TR-H-141

線形計画問題に対する射影変換法とアフィン変換法

相良　信子　　　山川　栄樹
(愛知大学経営学部)

1995. 4. 17

ATR人間情報通信研究所
〒619-02　京都府相楽郡精華町光台2-2　☎ 0774-95-1011

ATR Human Information Processing Research Laboratories
2-2, Hikaridai, Seika-cho, Soraku-gun, Kyoto 619-02 Japan
Telephone: +81-774-95-1011
Facsimile: +81-774-95-1008

線形計画問題に対する射影変換法とアフィン変換法

相良 信子
愛知大学 経営学部

山川 栄樹
株式会社 エイ・ティ・アール人間情報通信研究所

1995 年 4 月 17 日

1. はじめに

線形計画問題は、線形方程式／不等式系を満たすような変数の空間において、ある線形関数を最小化する問題であり、1947 年に Dantzig によって単体法 (simplex method) と呼ばれる効率的な解法が提案された。単体法についてはその後もさまざまな改良が加えられ、単体表 (simplex tableau) の代わりに基底行列 (basis matrix) の更新を行うことによって大規模で疎な構造をもつ現実の問題を効率的に取扱えるようにした改訂単体法 (revised simplex method) が応用上の主役となり、現在では数十万変数程度の問題を解けるような計算機プログラムも登場している。問題が非退化 (nondegenerate) であれば、単体法は必ず有限回の反復で停止する。また、たいていの問題においては、制約式の数の 2 倍から 3 倍程度の反復回数で解に到達する。ところが、最悪の場合の計算量を考えると、単体法の反復回数が問題の大きさの指数オーダーとなるような問題例が知られており、単体法は多項式時間アルゴリズムではない。

これに対して、1979 年に当時のソ連の L.G. Khachian は、N.Z. Shor, D.B. Yudin および A.S. Nemirovskii らによって開発された楕円体法 (ellipsoid method) が、最悪の場合でも多項式時間の計算量をもつことを示した。線形計画問題に対する実際の計算効率は単体法に及ばなかったため、楕円体法が実用化されることはなかったが、単体法よりも理論的に優れた方法の存在が知られることにより、線形計画問題に対する研究は新たな局面に入った。

そして、1984 年に N. Karmarkar によって新しい多項式時間アルゴリズムが提案される。単体法が線形計画問題の実行可能領域が形成する凸多面体の隣合う頂点を順次たどりながら最適解に対応する頂点に到達するのに対して、提案されたアルゴリズムは生成された点列が実行可能領域の内部を通るため、内点法と呼ばれる。カーマーカーの内点法では、理論的には反復回数が変数の数と入力データの大きさの積に比例することが示されており、実際の計算においても、問題の規模によらず反復回数はほぼ一定となることが観測されている。このため、特に大規模な問題においては単体法をしのぐ計算効率が得られることが明らかとなり、さまざまな改良が試みられている。その中で、既に 1967 年にソ連の I.I. Dikin によって考案されていたことが判明したアフィン変換法は、計算量の多項式性は証明されていないものの、実際の計算結果が非常に良好であることから、汎用の計算機プログラムにおいてもしばしば採用されている。

文献 [1] は、線形計画問題に対する最適化の方法の現状を学ぶ大学院生のために書かれた教科書であり、単体法，楕円体法，内点法が統一的な視点で取り扱われている。また、数式を用いた理論的な性質の検証だけでなく、幾何学的イメージによる理解やアルゴリズムの計算機上への実

装をも考慮に入れた記述がなされている。実際、初期点の見つけ方，現在の探索点が最適解か否かを見分ける方法，探索の進め方の三つを柱に、各アルゴリズムの振舞いを説明している。

文献 [1] は、次のような 10 の章で構成されている。まず、第 1 章においては、線形計画問題への定式化の例と、その歴史が紹介される。続いて第 2 章で、線形計画問題の幾何学的解釈と、実行可能領域が構成する凸多面体に関する基本的な定理が示される。単体法については、第 3 章で詳しく説明される。双対性定理と感度分析は、第 4 章で解説される。第 5 章は、単体法の計算量についての解析である。第 6 章からは、単体法以外の方法の説明である。まず、カーマーカーの射影変換法が第 6 章で紹介される。続いて、第 7 章においてアフィン変換法が述べられる。また、第 7 章では、実行可能領域の中心部を通って最適解に至るような曲線 (central trajectory) を考え、その曲線をたどることによって最適解に到達しようとする曲線追跡法 (path-following method) にも言及される。内点法の幾何学的解釈は、第 8 章において述べられる。第 9 章では、内点法を凸 2 次計画問題に拡張する。最後に、第 10 章において、内点法を計算機上へ実装する際のポイントが解説される。

我々は、 1993 年 12 月 7 日より毎週火曜日の午前中の 2 時間をかけて、その第 6 章と第 7 章を読むことにした。本稿では、その概要について簡単に紹介する。

2. カーマーカーの射影変換法

単体法とは異なり、カーマーカーの内点法は単体上で定義された線形計画問題に対するアルゴリズムで、各反復において探索点を多面体の中心に移すような変換を施すことによって、実行可能領域の内部に点列を生成する射影変換法である。ここでは、まずその基本的な考え方を述べ、カーマーカーの射影変換法アルゴリズムを記述して計算量が多項式時間であることを示す。

単体法は、実行可能領域が形成する凸多面体のある頂点から出発し、隣接する頂点のなかで目的関数値の改善が得られるような点を次々に選びながら、最適解に到達するか実行不可能であることを見出して終了する。従って、各反復における計算量を少なくできる代わりに、凸多面体のほとんどすべての頂点を経由する場合も考えられる。特に、大規模な問題では頂点の数が飛躍的に増加するため、膨大な計算時間を要する可能性もある。そこで、実行可能領域の内部を通過することによって、反復回数を削減することが考えられる。ただし、探索方向の選択の幅が広がるため、各反復における計算量は増えるかもしれない。また、最も望ましい探索方向を決定することは必ずしも容易ではないが、実行可能領域を単体と仮定すると、次のような事実を確かめることができる。

1. 現在の探索点が単体の中心近くにあれば、目的関数の最急降下方向へ移動することによって最適解に近づくことができる。

2. 現在の探索点が、ある多面体の中心にくるような変換を施しても、問題の意味が本質的に変化しないようにすることができる。

仮に、現在の探索点が単体の境界近くにあったとしても、第 2 番目の項目に示す変換によって多面体の中心に移すことができるならば、第 1 番目の項目に示すように、最急降下方向を選ぶことによって探索点の十分な改善を図ることができる。なお、直線を直線に移すような射影変換を用いれば、問題の本質は基本的に変化しないことも確かめられる。

この二つのアイデアを用いると、カーマーカーの射影変換法のアルゴリズムは次のように記述することができる。すなわち、ある実行可能内点が得られているとき、これを多面体の中心に移すような変換を施す。変換後の空間において、多面体の境界を超えない範囲で最急降下方向に探索を進める。生成された点をもとの空間に逆変換し、新たな実行可能内点とする。

カーマーカーの射影変換法のアルゴリズムは、次のような正準形の線形計画問題に対して提案されたものである。

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & c^\top x & \to \text{最小} \\ \text{制約条件：} & Ax = 0, & \\ & e^\top x = 1, \quad x \geq 0. & \end{array} \tag{2.1}$$

ただし、 A は階数 (rank) が m の $m \times n$ 行列, c と x は n 次元ベクトル, e はすべての要素が 1 の n 次元ベクトルである。さらに、以下の二つの仮定をおく。

(A1) $Ae = 0.$

(A2) 問題 (2.1) の最適解における目的関数値はゼロ。

仮定 (A1) より、点 $x = e/n = (1/n, \cdots, 1/n)^\top$ は実行可能内点であり、初期探索点として用いることができる。

問題 (2.1) の制約条件のうち、 $Ax = 0$ を除く条件がつくる部分空間

$$\Delta = \left\{ x \in R^n \;\middle|\; \sum_{i=1}^{n} x_i = 1,\ x_i \geq 0 \right\}$$

