束し，この x^* は問題 (1) の解である．したがって，十分小さな $\mu > 0$ に対して，解析的中心の近似点を求めることにより，線形計画問題 (1) を解くことができる．

条件 $x > 0$ と $z > 0$ を満たすとき， (x, y, z) を内点という．初期内点を (x^0, y^0, z^0) とする．インフィージブル内点法の最大の特徴は，この初期点として任意の (実行不能な) 内点を選ぶことができることである．初期点から点列 $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ を生成するので，第 k 反復目の内点 (x^k, y^k, z^k) が得られていると仮定し，次の内点 $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1})$ の求め方を示す．パラメータ $\mu > 0$ の値を定め，現在の点 (x^k, y^k, z^k) において，解析的中心を定義する方程式系 (4) にニュートン法を適用したときに計算されるニュートン方向を $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ とする．一般に，方程式系 $f(u) = 0$ に対する点 \bar{u} でのニュートン方向 Δu は，線形方程式系 $\nabla f(\bar{u})\Delta u = -f(\bar{u})$ の解である．したがって，方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ は線形方程式系

$$\begin{aligned} A\Delta x &= -(Ax^k - b) \\ A^T \Delta y + \Delta z &= -(A^T y^k + z^k - c) \\ Z_k \Delta x + X_k \Delta z &= \mu e - X_k z^k \end{aligned} \quad (6)$$

の解である．この方程式系を解くことにより，ニュートン方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ は，順に

$$\begin{aligned}\Delta y &= -(\mathbf{AZ}_k^{-1}\mathbf{X}_k\mathbf{A}^T)^{-1}(\mathbf{AZ}_k^{-1}(\mu\mathbf{e} - \mathbf{X}_k\mathbf{z}^k) \\ &\quad + (\mathbf{Ax}^k - \mathbf{b}) + \mathbf{AZ}_k^{-1}\mathbf{X}_k(\mathbf{A}^T\mathbf{y}^k + \mathbf{z}^k - \mathbf{c})) \\ \Delta z &= -\mathbf{A}^T\Delta\mathbf{y} - (\mathbf{A}^T\mathbf{y}^k + \mathbf{z}^k - \mathbf{c}) \\ \Delta x &= -\mathbf{Z}_k^{-1}\mathbf{X}_k\Delta\mathbf{z} + \mu\mathbf{Z}_k^{-1}\mathbf{e} - \mathbf{x}^k\end{aligned}\tag{7}$$

と計算できる．現在の点からその方向に，主問題と双対問題の変数に関して別々のステップサイズを進み，次の点を

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}^{k+1} \\ \mathbf{y}^{k+1} \\ \mathbf{z}^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}^k + \alpha_P\Delta\mathbf{x} \\ \mathbf{y}^k + \alpha_D\Delta\mathbf{y} \\ \mathbf{z}^k + \alpha_D\Delta\mathbf{z} \end{pmatrix}\tag{8}$$

と求める．ただし，次の点も内点であるために， $\mathbf{x}^{k+1} > \mathbf{0}$ と $\mathbf{z}^{k+1} > \mathbf{0}$ を満たすステップサイズ α_P と α_D を定める必要がある．もちろん，ステップサイズを等しくして， $\alpha_P = \alpha_D$ とすることも可能である．以上の議論をまとめれば，アルゴリズムは次のようになる．

アルゴリズム 1.1 実行可能とは限らない初期内点を使う主双対パス追跡法は，次のステップから成る．

ステップ 0 初期内点を $(\mathbf{x}^0, \mathbf{y}^0, \mathbf{z}^0)$ とし， $k = 0$ とする．

ステップ 1 内点 $(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^k, \mathbf{z}^k)$ において，パラメータ μ の値を定めて，方程式系 (6) の解 $(\Delta\mathbf{x}, \Delta\mathbf{y}, \Delta\mathbf{z})$ を式 (7) により計算する．

ステップ 2 ステップサイズ $\alpha_P > 0$ と $\alpha_D > 0$ を定めて，次の点 $(\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{y}^{k+1}, \mathbf{z}^{k+1})$ を (8) により求める． k を 1 増加して，ステップ 1 へ行く．

ここで，反復ごとのパラメータ μ とステップサイズ α_P と α_D の決め方を変えることにより，様々なアルゴリズムを作ることができる．

演習問題 1.2 線形方程式系 (6) の解 $(\Delta\mathbf{x}, \Delta\mathbf{y}, \Delta\mathbf{z})$ が式 (7) で計算できることを示せ．

演習問題 1.3 アルゴリズム 1.1 で生成される点列を $\{(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^k, \mathbf{z}^k)\}$ とすれば，各反復で

$$\begin{aligned}\mathbf{Ax}^{k+1} - \mathbf{b} &= (1 - \alpha_P)(\mathbf{Ax}^k - \mathbf{b}) \\ \mathbf{A}^T\mathbf{y}^{k+1} + \mathbf{z}^{k+1} - \mathbf{c} &= (1 - \alpha_D)(\mathbf{A}^T\mathbf{y}^k + \mathbf{z}^k - \mathbf{c})\end{aligned}$$

が成立することを示せ．

例 1.4 標準形の線形計画問題の例を

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

とすれば, その双対問題は,

$$\begin{array}{ll} \text{最小化} & 4y_1 + 5y_2 \\ \text{制約条件} & 2y_1 + y_2 + z_1 = -1 \\ & y_1 + 3y_2 + z_2 = -1 \\ & y_1 + z_3 = 0 \\ & y_2 + z_4 = 0 \\ & (z_1, z_2, z_3, z_4)^T \geq \mathbf{0} \end{array}$$

となる. 主問題の (実行不能な) 初期内点を $x^0 = (2, 2, 2, 2)^T$, 双対問題の (実行不能な) 初期内点を $y^0 = (0, 0)^T$, $z^0 = (2, 2, 2, 2)$ とする. $\mu_0 = (4 + 4 + 4 + 4)/4 = 4$ であるので, $\mu = 0.5\mu_0 = 2$, $\alpha_P = \alpha_D = 1/2$ のときに, パス追跡法よる次の点を計算する. まず,

$$Ax^0 - b = \begin{pmatrix} 8 - 4 \\ 10 - 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix}, A^T y^0 + z^0 - c = \begin{pmatrix} 2 - (-1) \\ 2 - (-1) \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (9)$$

である. この場合, $X_0 = 2E$, $Z_0 = 2E$ であり, $Z_0^{-1}X_0 = E$, $X_0z^0 = 4e$ となるので, 式 (7) より, ベクトル $\Delta y = (\Delta y_1, \Delta y_2)^T$ は, 一次方程式系

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta y_1 \\ \Delta y_2 \end{pmatrix} \\ &= - \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 1 \end{pmatrix} (2E)^{-1} (2e - 4e) - \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

の解であるから,

$$\Delta y = -\frac{1}{41} \begin{pmatrix} 51 \\ 29 \end{pmatrix}$$

となる．これより

$$\begin{pmatrix} \Delta z_1 \\ \Delta z_2 \\ \Delta z_3 \\ \Delta z_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{41} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 51 \\ 29 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{41} \begin{pmatrix} 8 \\ 15 \\ -31 \\ -53 \end{pmatrix}$$

となり

$$\begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \Delta x_3 \\ \Delta x_4 \end{pmatrix} = -\frac{1}{41} \begin{pmatrix} 8 \\ 15 \\ -31 \\ -53 \end{pmatrix} + 2(2\mathbf{E})^{-1}\mathbf{e} - 2\mathbf{e} = \frac{1}{41} \begin{pmatrix} -49 \\ -56 \\ -10 \\ 12 \end{pmatrix}$$

となる．したがって， $\alpha_P = \alpha_D = 1/2$ より，次の点は

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \frac{1}{41} \begin{pmatrix} -49 \\ -56 \\ -10 \\ 12 \end{pmatrix} = \frac{1}{82} \begin{pmatrix} 115 \\ 108 \\ 154 \\ 176 \end{pmatrix} \\ \mathbf{y} &= \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \frac{1}{41} \begin{pmatrix} 51 \\ 29 \end{pmatrix} = -\frac{1}{82} \begin{pmatrix} 51 \\ 29 \end{pmatrix} \\ \mathbf{z} &= \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \frac{1}{41} \begin{pmatrix} 8 \\ 15 \\ -31 \\ -53 \end{pmatrix} = \frac{1}{82} \begin{pmatrix} 172 \\ 179 \\ 133 \\ 111 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

である．このとき

$$\begin{aligned} \mathbf{Ax} - \mathbf{b} &= \begin{pmatrix} \frac{230+108+154}{82} - 4 \\ \frac{115+324+176}{82} - 5 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix} \\ \mathbf{A}^T \mathbf{y} + \mathbf{z} - \mathbf{c} &= -\frac{1}{82} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 51 \\ 29 \end{pmatrix} + \frac{1}{82} \begin{pmatrix} 172 \\ 179 \\ 133 \\ 111 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

である．これより，初期点の場合 (9) と比べて，制約式の残差が半分となっていることがわかる．また，双対ギャップは

$$\mathbf{x}^T \mathbf{z} = \frac{1}{82} \frac{1}{82} (115 \times 172 + 108 \times 179 + 154 \times 133 + 176 \times 111) = 11 \frac{63}{82}$$

となり，初期点での双対ギャップ $(\mathbf{x}^0)^T \mathbf{z}^0 = 16$ よりだいぶ減少していることが見てとれる．このように，インフィージブル内点法では，各反復で制約式の残差と双対ギャップを減少させることにより，最適解に近づく点列を生成する．