は、頂点数が n , 稜線数が $C(n,2)$, 面の数が $C(n, n-1)$ の単体で、その中心は e/n となる。単体 Δ の内点 $\overline{x}$ において、射影変換

$$T_{\overline{x}}(x) = \frac{\overline{X}^{-1} x}{e^\top \overline{X}^{-1} x}$$

を考えよう。ただし、 $\overline{X}$ は $\overline{x}$ の各要素を対角成分とする対角行列である。容易に確かめられるように、変換 $T_{\overline{x}}$ は Δ から Δ への 1 対 1 の上への写像であり、逆変換は

$$T_{\overline{x}}^{-1}(y) = \frac{\overline{X} y}{e^\top \overline{X} y}$$

により定義される。また、 Δ の境界上の点は Δ の境界上へ、 Δ の内部の点は Δ の内部に写る。特に、点 $\overline{x}$ は Δ の中心 e/n に射影される。

変換 $T_{\overline{x}}$ を用いると、問題 (2.1) は次のように書換えられる。

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & \dfrac{c^\top \overline{X} y}{e^\top \overline{X} y} & \to \text{最小} \\ \text{制約条件：} & A\overline{X} y = 0, & \\ & e^\top y = 1, \quad y \geq 0. & \end{array} \tag{2.2}$$

問題 (2.2) の目的関数はもはや線形ではないので、分子の線形関数の最急降下方向 $-\overline{X}c$ に進むことを考える。ただし、等式制約条件を逸脱しないようにするために、その係数行列

$$B = \left[\frac{A\overline{X}}{e^\top} \right]$$

の各行ベクトルと直交する空間への射影をとる。すなわち、y の空間での探索方向ベクトルは、

$$d = -\left[I - B^\top \left(B B^\top \right)^{-1} B \right] \overline{X} c$$

となる。単体 Δ の内接球の半径は、簡単な計算より

$$r = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} > \frac{1}{n}$$

であり、点 $\overline{x}$ に対応する y の点は e/n であったから、

$$y(\alpha) = \frac{e}{n} + \frac{\alpha}{n} \left(\frac{d}{\| d \|} \right), \qquad 0 < \alpha \leq 1,$$

とすれば、 $y(\alpha)$ は単体 Δ の内部にとどまる。

結局、問題 (2.1) に対するカーマーカーの勾配射影法のアルゴリズムは次のようになる。

アルゴリズム K：

ステップ 1（初期設定）： 十分大きな正の整数 L を定める。初期探索点を $x^0 := e/n$ とし、$k := 0$ とおく。

ステップ 2（最適性の判定）： もし

$$c^\top x^k \leq 2^{-L} \left(c^\top x^0 \right)$$

ならば、 x^k を最適解として停止する。さもなければ、ステップ 3 へ進む。

ステップ 3（探索点の更新）： 探索方向を

$$d^k := -\left[I - B_k^\top \left(B_k B_k^\top \right)^{-1} B_k \right] X_k c$$

と定める。ただし、

$$\begin{aligned} X_k &= \mathrm{diag}\left(x^k \right), \\ B_k &= \left[\frac{A X_k}{e^\top} \right] \end{aligned}$$

である。ステップサイズ $\alpha \in (0, 1]$ を定め、探索点を次式により更新する。

$$\begin{aligned} y^{k+1} &:= \frac{e}{n} + \frac{\alpha}{n} \left(\frac{d^k}{\| d^k \|} \right), \\ x^{k+1} &:= \frac{X_k y^{k+1}}{e^\top X_k y^{k+1}}. \end{aligned}$$

$k := k + 1$ としてステップ 2 へ戻る。 □

ステップ 2 に現れる定数 L の値は、問題を入力するために必要となるデータの大きさまたはその倍数で、条件

$$2^{-L} < \frac{\varepsilon}{c^\top x^0} = \frac{n \varepsilon}{c^\top e}$$

を満たすように選ぶ。ただし、 $\varepsilon > 0$ は、許容誤差である。

アルゴリズム K の計算量が多項式オーダーであることを示すために、 y の空間において関数

$$f'(y) = n \log_e \left(c^\top X_k\, y\right) - \sum_{i=1}^{n} \log_e y_i$$

を考える。このとき、アルゴリズム K のステップ 3 で生成される y^{k+1} は、仮定 (A2) より次の関係式を満たすことが示される [1, Lemma 6.1] 。

$$n \log_e \left(c^\top X_k\, y^{k+1}\right) \leq n \log_e \left(\frac{c^\top X_k\, e}{n}\right) - \alpha.$$

さらに、

$$-\sum_{i=1}^{n} \log_e y_i^{k+1} \leq -\sum_{i=1}^{n} \log_e \left(\frac{1}{n}\right) + \frac{\alpha^2}{2\,(1-\alpha)^2}$$

も成立つ [1, Lemma 6.2] 。従って、点 y^{k+1} において関数 $f'(y)$ は条件

$$f'(y^{k+1}) \leq f'(e/n) - \alpha + \frac{\alpha^2}{2\,(1-\alpha)^2}$$

を満たす。特に、ステップサイズを $\alpha = 1/3$ に選ぶと、次の関係を得る。

$$f'(y^{k+1}) \leq f'(e/n) - \frac{5}{24} \leq f'(e/n) - \frac{1}{5}.$$

ここで、射影変換 $T_{x^k}^{-1}$ を用いて、関数 $f'(y)$ を x の空間に写すことを考える。

$$y = T_{x^k}(x) = \frac{X_k^{-1} x}{e^\top X_k^{-1} x}$$

を代入すると、

$$f'(y) = n \log_e \left(c^\top x\right) - \sum_{i=1}^{n} \log_e x_i + \sum_{i=1}^{n} \log_e x_i^k$$

となる。そこで、

$$f(x) = n \log_e \left(c^\top x\right) - \sum_{i=1}^{n} \log_e x_i$$

とおこう。 $f(x)$ は Δ の内点において定義される関数で、問題 (2.1) に対するポテンシャル関数 (potential function) と呼ばれる。 このとき、 $x^{k+1} = T_{x^k}^{-1}(y^{k+1})$, $T_{x^k}(x^k) = e/n$ より、

$$f(x^{k+1}) \leq f(x^k) - \frac{1}{5}, \qquad k = 0, 1, 2, \cdots,$$

が成立つ。これらの不等式を辺々たしあわせると、

$$f(x^k) \leq f(x^0) - \frac{k}{5}, \qquad k = 1, 2, \cdots,$$

あるいは、 $f(x)$ の定義より、

$$n \log_e \left(c^\top x^k\right) - \sum_{i=1}^{n} \log_e x_i^k \leq n \log_e \left(c^\top x^0\right) - \sum_{i=1}^{n} \log_e x_i^0 - \frac{k}{5}$$

となる。総加総乗平均の関係より、 $x \in \Delta$ に対して

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{n} \log_e x_i &= \log_e \left(\prod_{i=1}^{n} x_i \right) \\ &\leq \log_e \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \right)^n \\ &= n \log_e \left(\frac{1}{n} \right) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \log_e x_i^0\end{aligned}$$

が成立つことに注意すると、

$$n \log_e \left(c^\top x^k \right) \leq n \log_e \left(c^\top x^0 \right) - \frac{k}{5}$$

を得る。よって、 $k > 5nL$ ならば

$$\log_e \left(c^\top x^k \right) < \log_e \left(c^\top x^0 \right) - L$$

であり、 $\log_e 2 < 1$ よりアルゴリズム K の最適性の判定条件が成立つ。

結局、ステップサイズ α を 1/3 とするとき、仮定 (A1), (A2) のもとで、アルゴリズム K は $O(nL)$ 回の反復で停止することがわかる。応用上は、より大きなステップサイズを選ぶことによって収束性がさらに加速されることも多く、問題の規模に関係なく 20 ~ 50 回の反復で停止する場合がほとんどであることが確かめられている。

ところで、カーマーカーの射影変換法は、 (2.1) という非常に特殊な形の問題に対して定義されたアルゴリズムである。そこで、通常よく用いられる標準形の線形計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{目的関数：} & c^\top x \qquad \to \text{ 最小} \\ \text{制約条件：} & Ax = b, \\ & x \geq 0 \end{array} \tag{2.3}$$

をカーマーカーの正準形 (2.1) に変換する方法を考える。問題 (2.3) の実行可能領域を有界とするために、十分大きな正の数 Q と、スラック変数 $x_{n+1} \geq 0$ を用いて、人為的な制約条件

$$e^\top x + x_{n+1} = Q$$

を追加する。また、等式制約の右辺を 0 とするために、最適解において値が 1 となるような人為変数 $x_{n+2} \geq 0$ を用いて、等式制約を

$$\begin{aligned} Ax - b x_{n+2} &= 0, \\ e^\top x + x_{n+1} - Q x_{n+2} &= 0 \end{aligned}$$

と書換える。さらに、人為変数 x_{n+2} の値を 1 に固定するために、人為的な制約条件

$$e^\top x + x_{n+1} + x_{n+2} = Q + 1$$

を追加する。この制約条件の右辺を 1 とするためには、変数変換

$$x_i = (Q+1)\, y_i, \qquad i = 1, \cdots, n, n+1, n+2,$$

を施せばよい。仮定 (A1) を満たすためにもう一つの人為変数 y_{n+3} を加えると、問題 (2.3) は次のような問題に変換される。

$$\begin{array}{ll} \text{目的関数：} & (Q+1)\left(c^\top y\right) + M\,y_{n+3} \qquad\qquad \rightarrow \ \text{最小} \\ \text{制約条件：} & A\,y - b\,y_{n+2} - [\,A\,e - b\,]\;y_{n+3} = 0, \\ & e^\top y + y_{n+1} - Q\,y_{n+2} - (n+1-Q)\;y_{n+3} = 0, \\ & e^\top y + y_{n+1} + y_{n+2} + y_{n+3} = 1, \\ & y \geq 0, \quad y_{n+1} \geq 0, \quad y_{n+2} \geq 0, \quad y_{n+3} \geq 0. \end{array}$$

ただし、 M は十分大きな正の数である。

ところで、正準形の線形計画問題は仮定 (A2) を満たさなければならない。問題 (2.1) の最適解における目的関数の値 z^* が既知であるならば、 $e^\top x = 1$ に注意して、目的関数を $(c - z^* e)^\top x$ と修正すればよい。一方、 z^* が未知の場合には、ステップ 3 における探索方向が定められないため、非常に困難な事態となる。 Karmarkar は、目的関数の最適値 z^* が含まれていると考えられる区間を徐々に縮めていく方法を提案している。すなわち、 z^* が含まれていることが保証されている区間 $[l, u]$ に対して、

$$l < l' < u' < u$$

なる l', u' を選ぶ。そして、 l' を目的関数の最適値と仮定して目的関数を $(c - l'e)^\top x$ と修正し、アルゴリズム K を実行する。ある反復において

$$c^\top x^{k+1} < l'$$

となることが予想されたならば、

$$c^\top x^{k+1} = l'$$

を満たすようにステップサイズ α を縮めた上で、区間を $[l, u']$ に縮める。一方、このような現象が起こらずに修正した問題の反復が終了したならば、区間を $[l', u]$ に縮小すればよい。

また、双対問題から得られる情報を用いて、目的関数の最適値が未知な問題を取扱うことも可能である。問題 (2.1) の双対問題は、次のように書ける。

$$\begin{array}{ll} \text{目的関数：} & z \qquad\qquad \rightarrow \ \text{最大} \\ \text{制約条件：} & A^\top w + z\,e \leq c. \end{array} \tag{2.4}$$

1 次の最適性条件より、主問題 (2.1) の最適解 x^* と、対応する双対問題 (2.4) の最適解 (w^*, z^*) に対して、

$$\begin{array}{l} A\,x^* = 0, \qquad\qquad e^\top x^* = 1, \\ \left(A^\top w^* + z^*\,e - c\right)^\top x^* = 0, \\ A^\top w^* + z^*\,e \leq c, \quad x^* \geq 0 \end{array}$$

が成立つ。 3 つの等式より、

$$c^\top x^* = z^*$$

となるから、仮定 (A2) が成立っているならば、相補条件の等式より

$$X^* A^\top w^* = X^* c$$

である。従って、ある x において、双対変数 w の推定値を

$$w = \left(A X^2 A^\top\right)^{-1} A X^2 c$$

とおき、双対変数 z の推定値として

$$z = \min_{i=1,\cdots,n} \left(c - A^\top w\right)_i$$

を選べば、 (w, z) は z の値が最も大きい問題 (2.4) の実行可能解となる。このようにして選んだ z を目的関数の最適値の下界として、カーマーカーの射影変換法の反復を進めることを考える。

ある反復 k において、 x^k, w^k, z^k が与えられているものとする。 z^k を最適値の推定値とすると、目的関数を $c - z^k e$ と修正して反復を進めればよい。そこで、

$$\begin{aligned} w &= \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} A X_k^2 \left(c - z^k e\right), \\ z &= \min_{i=1,\cdots,n} \left(c - A^\top w\right)_i \end{aligned}$$

としよう。もし $z \le z^k$ ならば、 z は z^k ほどよい推定値とはなり得ない。そこで、 $w^{k+1} := w^k$, $z^{k+1} := z^k$ とする。一方、 $z > z^k$ ならば、

$$\begin{aligned} & w^{k+1} = \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} A X_k^2 \left(c - z^{k+1} e\right), \\ & \min_{i=1,\cdots,n} \left(c - z^{k+1} e - A^\top w^{k+1}\right)_i = 0 \end{aligned}$$

となるような (w^{k+1}, z^{k+1}) を求める。具体的には、

$$\begin{aligned} u^k &= X_k c - X_k A^\top \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} A X_k^2 c, \\ v^k &= x^k - X_k A^\top \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} A X_k^2 e \end{aligned}$$

なる u^k, v^k に対して、

$$\min_{i=1,\cdots,n} \left(u^k - z^{k+1} v^k\right)_i = 0$$

を満たす z^{k+1} を求めればよい。最後に、目的関数を $c - z^{k+1} e$ と修正して x^{k+1} を計算する。

さて、カーマーカーの正準形の線形計画問題 (2.1) は、双対問題 (2.4) に関係するある制約なし凸計画問題を用いて、その最適解を近似的に計算することができるという興味ある性質をもっている。一般に、任意の実数 y_i, $i = 1, \cdots, n$, と、条件

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = 1$$

を満たすような正の数 x_i, $i = 1, \cdots, n$, に対して、不等式

$$\sum_{i=1}^{n} \exp\left(y_i\right) \ge \prod_{i=1}^{n} \left\{\frac{\exp\left(y_i\right)}{x_i}\right\}^{x_i} \tag{2.5}$$

が成立つ。ただし、等号が成立するのは、ある正の数 λ に対して

$$x_i = \lambda \exp\left(y_i\right), \qquad i = 1, \cdots, n,$$

となる場合に限られる。そこで、ある正の数 μ と任意の $w \in R^m$ に対して

$$y_i = \left(A^\top w - c\right) / \mu, \qquad i = 1, \cdots, n,$$

とおき、条件

$$A x = 0, \qquad e^\top x = 1, \qquad x \geq 0$$

を満たすような $x = (x_1, \cdots, x_n)^\top$ を考える。このとき、不等式 (2.5) は

$$-\mu \log_e \left[\sum_{i=1}^{n} \exp\left\{\left(A^\top w - c\right)_i / \mu\right\}\right] \leq c^\top x + \mu \sum_{i=1}^{n} x_i \log_e x_i \tag{2.6}$$

と書換えられる。不等式 (2.6) は、摂動問題

$$\begin{array}{ll} \text{目的関数：} & c^\top x + \mu \displaystyle\sum_{i=1}^{n} x_i \log_e x_i \quad \to \ \text{最小} \\ \text{制約条件：} & A x = 0, \\ & e^\top x = 1, \quad x \geq 0 \end{array}$$

と w の狭義凹関数

$$h(w;\mu) = -\mu \log_e \left[\sum_{i=1}^{n} \exp\left\{\left(A^\top w - c\right)_i / \mu\right\}\right]$$

の制約なし最大化問題の間に弱双対定理が成立つことを示している。また、

$$x_i = \lambda \exp\left\{\left(A^\top w - c\right)_i / \mu\right\}, \qquad i = 1, \cdots, n,$$

のときに等号が成立つことから、これらの問題の間に双対性のギャップは存在しないことがわかる。(2.6) より $h(w;\mu)$ は上に有界であるから、唯一の制約なし最大点 $\tilde{w}$ が存在する。そこで、

$$\tilde{\lambda} = \left[\sum_{i=1}^{n} \exp\left\{\left(A^\top \tilde{w} - c\right)_i / \mu\right\}\right]^{-1} \tag{2.7}$$

に対して

$$\tilde{x}_i = \tilde{\lambda} \exp\left\{\left(A^\top \tilde{w} - c\right)_i / \mu\right\}, \qquad i = 1, \cdots, n, \tag{2.8}$$