1.2 Lustig et al. のアルゴリズム

Lustig et al. [2] が提案したインフィージブル内点法では、簡単な方法によりパラメータ μ の値とステップサイズ α_P と α_D を決めている。まず、二つの定数 $\gamma \in (0, 1)$ と $\lambda \in (0, 1)$ を用意する。Lustig et al. [2] は、 $\gamma = 1/n$ あるいは $\gamma = 1/\sqrt{n}$ とし、 λ として 1 に近い値 (0.99 など) を使っている。第 k 反復目の点を (x^k, y^k, z^k) とするとき、 $\mu_k = (x^k)^T z^k / n$ に対して、パラメータ値を

$$\mu = \gamma \mu_k$$

とする。この μ に対して、探索方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ を式 (7) により計算する。次の点 $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1})$ も内点であるためには、ステップサイズをそれぞれ

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_P &= \max\{\alpha : x^k + \alpha \Delta x \geq 0\} \\ \hat{\alpha}_D &= \max\{\alpha : z^k + \alpha \Delta z \geq 0\}\end{aligned}$$

より小さくする必要がある。そこで、定数 $\lambda \in (0, 1)$ を使い、

$$\alpha_P = \lambda \hat{\alpha}_P, \quad \alpha_D = \lambda \hat{\alpha}_D$$

とすることにより、内点が得られる。 λ の値が大きいほど長いステップを進むことができるが、1 に近いと領域 $\{(x, y, z) : x \geq 0, z \geq 0\}$ の境界に近づくので次回以降のステップサイズが短くなる可能性がある。 $\Delta x \geq 0$ または $\Delta z \geq 0$ のときには、 $\hat{\alpha}_P$ または $\hat{\alpha}_D$ が無限大となる。このような場合にもアルゴリズムが実行できるように、 α_P と α_D の上界を設定する必要がある。また、主問題の探索方向 Δx が目的関数の増加方向である場合には、ステップサイズ α_P をおまわり大きく (1 以上に) しないほうがよい。双対問題の探索方向 $(\Delta y, \Delta z)$ が目的関数の減少方向である場合にも、同様である。

注意 1.5 主双対内点法では、ほとんどのアルゴリズムの各反復で双対ギャップが減少するが、主問題の目的関数が増加する、あるいは双対問題の目的関数が減少することがある。

1.3 近傍を使ったパス追跡法

パス追跡法は、近傍を使うことにより、最適解に大域的に収束する、あるいは多項式オーダの反復回数で解を求めることが可能となる。ここでは、そのようなアルゴリズムを説明する。ただし、その理論的な収束性などについては説明しない。大域的な収束性につ

いては Kojima, Megiddo, and Mizuno [1], 多項式オーダの反復による収束については Zhang [8] あるいは Mizuno [4] を参照していただきたい.

主双対問題 (3) について, 式 (5) で定義された中心パス P_1 と初期内点 (x^0, y^0, z^0) を内部に含む近傍を N とする. たとえば, $\mu_0 = (x^0)^T z^0 / n$ と実数 $\beta \in (0, 1)$ に対して, 初期点が

$$X_0 z^0 \geq (1 - \beta) \mu_0 e$$

を満たすとき, 定数 $\eta \in (0, 1]$ に対して

$$N_1(\beta, \eta) = \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \left| \begin{array}{l} \mu \|Ax^0 - b\| \geq \eta \mu_0 \|Ax - b\|, \\ \mu \|A^T y^0 + z^0 - c\| \geq \eta \mu_0 \|A^T y + z - c\|, \\ Xz \geq (1 - \beta) \mu e, \mu = x^T z / n, x > 0, z > 0 \end{array} \right. \right\}$$

は, 中心パスと初期点を含む近傍となる (演習問題).

演習問題 1.6 集合 $N_1(\beta, \eta)$ が中心パスと初期点を含むことを示せ.

近傍 $N_1(\beta, \eta)$ 上の任意の点列を $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ とする. $k \rightarrow \infty$ のとき, $(x^k)^T z^k \rightarrow 0$ ならば, $\mu^k = (x^k)^T z^k / n \rightarrow 0$ となるので, 近傍の定義より $\|Ax^k - b\| \rightarrow 0$ かつ $\|A^T y^k + z^k - c\| \rightarrow 0$ となる. したがって, その点列がある (x, y, z) に収束するならば, それは主双対問題の最適解となる. このことから, 近傍 $N_1(\beta, \eta)$ 上で双対ギャップ $(x^k)^T z^k$ が減少するように点列を生成することにより, 主双対問題 (3) を解くことができる.