とおくと、不等式 (2.6) は等号で成立し、

$$h(\tilde{w};\mu) = -\mu \log_e \left[\sum_{i=1}^{n} \exp\left\{\left(A^\top \tilde{w} - c\right)_i / \mu\right\}\right] = c^\top \tilde{x} + \mu \sum_{i=1}^{n} \tilde{x}_i \log_e \tilde{x}_i$$

が成立つ。$e^\top x = 1$ なる $x \geq 0$ に対して

$$-\frac{1}{e} \leq x_i \log_e x_i \leq 0, \qquad i = 1, \cdots, n,$$

であることに注意すると、$\mu \to 0$ のとき $h(\tilde{w};\mu) \to c^\top \tilde{x}$ となることがわかる。よって、十分小さな正の数 μ に対して狭義凸関数 $-h(w;\mu)$ を制約なし最小化することによって、問題 (2.1) の近似最適解 $\tilde{x}$ を見つけることができる。制約なし最適化の手法としては、各種の降下法のアルゴリズムや共役勾配法，準ニュートン法などが利用できる。

なお、

$$\tilde{z} = \min_{i=1,\cdots,n} \left(c - A^\top \tilde{w}\right)_i$$

とおけば、 $(\tilde{w}, \tilde{z})$ は双対問題 (2.4) の実行可能解であり、不等式

$$0 \le c^\top \tilde{x} - \tilde{z} \le \log_e n$$

を満たすことが示される。よって、 $\varepsilon > 0$ に対して

$$\mu = \frac{\varepsilon}{\log_e n}$$

と選べば、 $\tilde{x}$ は問題 (2.1) の ε - 最適解となる。

簡単な例題を示しておこう。カーマーカーの正準形の線形計画問題

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & \qquad\quad - x_3 & \to \text{最小} \\ \text{制約条件：} & x_1 - x_2 \qquad = 0, & \\ & x_1 + x_2 + x_3 = 1, & \\ & x_1, \quad x_2, \quad x_3 \ge 0 & \end{array}$$

の最適解は $(x_1^*, x_2^*, x_3^*) = (0, 0, 1)$ である。ある正の数 μ に対して、対応する制約なし凸計画問題は次のようになる。

$$\text{目的関数：} \quad \mu \log_e \{ \exp(w / \mu) + \exp(-w / \mu) + \exp(1 / \mu) \} \quad \to \ \text{最小} .$$

1 次の最適性条件よりその最適解は $\tilde{w} = 0$ であり、 (2.7), (2.8) を用いると

$$\tilde{x}_1 = \tilde{x}_1 = \frac{1}{1 + 1 + \exp(1 / \mu)}, \qquad \tilde{x}_3 = \frac{\exp(1 / \mu)}{1 + 1 + \exp(1 / \mu)}$$

であることがわかる。確かに、 $\mu \to 0$ のとき $\tilde{x}_1$ と $\tilde{x}_2$ は 0 に収束し、 $\tilde{x}_3$ は 1 に収束する。

3.　アフィン変換法

カーマーカーの射影変換法が 1984 年に提案されて以来、さまざまな内点法のアルゴリズムが研究された。その中で、特に研究者の注目の的となったのが、アフィン変換法 (affine scaling algorithm) である。標準形の (主) 線形計画問題に対するアルゴリズムは、 1986 年に E. Barnes および R. Vanderbei らによって独立に提案され、大域的収束性が示されている。しかし、その後になって、実質的に同じ方法が 1967 年にソ連の数学者 I.I. Dikin によって発表されていたことが明らかになった。一方、 I. Adler らは 1987 年に不等式制約のみをもつ線形計画問題に対するアフィン変換法と、大規模問題に対して適用する場合に有効なデータ構造を提案している。この方法は、標準形の線形計画問題の双対問題に対する方法と見なせるので、双対アフィン変換法と呼ばれている。主アフィン変換法および双対アフィン変換法は、そのままの形では多項式性を示すことはできないが、対数型の障壁関数 (logarithmic barrier function) と組合せることによって多項式時間アルゴリズムとすることができる。主双対内点法はこのような考え方を取り入れたアルゴリズムで、 1987 年に R. Monteiro らおよび M. Kojima らによって提案され、その多項式性が示された。ここでは、これら 3 つのタイプのアルゴリズムについて、初期点の選択，探索方向の生成，最適性の判定方法を中心に述べる。

3.1. 主アフィン変換法

次のような標準形の線形計画問題を考える。

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & c^\top x & \rightarrow \text{最小} \\ \text{制約条件：} & Ax = b, & \\ & x \geq 0. & \end{array} \tag{3.1}$$

ただし、A は階数が m の $m \times n$ 行列, b は m 次元ベクトル, c と x は n 次元ベクトルである。また、問題 (3.1) の実行可能領域の相対的内部 (relative interior)

$$P^0 = \{\, x \in R^n \mid Ax = b, \quad x > 0 \}$$

は空でないと仮定し、$x \in P^0$ のとき、点 x を実行可能内点と呼ぶことにする。アフィン変換法も、カーマーカーの射影変換法の最初のところで述べた二つの考え方に基づくアルゴリズムである。ただし、標準形の線形計画問題の実行可能領域は有界ではないため、「多面体の中心」を定義することはできない。そこで、非負領域 $R^n_+ = \{x \in R^n \,|\, x \geq 0\}$ を構成する各面から等しい距離だけ離れた点 $e = (1, \cdots, 1)^\top$ をその中心とみなし、現在の反復における実行可能内点を点 e に写すようなアフィン変換を施したうえで、最急降下法を適用するようなアルゴリズムを考える。主アフィン変換法は、標準形で記述された主問題に対してこのような考え方を適用することによって得られるアルゴリズムである。

ある反復 k において実行可能内点 x^k が与えられているとき、点 x^k を e に写す変換は、

$$T_{x^k}(x) = X_k^{-1} x$$

で定義される。ただし、X_k は x^k の各要素を対角成分とする対角行列である。容易に確かめられるように、変換 T_{x^k} は R^n_+ から R^n_+ への 1 対 1 の上への写像であり、逆変換は

$$T_{x^k}^{-1}(y) = X_k y$$

となる。また、R^n_+ の境界上の点は R^n_+ の境界上へ、R^n_+ の内部の点は R^n_+ の内部に写る。

変換 T_{x^k} を用いると、問題 (3.1) は次のように書換えられる。

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & c^\top X_k y & \rightarrow \text{最小} \\ \text{制約条件：} & A X_k y = b & \\ & y \geq 0. & \end{array}$$

探索方向ベクトルとしては、目的関数の最急降下方向 $-X_k c$ を、等式制約条件の係数行列 $A X_k$ の各行ベクトルと直交する空間へ射影したものを採用する。y の空間での探索方向ベクトルは、

$$d^k = -\left[I - X_k A^\top \left(A X_k^2 A^\top \right)^{-1} A X_k \right] X_k c$$

となる。点 x^k に対応する y の点は e であったから、ステップサイズ α_k を定めて

$$y^{k+1} = e + \alpha_k d^k$$

とする。このとき、$\alpha \in (0, 1)$ に対して

$$\alpha_k = \min \left\{ \frac{\alpha}{-d_i^k} \,\middle|\, d_i^k < 0, \quad i = 1, \cdots, n \right\}$$

とすれば、 y^{k+1} は非負領域 R_+^n の内部にとどまる。y^{k+1} を逆変換 $T_{x^k}^{-1}$ を用いてもとの空間に戻したときの像 x^{k+1} は、次式で与えられる。

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k X_k d^k.$$

ところで、問題 (3.1) の双対問題はつぎのように書ける。

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数}: & b^\top w & \to \text{最大} \\ \text{制約条件}: & A^\top w \leq c. & \end{array} \tag{3.2}$$

1 次の最適性条件より、主問題 (3.1) の最適解 x^* と、対応する双対問題の最適解 w^* に対して、

$$\begin{array}{l} A x^* = b, \\ \left(A^\top w^* - b\right)^\top x^* = 0, \\ A^\top w^* \leq c, \quad x^* \geq 0, \end{array}$$