初期点 (x^0, y^0, z^0) から近傍 $N_1(\beta, \eta)$ 上に点列を生成し, k 番目の点 (x^k, y^k, z^k) が得られているとし, 次の点の求め方を解説する. $\mu^k = (x^k)^T z^k / n$ とし, $\gamma \in (0, 1)$ に対して,

$$\mu = \gamma \mu^k$$

とする. このとき, 点 (x^k, y^k, z^k) において, 解析的中心の式 (4) にニュートン法を適用し, 探索方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ を式 (7) により計算する. ステップサイズを

$$\alpha = \max\{\hat{\alpha} | (x^k, y^k, z^k) + \alpha'(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \in N_1(\beta, \eta) \text{ for any } \alpha' \in [0, \hat{\alpha}]\} \quad (10)$$

とし, 次の点 $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1})$ を $\alpha_P = \alpha_D = \alpha$ として式 (8) により計算する. この近傍を使ったパス追跡法のアルゴリズムは次のようになる.

アルゴリズム 1.7 近傍 $N_1(\beta, \eta)$ を使う主双対パス追跡インフィージブル内点法は, 次のステップから成る.

ステップ 0 近傍 $N_1(\beta, \eta)$ 上の初期内点を (x^0, y^0, z^0) とする . $\gamma \in (0, 1)$ とし , $k = 0$ とする .

ステップ 1 内点 (x^k, y^k, z^k) において , パラメータ $\mu = \gamma(x^k)^T z^k / n$ とし , 方程式系 (6) の解 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ を式 (7) により計算する .

ステップ 2 ステップサイズ $\alpha > 0$ を式 (10) により定めて , $\alpha_P = \alpha_D = \alpha$ として次の点 $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1})$ を (8) により求める . k を 1 増加して , ステップ 1 へ行く .

1.4 Mehrotra のプレディクタ・コレクタ法

Mehrotra [3] によるプレディクタ・コレクタ法を解説する . この方法は , 実際の計算効率を上げる (少ない反復で良い解を得る) のに効果的であるといわれており , 多くのパッケージなどで実際に使われている . 後に解説する MTY プレディクタコレクタ法は , 1 反復の中でプレディクタステップとコレクタステップの 2 度の内点の更新を実質的に行う . それに対して , Mehrotra のプレディクタ・コレクタ法では , 一度の点の更新で , まずプレディクタ方向を計算し , その情報を使ってコレクタ方向を計算する .

初期内点から点列を生成し , k 番目の内点 (x^k, y^k, z^k) が得られているとして , 次の点 $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1})$ の求め方を解説する . 内点 (x^k, y^k, z^k) におけるアフィンスケーリング方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$, すなわち $\mu = 0$ としたときの , 方程式系 (6)

$$\begin{aligned} A\Delta x &= -(Ax^k - b) \\ A^T \Delta y + \Delta z &= -(A^T y^k + z^k - c) \\ Z_k \Delta x + X_k \Delta z &= -X_k z^k \end{aligned} \tag{11}$$

の解を式 (7) により計算する . 現在の点 (x^k, y^k, z^k) からアフィンスケーリング方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ に進み , そこに修正方向 $(\Delta x_c, \Delta y_c, \Delta z_c)$ を加えた点

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^k \\ y^k \\ z^k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta x_c \\ \Delta y_c \\ \Delta z_c \end{pmatrix}$$

を考える . この点が解析的中心の近似点となるように , 修正方向 $(\Delta x_c, \Delta y_c, \Delta z_c)$ を求めてみる . そのために , 上の式を解析的中心が満たす式 (4) に代入すると

$$\begin{aligned} A(x^k + \Delta x + \Delta x_c) &= b \\ A^T (y^k + \Delta y + \Delta y_c) + (z^k + \Delta z + \Delta z_c) &= c, \\ (X_k + \Delta X + \Delta X_c)(z^k + \Delta z + \Delta z_c) &= \mu e \end{aligned}$$

が得られる．これに，関係式 (11) を使うと

$$\begin{aligned} A\Delta x_c &= \mathbf{0} \\ A^T \Delta y_c + \Delta z_c &= \mathbf{0} \\ Z_k \Delta x_c + X_k \Delta z_c &= \mu e - \Delta X \Delta z - \Delta X \Delta z_c - \Delta X_c \Delta z - \Delta X_c \Delta z_c \end{aligned}$$

が得られる．ここで，3番目の式には，右辺にも変数 ΔX_c と Δz_c が入っているが，これらを含む項 $-\Delta X \Delta z_c - \Delta X_c \Delta z - \Delta X_c \Delta z_c$ がその他の項よりかなり小さいと仮定し，線形方程式系

$$\begin{aligned} A\Delta x_c &= \mathbf{0} \\ A^T \Delta y_c + \Delta z_c &= \mathbf{0} \\ Z_k \Delta x_c + X_k \Delta z_c &= \mu e - \Delta X \Delta z \end{aligned} \tag{12}$$

を解くことにより，修正方向 $(\Delta x_c, \Delta y_c, \Delta z_c)$ を求める．この方程式系の解は，順に

$$\begin{aligned} \Delta y_c &= -(AZ_k^{-1}X_kA^T)^{-1}AZ_k^{-1}(\mu e - \Delta X \Delta z) \\ \Delta z_c &= -A^T \Delta y_c \\ \Delta x_c &= -Z_k^{-1}X_k \Delta z_c + Z_k^{-1}(\mu e - \Delta X \Delta z) \end{aligned} \tag{13}$$

と計算できる．ここで， Δy_c を求めるための線形方程式系の行列 $AZ_k^{-1}X_kA^T$ は，方程式系 (6) あるいは (11) の解 Δy を求めるときの式 (7) にある行列と同一である．したがって，行列のコレスキー分解などを利用して線形方程式を解けば，再度コレスキー分解する必要がないので，ここでは簡単に計算できる (少ない計算量で方向を求められる)．

修正方向を計算するときのパラメータ μ の値であるが，Mehrotra は，アフィンスケーリング方向を使って，次のように決めると効率がよいと報告している．アフィンスケーリング方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ を求めたのちに，現在の内点 (x^k, y^k, z^k) からその方向に進んだときに，内点であるためのステップ幅の上限を

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_P &= \max\{\alpha | x^k + \alpha \Delta x \geq 0\} \\ \hat{\alpha}_D &= \max\{\alpha | z^k + \alpha \Delta z \geq 0\} \end{aligned} \tag{14}$$

とする．このステップサイズを使ったときの，双対ギャップの値

$$(x^k + \hat{\alpha}_P \Delta x)^T (z^k + \hat{\alpha}_D \Delta z)$$

を求める．この値と現在の点における双対ギャップ $(x^k)^T z^k$ の比が小さいほど， γ の値を小さくするとよいのではないかという発想から，Mehrotra は

$$\mu = \left(\frac{(x^k + \hat{\alpha}_P \Delta x)^T (z^k + \hat{\alpha}_D \Delta z)}{(x^k)^T z^k} \right)^3 \frac{(x^k)^T z^k}{n} \tag{15}$$

とすることを提案している．

アフィンスケーリング方向と修正方向を計算した後に，その和の方向に進むことのできるステップサイズの上限

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha}_P &= \max\{\alpha \mid \mathbf{x}^k + \alpha(\Delta\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}_c) \geq 0\} \\ \tilde{\alpha}_D &= \max\{\alpha \mid \mathbf{z}^k + \alpha(\Delta\mathbf{z} + \Delta\mathbf{z}_c) \geq 0\}\end{aligned}\tag{16}$$

を求め，ステップサイズを

$$\begin{aligned}\alpha_P &= \min\{0.99\tilde{\alpha}_P, 1\} \\ \alpha_D &= \min\{0.99\tilde{\alpha}_D, 1\}\end{aligned}\tag{17}$$

とし，次の点を

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k + \alpha_P(\Delta\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}_c) \\ \mathbf{y}^{k+1} &= \mathbf{y}^k + \alpha_D(\Delta\mathbf{y} + \Delta\mathbf{y}_c) \\ \mathbf{z}^{k+1} &= \mathbf{z}^k + \alpha_D(\Delta\mathbf{z} + \Delta\mathbf{z}_c)\end{aligned}\tag{18}$$

と計算する．以上のことをまとめると，次のようになる．

アルゴリズム 1.8 Mehrotra のプレディクタ・コレクタ法は，次のステップから成る．

ステップ 0 初期内点を $(\mathbf{x}^0, \mathbf{y}^0, \mathbf{z}^0)$ とし， $k = 0$ とする．

ステップ 1 点 $(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^k, \mathbf{z}^k)$ におけるアフィンスケーリング方向 $(\Delta\mathbf{x}, \Delta\mathbf{y}, \Delta\mathbf{z})$ を $\mu = 0$ として (7) により計算する．実行可能解であるための最大のステップサイズ $\hat{\alpha}_P$ と $\hat{\alpha}_D$ を式 (14) により求め，パラメータ μ の値を式 (15) により定める．

ステップ 2 修正方向 $(\Delta\mathbf{x}_c, \Delta\mathbf{y}_c, \Delta\mathbf{z}_c)$ を (13) により計算し， $\tilde{\alpha}_P$ と $\tilde{\alpha}_D$ を式 (16) により求め， α_P と α_D を式 (17) により求め， $(\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{y}^{k+1}, \mathbf{z}^{k+1})$ を (18) により求める． k を 1 増加して，ステップ 1 へ行く．

演習問題 1.9 Mehrotra のプレディクタ・コレクタ法の各反復で

$$\begin{aligned}\mathbf{A}\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{b} &= (1 - \alpha_P)(\mathbf{A}\mathbf{x}^k - \mathbf{b}) \\ \mathbf{A}^T\mathbf{y}^{k+1} + \mathbf{z}^{k+1} - \mathbf{c} &= (1 - \alpha_D)(\mathbf{A}^T\mathbf{y}^k + \mathbf{z}^k - \mathbf{c})\end{aligned}$$