が成立つ。相補条件の等式より

$$X^* A^\top w^* = X^* c$$

であるから、 x^k に対応する双対変数 w の推定値を

$$w^k = \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} A X_k^2 c$$

とおき、双対問題 (3.2) の制約条件の残差ベクトルを次式で定義する。

$$r^k = c - A^\top w^k.$$

r^k は、単体法において簡約コスト (reduced cost) と呼ばれているものである。このとき、

$$d^k = -X_k r^k$$

と書直すことができる。また、 $A x^k = b$ より、双対性のギャップは

$$c^\top x^k - b^\top w^k = e^\top X_k r^k$$

と計算される。従って、もし $d^k = 0$ ならば $r^k = 0$ であり、実行可能内点 x^k が解となる。すなわち、問題 (3.1) のすべての実行可能解は最適であることがわかる [1, Lemma 7.2] 。一方、

$$\begin{aligned} c^\top x^{k+1} &= c^\top x^k + \alpha_k c^\top X_k d^k \\ &= c^\top x^k - \alpha_k c^\top X_k \left[I - X_k A^\top \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} A X_k\right] X_k c \\ &= c^\top x^k - \alpha_k c^\top X_k \left[I - X_k A^\top \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} A X_k\right] \\ &\qquad \left[I - X_k A^\top \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} A X_k\right] X_k c \\ &= c^\top x^k - \alpha_k \| d^k \|^2 \end{aligned}$$

より、 $d^k \neq 0$ ならば、反復ごとに目的関数値は必ず減少することがわかる。ただし、 $d^k \geq 0$ の場合には、任意の $\alpha_k > 0$ に対して y^{k+1} が R_+^n の内点となるため、問題 (3.1) は有界ではないと判定される [1, Lemma 7.1] 。

以上をまとめると、問題 (3.1) に対する主アフィン変換法のアルゴリズムは次のようになる。

アルゴリズム P：

ステップ 1（初期設定）： 許容誤差 $\varepsilon > 0$ とパラメータ $\alpha \in (0,1)$ を定める。初期実行可能内点 x^0 を選び、$k := 0$ とおく。

ステップ 2（双対推定値の計算）： 次式により、x^k に対応する双対変数の推定値 w^k を計算する。

$$w^k := \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} A X_k^2 c.$$

ステップ 3（簡約コストの計算）： 次式により、簡約コスト r^k を計算する。

$$r^k := c - A^\top w^k.$$

ステップ 4（最適性の判定）： もし $r^k \geq 0$ かつ $e^\top X_k r^k \leq \varepsilon$ ならば、x^k を最適解として停止する。さもなければ、ステップ 5 へ進む。

ステップ 5（探索方向の計算）： 次式により、y の空間における探索方向ベクトル d^k を計算する。

$$d^k := -X_k r^k.$$

ステップ 6（非有界および目的関数が定数であることの判定）： もし、$d^k = 0$ ならば、目的関数が定数であるため停止する。一方、$d^k \geq 0$ の場合も、もとの問題は有界ではないため停止する。さもなければ、ステップ 7 へ進む。

ステップ 7（ステップサイズの計算）： 次式により、ステップサイズ α^k を計算する。

$$\alpha_k := \min\left\{ \frac{\alpha}{-d_i^k} \,\middle|\, d_i^k < 0, \quad i = 1, \cdots, n \right\}.$$

ステップ 8（探索点の更新）： 次の探索点 x^{k+1} を

$$x^{k+1} := x^k + \alpha_k X_k d^k$$

により定める。$k := k+1$ としてステップ 2 へ戻る。 □

ところで、実行可能領域が構成する多面体の各頂点において、等号で成立っている制約条件の数が問題の次元数と同じ場合、その問題は非退化であると言われる。主問題 (3.1) とその双対問題 (3.2) の双方が非退化であり、問題 (3.1) の目的関数がその実行可能領域において下に有界であるならば、アルゴリズム P で生成された点列 $\{x^k\}$ は収束し [1, Theorem 7.2]、その極限 $x^* = \lim_{k\to\infty} x^k$ は問題 (3.1) の最適解となる [1, Theorem 7.1]。残念ながら、一般にはほとんどの問題で退化が起こっており、この定理の仮定が成立つ場合は少ない。ところが最近、非退化の仮定が満たされない場合でも、ステップサイズのパラメータ α を 2/3 以下の任意の整数に固定した場合には、アルゴリズムは大域的収束性をもつことが証明されている。

主アフィン変換法のアルゴリズム P を実際に計算機上で実行するためには、条件 $Ax^0 = b$ を満たすような初期探索点 $x^0 > 0$ が必要である。初期実行可能内点を見つける方法としては、*big-M* 法と 2 段階法の二通りの考え方がある。

人為変数 x_a を導入し、十分大きな正の数 M を用いて定義される問題

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & c^\top x + M x_a & \to \text{最小} \\ \text{制約条件：} & Ax + (b - Ae)\,x_a = b, & \\ & x \geq 0, \quad x_a \geq 0 & \end{array} \tag{3.3}$$

を解くのが *big-M* 法である。問題 (3.3) は自明な実行可能内点 $(x, x_a) = (e, 1)$ をもつので、アルゴリズム P を容易に適用できる。問題 (3.3) の最適解を (x^*, x_a^*) としよう。このとき、 $x_a^* > 0$ ならば、もとの問題 (3.1) は実行不可能である。また、 $x_a^* = 0$ で問題 (3.3) の解が有限ならば、x^* はもとの問題 (3.1) の解である。

一方、 2 段階法においては、任意の $x^0 > 0$ に対して人為変数 u を含む問題

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & u & \to \text{最小} \\ \text{制約条件：} & Ax + (\,b - Ax^0\,)\,u = b, & \\ & x \geq 0, \quad u \geq 0 & \end{array} \tag{3.4}$$

の解 (x^*, u^*) を求める。点 $(x^0, 1)$ は問題 (3.4) の実行可能内点であるから、実際に主アフィン変換法を適用してこれを解くことができる。もし $u^* > 0$ ならば、もとの問題 (3.1) は実行不可能である。さもなければ、 x^* を問題 (3.1) の初期実行可能内点として利用することができる。なお、問題 (3.4) はもとの問題よりも次元が一つ大きくなるが、探索点の更新を

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + \alpha_k\, d_x^k, \\ u^{k+1} &= u^k + \alpha_k\, d_u^k \end{aligned}$$

と書くことにすると、簡単な計算から

$$\begin{aligned} d_x^k &= \frac{1}{(u^k)^{-2} + \gamma} X_k^2 A^\top \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} \left(b - Ax^0\right), \\ u_x^k &= -\frac{1}{(u^k)^{-2} + \gamma} \end{aligned}$$

となる。ただし、

$$\gamma = \left(b - Ax^0\right)^\top \left(A X_k^2 A^\top\right)^{-1} \left(b - Ax^0\right)$$

である。従って、行列 $A X_k^2 A^\top$ の構造は問題 (3.4) と (3.1) との間で共通であり、コレスキー分解などを用いる際には同じ枠組を利用することができる。

主アフィン変換法は、カーマーカーの射影変換法と比べて定式化が自然であるだけでなく、目的関数の最適値が 0 という仮定も存在しないので、計算機上へも容易に実装できる。また、実用上の性能も非常に良好であることが知られているが、理論的な計算量における多項式時間の証明は与えられていない。

収束を加速するためには、実行可能領域の境界に近づいた探索点を、目的関数の値を変化させることなくその中心部に引戻すことが考えられる。そこで、各 $x > 0$ に対して、非負領域 R_+^n の境界に近づくにつれて値が急激に大きくなるようなポテンシャル関数

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

を導入し、ある探索点 x^k において次のような問題を解くことを考える。

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & p(x) & \rightarrow \text{ 最小} \\ \text{制約条件：} & Ax = b, & x > 0, \\ & c^\top x = c^\top x^k. & \end{array} \qquad (3.5)$$

なお、問題 (3.5) を厳密に解く必要はない。実際、 $p(x) < p(x^k)$ であるような実行可能解を見つけることができれば、探索点を R^n_+ の中心部に引戻すという目的は十分に達成される。そこで、 x^k における $p(x)$ の最急降下方向と $-c$ を係数行列 A の各行に直交するような空間に射影したベクトルをそれぞれ p^k, g として、 p^k を g とこれに直交するベクトル h に分解したとき、 p^k の h 方向成分を探索方向ベクトルとして選ぶ。式で書くと、

$$\begin{aligned} p^k &= \left\{ I - A^\top \left(A A^\top \right)^{-1} A \right\} X_k^{-1} e, \\ g &= -\left\{ I - A^\top \left(A A^\top \right)^{-1} A \right\} c \end{aligned}$$

より、問題 (3.5) を近似的に解くための探索方向として

$$\hat{d}_x^k = p^k - \left\{ \frac{\left(p^k\right)^\top g}{g^\top g} \right\} g$$