と $\mathbf{x}^{k+1} > \mathbf{0}$ ， $\mathbf{z}^{k+1} > \mathbf{0}$ が成立することを示せ．

1.5 インフィージブル中心パス

前節までに解説したアルゴリズムは，(5) で定義された中心パス P_1 を追跡する．インフィージブル内点法では， P_1 と異なるパス P_2 を使う場合もある．パス P_1 は，実行可能領域の内点から成るので，主双対問題に実行可能内点が存在しない場合には，存在しない．また，初期点はこのパスから大きく離れていることもありうる．一方，パス P_2 は，

初期点の近くを通り，主双対問題に解が存在する場合にはパラメータが 0 に近づくとき最適解に近づき，解が存在しない場合には非有界となる．

線形計画問題 (1)， $x^0 > 0$ と $z^0 > 0$ を満たす初期内点 (x^0, y^0, z^0) ，パラメータ $\theta \in [0, 1]$ に対して，人工的な線形計画問題

$$\begin{aligned} \text{最小化} & \quad (c + \theta(A^T y^0 + z^0 - c))^T x \\ \text{制約条件} & \quad Ax = b + \theta(Ax^0 - b) \\ & \quad x \geq 0 \end{aligned}$$

とその双対問題

$$\begin{aligned} \text{最小化} & \quad (b + \theta(Ax^0 - b))^T y \\ \text{制約条件} & \quad A^T y + z = c + \theta(A^T y^0 + z^0 - c) \\ & \quad z \geq 0 \end{aligned}$$

および主双対問題

$$\begin{aligned} Ax &= b + \theta(Ax^0 - b) \\ A^T y + z &= c + \theta(A^T y^0 + z^0 - c) \\ Xz &= 0 \\ x \geq 0, z &\geq 0 \end{aligned} \tag{19}$$

を考える．この問題 (19) は， $\theta = 0$ のときに元の主双対問題 (3) と一致し， $\theta = 1$ のときに実行可能内点 (x^0, y^0, z^0) をもつ． θ を固定するとき，問題 (19) に実行可能な内点が存在すれば， $\mu > 0$ に対して，問題

$$\begin{aligned} Ax &= b + \theta(Ax^0 - b) \\ A^T y + z &= c + \theta(A^T y^0 + z^0 - c) \\ Xz &= \mu e \\ x \geq 0, z &\geq 0 \end{aligned} \tag{20}$$

の解が存在し，それは主双対問題 (19) の解析的中心である．初期点 (x^0, y^0, z^0) に対して， $\mu^0 = (x^0)^T z^0 / n$ とするとき，その初期点が $\theta = 1$ ， $\mu = \mu^0$ のときの解析的中心の近似解となっているとする． $\mu = \theta \mu^0$ として， θ を動かしたときの解析的中心の集合

$$\begin{aligned} P_2 = \{ (x, y, z) \mid Ax &= b + \theta(Ax^0 - b), A^T y + z = c + \theta(A^T y^0 + z^0 - c), \\ Xz &= \theta \mu_0 e, \theta > 0, x > 0, z > 0 \} \end{aligned}$$

を定義すれば，それはパスとなり， $\theta = 1$ のときに初期点と近く， $\theta \rightarrow 0$ のときに元の主双対問題の最適解（もし存在するならば）に近づく．したがって，初期点からこのパスを近似する点列を生成し， $\theta \rightarrow 0$ とすることにより，主双対問題を解くことができると考えられる．また，元の主双対問題が実行不能な場合には，主双対問題 (19) が実行可能とな

るような θ に正の下限 $\theta_l > 0$ が存在する．そして， $\theta \rightarrow \theta_l$ のとき， P_2 上の点が発散する．したがって，パス P_2 を追跡する点列を生成したときに， θ が 0 に近づく前に点列が発散するようであれば，主双対問題が実行不能であるといえる．

演習問題 1.10 元の主双対問題 (3) が実行可能ならば，任意の $\theta > 0$ に対して，問題 (19) が実行可能内点を持つことを示せ．

1.6 MTY プレディクタ・コレクタ法

ここでは，前節で定義したパス P_2 を追跡することにより，主双対問題を解くための Mizuno, Todd, and Ye [7] によるプレディクタ・コレクタ法を説明する．

初期内点 (x^0, y^0, z^0) と定数 $\beta \in (0, 1)$ が与えられたときに，パス P_2 の近傍

$$N_2(\beta) = \left\{ (x, y, z) \mid \begin{array}{l} \mathbf{Ax} = \mathbf{b} + \theta(\mathbf{Ax}^0 - \mathbf{b}), \mathbf{A}^T \mathbf{y} + \mathbf{z} = \mathbf{c} + \theta(\mathbf{A}^T \mathbf{y}^0 + \mathbf{z}^0 - \mathbf{c}), \\ \|\mathbf{Xz} - \theta\mu_0 \mathbf{e}\| \leq \beta\theta\mu_0, \theta > 0, \mathbf{x} > \mathbf{0}, \mathbf{z} > \mathbf{0} \end{array} \right\}$$