を用いればよい。

探索点を R^n_+ の境界面から離しておくためのもう一つの方法として、もとの問題の目的関数に障壁関数を組込むことが考えられる。対数型の障壁関数を用いる方法では、ある正の数 μ に対して、非線形計画問題

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & F_\mu(x) = c^\top x - \mu \sum_{i=1}^{n} \log_e x_i & \rightarrow \text{ 最小} \\ \text{制約条件：} & Ax = b, \qquad x > 0 & \end{array} \qquad (3.6)$$

を解いて、探索点を自動的に R^n_+ の境界面から遠ざける。問題 (3.6) の解 $x^*(\mu)$ に対して、 $\mu \rightarrow 0$ のときに $x^*(\mu) \rightarrow x^*$ ならば、 x^* はもとの問題 (3.1) の最適解となる。 $x > 0$ の条件が保たれるように探索を行うことにすれば、問題 (3.6) を解くためのニュートン法の探索ベクトル d_μ は、次の 2 次計画問題を解くことによって得られる。

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数} & \frac{1}{2} d^\top \nabla^2 F_\mu(x)\, d + \nabla F_\mu(x)^\top d & \rightarrow \text{ 最小} \\ \text{制約条件} & A\, d = 0. & \end{array}$$

ただし、 $\nabla F_\mu(x) = c - \mu X^{-1} e,\ \nabla^2 F_\mu(x) = \mu X^{-2}$ である。これを解くと

$$d_\mu = -\frac{1}{\mu} X \left\{ I - X A^\top \left(A X^2 A^\top \right)^{-1} A X \right\} (X c - \mu e)$$

となるが、 $x = x^k$ における主アフィン変換法の探索方向ベクトルを d_x^k とすると、

$$d_\mu = \frac{1}{\mu} d_x^k + X_k \left\{ I - X_k A^\top \left(A X_k^2 A^\top \right)^{-1} A X_k \right\} e$$

と書ける。右辺第 2 項は、 d_x^k を多面体の境界から引離す力と見なすことができるため、この手法を中心化を伴う主アフィン変換法 (primal affine scaling algorithm with centering force) と呼ぶ。 C. Gonzaga は、ある正の数 α と $\mu_0 > 0,\ 0 < \rho < 1$ が存在して、各反復で上式に従って d_{μ_k} を選び、 $x^{k+1} = x^k + \alpha\, d_{\mu_k},\ \mu_{k+1} = \rho\, \mu_k$ と更新することによって、もとの問題 (3.1) の解 x^* に $O(\sqrt{n}L)$ 回の反復で収束するような点列 $\{x^k\}$ が生成されることを指摘している。

3.2. 双対アフィン変換法

問題 (3.1) の双対問題 (3.2) をスラック変数 $s \in R^n$ を用いて書直すと、

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & b^\top w & \to \text{ 最大} \\ \text{制約条件：} & A^\top w + s = c, \quad s \geq 0, & \end{array} \tag{3.7}$$

となる。そこで、 $A^\top w + c = 0,\ s > 0$ を満たすような変数の組 (w, s) を実行可能内点と呼ぶことにする。実行可能内点 (w^k, s^k) が与えられているとき、 s^k を e に写すような変数変換

$$u = S_k^{-1} s$$

を考える。このとき、問題 (3.7) の等式制約条件は

$$A^\top w + S_k u = c$$

と書けるので、

$$w = \left(A\, S_k^{-2} A^\top\right)^{-1} A\, S_k^{-2} \left(c - S_k u\right)$$

より、変換後の問題の目的関数の最急上昇方向は

$$d_u^k = -S_k^{-1} A^\top \left(A\, S_k^{-2} A^\top\right)^{-1} b$$

である。 s の空間に逆変換すると、

$$d_s^k = -A^\top \left(A\, S_k^{-2} A^\top\right)^{-1} b$$

となる。問題 (3.7) の等式制約を逸脱しないようにするには、

$$A^\top d_w^k + d_s^k = 0$$

であればよいので、

$$d_w^k = \left(A\, S_k^{-2} A^\top\right)^{-1} b$$

と選ぶことにする。ここで、

$$x^k = -S_k^{-2}\, d_s^k$$

とおくと $A x^k = b$ となるので、 x^k を主変数の推定値と考えることができる。また、 $d_s^k = 0$ ならば $b = 0$ であるから、問題 (3.7) の目的関数は定数であり、すべての実行可能解は最適であることがわかる。そこで、 $d_s^k \neq 0$ のとき、ステップサイズ $\beta_k > 0$ を定めて、次の探索点を

$$\begin{aligned} w^{k+1} &= w^k + \beta_k\, d_w^k, \\ s^{k+1} &= s^k + \beta_k\, d_s^k \end{aligned}$$

とおくことにしよう。もし $d_s^k \geq 0$ ならば、任意の $\beta_k > 0$ に対して (w^{k+1}, s^{k+1}) は問題 (3.7) の実行可能内点となるため、

$$b^\top w^{k+1} = b^\top w^k + \beta_k\, b^\top \left(A\, S_k^{-2} A^\top\right)^{-1} b \geq b^\top w^k$$

より、問題 (3.7) は有界ではないと判定される。よって、 $(d_s^k)_i < 0$ なる添字 i が存在するとき、 $\alpha \in (0,1)$ に対してステップサイズ β_k を

$$\beta_k = \min\left\{ \frac{\alpha\, s_i^k}{-(d_s^k)_i} \,\middle|\, (d_s^k)_i < 0, \quad i = 1, \cdots, n \right\}$$

で定める。結局、双対アフィン変換法のアルゴリズムは次のように記述される。

アルゴリズム D：

ステップ 1（初期設定）： 許容誤差 $\varepsilon > 0$ とパラメータ $\alpha \in (0,1)$ を定める。初期実行可能内点 (w^0, s^0) を選び、 $k := 0$ とおく。

ステップ 2（探索方向の計算）： 次式により、探索方向ベクトル (d_w^k, d_s^k) を計算する。

$$\begin{aligned} d_w^k &:= \left(A\,S_k^{-2}A^\top\right)^{-1} b, \\ d_s^k &:= A^\top d_w^k . \end{aligned}$$

ステップ 3（非有界および目的関数が定数であることの判定）： もし、 $d_s^k = 0$ ならば、目的関数が定数であるため停止する。一方、 $d_s^k \geq 0$ の場合も、もとの問題は有界ではないため停止する。さもなければ、ステップ 4 へ進む。

ステップ 4（主推定値の計算）： 次式により、主変数の推定値 x^k を計算する。

$$x^k := -S_k^{-2}\,d_s^k .$$

ステップ 5（最適性の判定）： もし $x^k \geq 0$ かつ $c^\top x^k - b^\top w^k \leq \varepsilon$ ならば、 (w^k, s^k) を双対問題の最適解, x^k を主問題の最適解として停止する。さもなければ、ステップ 6 へ進む。

ステップ 6（ステップサイズの計算）： 次式により、ステップサイズ β^k を計算する。

$$\beta_k := \min\left\{ \frac{\alpha\, s_i^k}{-(d_s^k)_i} \,\middle|\, (d_s^k)_i < 0, \quad i = 1, \cdots, n \right\}.$$

ステップ 7（探索点の更新）： 次の探索点 (w^{k+1}, s^{k+1}) を

$$\begin{aligned} w^{k+1} &:= w^k + \beta_k\, d_w^k, \\ s^{k+1} &:= s^k + \beta_k\, d_s^k \end{aligned}$$

により定める。 $k := k+1$ としてステップ 2 へ戻る。 □

もし、 $c > 0$ ならば、初期実行可能内点として $w^0 = 0,\ s^0 = c$ を用いることができる。また、 $c = 0$ ならば、もとの問題 (3.1) の目的関数値が一定となるので、解くまでもない。これら以外の場合には、何らかの方法で初期実行可能内点を見つける必要がある。そこで、主アフィン変換法と同様にして、 *big-M* を適用してみよう。人為変数 w_a と十分大きな正の数 M に対して、問題

$$\begin{array}{ll} \text{目的関数：} & b^\top w + M\,w_a \qquad\qquad \to \text{ 最大} \\ \text{制約条件：} & A^\top w + p\,w_a + s = c, \quad s \geq 0, \end{array} \tag{3.8}$$

を解くことを考える。ただし、 p は各要素が次のように定義される n 次元ベクトルである。

$$p_i = \begin{cases} 1 & c_i \leq 0 \text{ のとき }, \\ 0 & c_i > 0 \text{ のとき }. \end{cases}$$

ここで、

$$\bar{c} = \max_{i=1,\cdots,n} |c_i|$$

とおくと、 $\theta > 1$ に対して $w = 0$, $w_a = -\theta\bar{c}$, $s = c + \theta\bar{c}p$ は問題 (3.8) の実行可能内点になるので、アルゴリズム D を適用することができる。目的関数の構造より、人為変数 w_a の値は反復が進むにつれて $-\theta\bar{c} < 0$ から次第に大きくなることが予想される。しかし、アルゴリズム D が停止したときに w_a の値が負のままであるならば、双対問題 (3.7) は実行不可能である。一方、ある反復 k において $w_a^k \geq 0$ となった場合には、 $(w^k, s^k + p\,w_a^k)$ が双対問題 (3.7) の実行可能内点となるため、これを初期探索点として問題 (3.7) に対する主アフィン変換法のアルゴリズムを実行することができる。

一方、ベクトル v を導入して、次のような問題を考えることもできる。

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & b^\top w - M\,v & \to \text{最大} \\ \text{制約条件：} & A^\top w - v + s = c, \quad v \geq 0, \quad s \geq 0. & \end{array} \tag{3.9}$$

このとき、 $w = 0$, $v = \theta\bar{c}e$, $s = c + \theta\bar{c}e$ は問題 (3.9) の実行可能内点となり、アルゴリズム D を適用することができる。問題 (3.9) の最適解を (w^*, v^*, s^*) と書こう。問題 (3.9) は、線形計画問題

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & c^\top x & \to \text{最小} \\ \text{制約条件：} & A\,x = b, & \\ & 0 \leq x \leq M\,e & \end{array}$$

の双対問題であるため、もとの問題 (3.1) に最適解 x^* が存在し、 M がその各成分より大きくとられているならば、 $v^* = 0$ となり、 (w^*, s^*) は問題 (3.7) の解である。

双対アフィン変換法を数値計算の側面から見ると、条件

$$A^\top d_w^k + d_s^k = 0$$

さえ満たされていれば双対実行可能性が保たれるので、コレスキー分解などを用いて $A\,S_k^{-2}A^\top$ を係数行列にもつ連立方程式を解く場合においても、主アフィン変換法ほど打切り誤差や丸め誤差に対して敏感ではない。また、主アフィン変換法よりも速く収束する傾向が認められる。しかしながら、必ずしも主変数のよい推定値が得られないという欠点も存在する。

主アフィン変換法と同様に、双対アフィン変換法も多項式時間のアルゴリズムであるという証明は与えられていない。そこで、対数型の障壁関数を導入して探索点を $s = 0$ の面から引離し、収束を加速することを考える。問題 (3.2) に対して、次のような非線形計画問題を解く。

$$\begin{array}{lll} \text{目的関数：} & F_\mu(w) = b^\top w + \mu \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \log_e \left(c - A^\top w\right)_i & \to \text{最大} \\ \text{制約条件：} & A^\top w < c. & \end{array} \tag{3.10}$$

ここで、 μ は正のパラメータである。問題 (3.10) の解 $w^*(\mu)$ に対して、 $\mu \to 0$ のときに $w^*(\mu) \to w^*$ ならば、 w^* は双対問題 (3.2) の最適解となる。制約条件 $A^\top w < c$ が満たされるように探索を行うことにすれば、問題 (3.10) を解くためのニュートン法の方向ベクトル d_μ は、次の連立方程式を解くことによって得られる。

$$\nabla^2 F_\mu(w)\, d_\mu + \nabla F_\mu(w) = 0.$$

ただし、 $s = c - A^\top w$ とするとき、 $\nabla F_\mu(w) = b - \mu A\,S^{-1}e$, $\nabla^2 F_\mu(w) = -\mu A\,S^{-2}A$ である。これを解くと

$$d_\mu = \frac{1}{\mu}\left(A\,S^{-2}A\right)^{-1} b - \left(A\,S^{-2}A\right)^{-1} A\,S^{-1}e$$

となり、さきに求めた d_w に $-(AS^{-2}A)^{-1}AS^{-1}e$ が付加された形となっている。この項は、d_w を $s=0$ の境界から引離す力と見なすことができるため、この手法を中心化を伴う双対アフィン変換法 (dual affine scaling algorithm with centering force) と呼ぶ。C. Roos と J.-Ph. Vial は、各反復でパラメータ μ とステップサイズ β を適切に選ぶことにより、この方法が高々 $O(\sqrt{n})$ の反復で終了する多項式時間アルゴリズムであることを示している。

同じような考え方にもとづいて収束を加速する方法として、冪級数法 (poser series method) や J. Renegar の方法も存在する。それらの詳細については、文献 [1, §7.2.4] を参照されたい。

3.3. 主双対内点法

主双対内点法では、対数型の障壁関数を用いる。凸計画問題に対数型の障壁関数を適用したのは、1955 年の K.R. Frisch の仕事にさかのぼる。カーマーカーの射影変換法が 1984 年に発表された後、対数型の障壁関数は P.E. Gill らによって線形計画問題を解くために再びとりあげられることになった。彼らは 1985 年に障壁関数を用いたニュートン射影法を開発し、それがカーマーカーの射影変換法と等価であることを示した。1986 年には、N. Megiddo が対数型の障壁関数を理論的に解析し、主双対内点法の枠組を提案した。この流れに沿って、M. Kojima らは 1987 年に線形計画問題に対する多項式時間の主双対内点法のアルゴリズムを発表した。彼らの方法は、各反復で $O(n^3)$ の計算を必要とし、高々 $O(nL)$ 回の反復で収束する。従って、全体の計算量は、$O(n^4L)$ である。後になって R.C. Monteiro らは、各反復での計算が $O(n^{2.5})$, 反復回数が高々 $O(\sqrt{n}L)$, 従って、全体の計算量が $O(n^3L)$ の主双対内点法を提案している。

ここでは、標準形の線形計画問題 (3.1) とその双対問題 (3.7) について考える。それぞれの実行可能内点の集合を

$$\begin{aligned} P^0 &= \{\, x \in R^n \mid Ax = b, \quad x > 0 \,\}, \\ D^0 &= \{\, (w,s) \in R^m \times R^n \mid A^\top w + s = c, \quad s > 0 \,\} \end{aligned}$$

とおき、以下の三つの仮定が成立っているものとする。

(A1) $P^0 \neq \emptyset$.

(A2) $D^0 \neq \emptyset$.

(A3) $m \times n$ 行列 A の階数は m.

このとき、双対定理より問題 (3.1) と (3.7) の最適解における目的関数の値は等しい。

既に述べたように、正のパラメータ μ を用いて、$x > 0$ に対して対数型の障壁関数を導入すると、解くべき問題は (3.6) のように記述される。仮定 (A1), (A2) のもとで、問題 (3.6) の目的関数は狭義凸関数であることがわかる。従って、問題 (3.6) の最適解は、1 次の最適性条件

$$\begin{aligned} Ax = b, &\quad x > 0, \\ A^\top w + s = c, &\quad s > 0, \\ XSe - \mu e = 0 & \end{aligned} \tag{3.11}$$

によって一意的に定めることができる。ただし、X, S はそれぞれ x, s の各要素を対角成分とする対角行列である。

一方、条件 (3.11) は問題 (3.10) 、あるいは、それと等価な問題

$$
\begin{aligned}
&\text{目的関数：} \quad b^\top w + \mu \sum_{i=1}^{n} \log_e s_i \qquad \rightarrow \ \text{最大} \\
&\text{制約条件：} \quad A^\top w + s = c, \quad s > 0
\end{aligned}
$$

に対する必要十分な最適性の条件でもある。いま、各 $\mu > 0$ に対して、条件 (3.11) を満たす点を $(x(\mu); w(\mu), s(\mu))$ としよう。仮定 (A3) より、 $x(\mu)$ が決まれば $w(\mu)$ は一意的に定まる。また、 $x(\mu) \in P^0$, $(w(\mu), s(\mu)) \in D^0$ も明らかであろう。問題 (3.1) と (3.7) との間の双対性のギャップは

$$
\begin{aligned}
g(\mu) &= c^\top x(\mu) - b^\top w(\mu) \\
&= \left(c^\top - w(\mu)^\top A\right) x(\mu) \\
&= s(\mu)^\top x(\mu) \\
&= n\,\mu
\end{aligned}
$$