を定義する．この近傍 N_2 内の点列についても，パス P_2 上の点列と同じような性質が成り立つ．初期点 (x^0, y^0, z^0) は， $\|\mathbf{X}_0 z^0 - \mu_0 \mathbf{e}\| \leq \beta\mu_0$ を満たすならば，この近傍 $N_2(\beta)$ 上にある．

演習問題 1.11 初期点 (x^0, y^0, z^0) が $\|\mathbf{X}_0 z^0 - \mu_0 \mathbf{e}\| \leq \beta\mu_0$ を満たすならば，集合 $N_2(\beta)$ が初期点とインフィージブル中心パス P_2 を含むことを示せ．

演習問題 1.12 集合 $N_2(\beta)$ 上の点列 $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ が $(x^k)^T z^k \rightarrow 0$ となるならば， $\|\mathbf{Ax}^k - \mathbf{b}\| \rightarrow 0$ かつ $\|\mathbf{A}^T \mathbf{y}^k + \mathbf{z}^k - \mathbf{c}\| \rightarrow 0$ となることを示せ．

プレディクタ・コレクタ法は， θ の値を減少させるプレディクタステップとパス P_2 の近くに帰るコレクタステップを交互に行うアルゴリズムである．二つの定数 $\beta_1 = 0.25$ と $\beta_2 = 0.5$ を決める．プレディクタ・コレクタ法で生成される点列 $\{(x^k, y^k, z^k)\}$ は，小さな近傍 $N_2(\beta_1)$ に含まれる．しかし，プレディクタステップ後に計算される中間点は，少し大きな近傍 $N_2(\beta_2)$ 上の点である．

第 k 反復目の内点 $(x^k, y^k, z^k) \in N_2(\beta_1)$ とパラメータ $\theta_k \in (0, 1)$ が得られているとして，次の点 $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1})$ とパラメータ $\theta_{k+1} \in (0, 1)$ の求め方を解説する．ここで，点 (x^k, y^k, z^k) は $\theta = \theta_k$ のときの主双対問題 (19) の実行可能解とする．まずプレディクタステップにおいて，点 (x^k, y^k, z^k) で元の主双対問題 (3) にニュートン法を適用し，方向 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ を求める．この方向は，方程式系 (6) において $\mu = 0$ のときに

計算される方向である．ステップサイズ α をもちいて中間点を

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}' \\ \mathbf{y}' \\ \mathbf{z}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}^k \\ \mathbf{y}^k \\ \mathbf{z}^k \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x} \\ \Delta \mathbf{y} \\ \Delta \mathbf{z} \end{pmatrix} \quad (21)$$

とする．中心パスの近傍 $N_2(\beta_2)$ の外に出ない範囲で最も大きなステップサイズ

$$\hat{\alpha} = \max \left\{ \bar{\alpha} \mid \begin{array}{l} \|(\mathbf{X}^k + \alpha \Delta \mathbf{X})(\mathbf{z}^k + \alpha \Delta \mathbf{z}) - (1 - \alpha)\theta_k \mu_0 \mathbf{e}\| \\ \leq \beta_2(1 - \alpha)\theta_k \mu_0 \text{ for any } \alpha \in [0, \bar{\alpha}] \end{array} \right\} \quad (22)$$

を求める． $\theta' = (1 - \hat{\alpha})\theta_k$, $\alpha = \hat{\alpha}$ として , 式 (21) により , $(\mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}')$ を求める . この点 $(\mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}')$ は $\theta = \theta'$ のときの主双対問題 (19) の実行可能解となっている (演習問題) .

演習問題 1.13 点 $(\mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}')$ が $\theta = \theta'$ のときの主双対問題 (19) の実行可能解となっていることを示せ .

次にコレクターステップにおいて , 点 $(\mathbf{x}', \mathbf{y}', \mathbf{z}')$ で $\theta = \theta'$ のときの中心を定義する方程式系 (20) に対するニュートン方向 $(\Delta \mathbf{x}', \Delta \mathbf{y}', \Delta \mathbf{z}')$ を求める . この方向は , 方程式系

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \Delta \mathbf{x}' &= \mathbf{0} \\ \mathbf{A}^T \Delta \mathbf{y}' + \Delta \mathbf{z}' &= \mathbf{0} \\ \mathbf{Z}' \Delta \mathbf{x}' + \mathbf{X}' \Delta \mathbf{z}' &= -\hat{\mathbf{X}}' \hat{\mathbf{z}}' + \theta' \mu_0 \mathbf{e} \end{aligned} \quad (23)$$

の解であり , 順に

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{y}' &= (\mathbf{A}(\mathbf{Z}')^{-1} \mathbf{X}' \mathbf{A}^T)^{-1} (\mathbf{b} - \theta' \mu_0 \mathbf{A}(\mathbf{Z}')^{-1} \mathbf{e}) \\ \Delta \mathbf{z}' &= -\mathbf{A}^T \Delta \mathbf{y}' \\ \Delta \mathbf{x}' &= -(\mathbf{Z}')^{-1} \mathbf{X}' \Delta \mathbf{z}' + (\theta' \mu_0 (\mathbf{Z}')^{-1} \mathbf{e} - \mathbf{x}') \end{aligned} \quad (24)$$

と計算できる . ステップサイズを 1 に固定して , 次の点

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}^{k+1} \\ \mathbf{y}^{k+1} \\ \mathbf{z}^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}' \\ \mathbf{y}' \\ \mathbf{z}' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{x}' \\ \Delta \mathbf{y}' \\ \Delta \mathbf{z}' \end{pmatrix} \quad (25)$$

を求める . このとき , 点 $(\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{y}^{k+1}, \mathbf{z}^{k+1})$ は $\theta_{k+1} = \theta'$ のときの主双対問題 (19) の実行可能解となっている . さらに , Mizuno et al. [7] に示されている結果を使えば , $(\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{y}^{k+1}, \mathbf{z}^{k+1}) \in N_2(\beta_1)$ も成立する . 以上の議論から , プレディクタ・コレクタ法は次のように表すことができる .

アルゴリズム 1.14 MTY プレディクタ・コレクタ法は , 次のステップから成る .

ステップ 0 $\beta_1 = 0.25, \beta_2 = 0.5, k = 0$ とする . 初期実行可能内点 $(x^0, y^0, z^0) \in N_2(\beta_1)$ を選び , $\theta_0 = 1, \mu_0 = (x^0)^T z^0 / n$ とする .

ステップ 1 $\mu = 0$ に対して , 方程式系 (6) の解 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ を計算する . 近傍 $N_2(\beta_2)$ から出ないステップサイズの上限 $\hat{\alpha}$ を (22) により求め , 中間点 (x', y', z') を (21) により求める . $\theta' = (1 - \hat{\alpha})\theta_k$ とする .

ステップ 2 $(\Delta x', \Delta y', \Delta z')$ を (24) により計算し , $(x^{k+1}, y^{k+1}, z^{k+1})$ を (25) により求める . $\theta_{k+1} = \theta'$ とする . k を 1 増加して , ステップ 1 へ行く .

1.7 おわりに

本論では , 内点法として現在のところ実際に最もよく使われている主双対問題のインフィージブル内点法を解説した . インフィージブル内点法には , 大きく分けて 2 種類のアルゴリズムがある . それは , 実行可能内点よりなる中心パス P_1 を使うアルゴリズムと実行不能内点よりなる中心パス P_2 を使うアルゴリズムである . 前者が実際問題を解くソフトウェアパッケージを作るという過程で提案されたアルゴリズムであるのに対して , 後者は理論的に好ましい性質を持つアルゴリズムとして提案された .

インフィージブル内点法は , 英語で Infeasible-Interior-Point Methods と書く . 英語を直訳すると実行不能内点法となるが , それでは実行不能な方法のように聞こえる . 日本では , 非実行可能点列内点法と呼ばれることもあるが , ここではインフィージブル内点法と呼んだ .

参考文献

- [1] Kojima, M., Megiddo, N. and Mizuno, S.: “A Primal-Dual Infeasible-Interior Point Algorithm for Linear Programming”, *Mathematical Programming* **61** (1993) 261–280.
- [2] Lustig, I. J., Marsten, R. E., and Shanno, D. F.: “Computation Experience with a Primal-Dual Interior Point Method for Linear Programming”, *Linear Algebra and its Applications* **152** (1991) 191–222.
- [3] Mehrotra, S.: “On the Implementation of a Primal-Dual Interior Point Method”, *SIAM Journal on Optimization* **2** (1992) 575–601.
- [4] Mizuno, S.: “Polynomiality of Infeasible-Interior-Point Algorithms for Linear Programming”, *Mathematical Programming* **67** (1994) 109–119.

- [5] Mizuno, S., Jarre, F., and Stoer, J.: “A Unified Approach to Infeasible-Interior-Point Algorithms via Geometrical Linear Complementarity Problems”, *Applied Mathematics and Optimization* **33** (1996) 315–341.
- [6] Mizuno, S., Kojima, M., and Todd, M. J.: “Infeasible-Interior-Point Primal-Dual Potential-Reduction Algorithms for Linear Programming”, *SIAM Journal on Optimization* **5** (1995) 52–67 .
- [7] Mizuno, S., Todd, M. J., and Ye, Y.: “On Adaptive-Step Primal-Dual Interior-Point Algorithms for Linear Programming”, *Mathematics of Operations research* **18** (1993) 964–981.
- [8] Zhang, Y.: “On the Convergence of a Class of Infeasible Interior-Point Methods for the Horizontal Linear Complementarity Problem”, *SIAM Journal on Optimization* **4** (1994) 208-227.