と計算される。従って、 $\mu \rightarrow 0$ のとき、双対性のギャップ $g(\mu)$ は次第に 0 に近づく。結局、仮定 (A1) - (A3) のもとで、 $\mu \rightarrow 0$ とするとき、 $x(\mu)$ は主問題 (3.1) の解 x^* に、また、$(w(\mu), s(\mu))$ は双対問題 (3.7) の解 (w^*, s^*) に収束することがわかる。

そこで、 μ の値を正の数の範囲で変化させたときに方程式系 (3.11) の解 $(x(\mu); w(\mu), s(\mu))$ が構成する曲線の軌跡を Γ と書く。 $\mu \rightarrow 0$ とするとき、 Γ は点 $(x^*; w^*, s^*)$ に至る。従って、曲線 Γ をたどる仕組みを構築することによって、線形計画問題を解くための主双対内点法の理論的枠組が構成される。そのため、主双対内点法をパス追跡法 (path-following method) として分類する場合も多い。

主双対内点法は、ある初期点 $(x^0; w^0, s^0) \in P^0 \times D^0$ から出発し、反復 k において探索方向ベクトル $(d_x^k; d_w^k, d_s^k)$ を計算し、ステップサイズ β_k を定めて、 $P^0 \times D^0$ 内に点列 $\{(x^k; w^k, s^k)\}$ を生成する。現在の探索点 $\{(x^k; w^k, s^k)\}$ の曲線 Γ からの離れ具合を測るために、次のような指標を導入する。

$$
\begin{aligned}
\phi_i^k &= x_i^k\, s_i^k\,, \qquad i = 1, \cdots, n, \\
\phi_{\text{ave}}^k &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \phi_i^k\,, \\
\phi_{\min}^k &= \min_{i=1,\cdots,n} \phi_i^k\,, \\
\theta^k &= \frac{\phi_{\text{ave}}^k}{\phi_{\min}^k}.
\end{aligned}
\tag{3.12}
$$

このとき、定義より $\theta^k \geq 1$ であり、 $(x^k; w^k, s^k) \in \Gamma$ ならば、また、その場合に限り $\theta^k = 1$ である。さらに、双対性のギャップは、次のように計算される。

$$
\begin{aligned}
c^\top x^k - b^\top w^k &= \left(x^k\right)^\top s^k \\
&= n\,\phi_{\text{ave}}^k.
\end{aligned}
$$

さて、条件 (3.11) の等式部分をニュートン法を用いて解くことを考えよう。いま、正のパラメータ μ_k に対して、 $x^k > 0,\ s^k > 0$ を満たすような点 $(x^k; w^k, s^k)$ にいるものとする。このとき、ニュートン法の探索方向ベクトル $(d_x^k; d_w^k, d_s^k)$ は、次のような連立方程式を解くことによっ

て求められる。

$$
\begin{array}{rcrcrcl}
A\,d_x^k & & & & & = & t^k, \\
& & A^\top d_w^k & + & d_s^k & = & u^k, \\
S_k\,d_x^k & & & + & X_k\,d_s^k & = & v^k.
\end{array}
\tag{3.13}
$$

ただし、

$$
\begin{aligned}
t^k &= b - A\,x^k, \\
u^k &= c - A^\top w^k - s^k, \\
v^k &= \mu_k\,e - X_k\,S_k\,e
\end{aligned}
$$

である。もし $(x^k; w^k, s^k) \in P^0 \times D^0$ ならば $t^k = 0,\ u^k = 0$ であり、連立方程式 (3.13) の解は、

$$
\begin{aligned}
d_w^k &= -\left(A\,X_k\,S_k^{-1}A^\top\right)^{-1} A\,S_k^{-1} v^k, \\
d_s^k &= -A^\top d_w^k\,, \\
d_x^k &= S_k^{-1}\left(v^k - X_k\,d_s^k\right)
\end{aligned}
\tag{3.14}
$$

となる。なお、

$$
\begin{aligned}
\left(d_s^k\right)^\top d_x^k &= -\left(d_w^k\right)^\top A\,S_k^{-1}\left(v^k + X_k\,A^\top d_w^k\right) \\
&= \left(v^k\right)^\top S_k^{-1} A^\top \left(A\,X_k\,S_k^{-1}A^\top\right)^{-1} \\
&\qquad A\,S_k^{-1}\left\{v^k - X_k\,A^\top\left(A\,X_k\,S_k^{-1}A^\top\right)^{-1} A\,S_k^{-1} v^k\right\} \\
&= 0
\end{aligned}
$$

より、 d_s^k と d_x^k は互いに直交しているので、ステップサイズを β としたきの、次の探索点での相補性条件の平均的な満足度は、

$$
\begin{aligned}
\phi_{\mathrm{ave}}^k(\beta) &= \left(x^k + \beta\,d_x^k\right)^\top \left(s^k + \beta\,d_s^k\right)/n \\
&= \phi_{\mathrm{ave}}^k + \beta\left(\mu_k - \phi_{\mathrm{ave}}^k\right)
\end{aligned}
$$

という β に関して右下がりの直線となる。従って、

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= x^k + \beta_k\,d_x^k\,, \\
w^{k+1} &= w^k + \beta_k\,d_w^k\,, \\
s^{k+1} &= s^k + \beta_k\,d_s^k
\end{aligned}
\tag{3.15}
$$

とするとき、β_k は $x^{k+1} > 0,\ s^{k+1} > 0$ を満たし、1 を越えない範囲でできるだけ大きくとるのが望ましいと考えられる。実際には、 $X_{k+1}\,S_{k+1}\,e$ の各成分の値が大きくばらつくのを避けるために、次式により求めることにする。

$$
\beta_k = \max\left\{\,\overline{\beta}\;\middle|\;\phi_i^k(\beta) \ge \psi^k(\beta),\quad i = 1,\cdots,n,\quad \text{for all } \beta \in (0,\overline{\beta}),\ 0 < \overline{\beta} < 1\quad\right\}. \tag{3.16}
$$

ただし、 $\tau \in [0,1)$ とするとき、

$$
\begin{aligned}
\phi_i^k(\beta) &= \left(x^k + \beta\,d_x^k\right)_i \left(s^k + \beta\,d_s^k\right)_i\,, \\
\psi^k(\beta) &= \phi_{\min}^k + \beta\left(\tau\,\phi_{\mathrm{ave}}^k - \phi_{\min}^k\right)
\end{aligned}
$$

である。

一方、パラメータ μ_k を固定して探索を進めると、双対性のギャップ $n\,\phi_{\text{ave}}^k$ は次第に $n\,\mu_k$ に近づく。実際には、双対性のギャップをより小さな値としたいので、 $\sigma \in (\tau, 1)$ に対して

$$\mu_k = \sigma\,\phi_{\text{ave}}^k$$

とおくことにする。

よって、主問題 (3.1) と双対問題 (3.7) に対する主双対内点法のアルゴリズムは、次のようにまとめられる。

アルゴリズム PD：

ステップ 1（初期設定）： 許容誤差 $\varepsilon > 0$ とパラメータ $0 \leq \tau < \sigma < 1$ を定める。初期探索点 $(x^0; w^0, s^0) \in P^0 \times D^0$ を選び、 $k := 0$ とおく。

ステップ 2（最適性の判定）： もし $c^\top x^k - b^\top w^k \leq \varepsilon$ ならば、 x^k を主問題の最適解, (w^k, s^k) を双対問題の最適解として停止する。さもなければ、ステップ 3 へ進む。

ステップ 3（探索方向の計算）： 式 (3.12) に従って、 ϕ_{ave}^k と $\phi_{\min}^k$ を定め、

$$\mu_k := \sigma\,\phi_{\text{ave}}^k$$

とおく。そして、探索方向ベクトル $(d_x^k; d_w^k, d_s^k)$ を式 (3.14) により計算する。

ステップ 4（ステップサイズの計算）： 式 (3.16) に従って、ステップサイズ β_k を定める。

ステップ 5（探索点の更新）： 式 (3.15) に従って、次の探索点 $(x^{k+1}; w^{k+1}, s^{k+1})$ を定める。 $k := k+1$ としてステップ 2 へ戻る。 □

主双対内点法は、多項式時間のアルゴリズムであることが示せる。実際、ステップサイズ β_k に関連して、次のような関係が成立つ [1, Theorem 7.3] 。すなわち、もし $\beta_k < 1$ ならば、

$$\beta_k \geq \frac{4\,(\sigma-\tau)}{n\,(1-2\sigma+\theta^k\,\sigma^2)} \geq \frac{4\,(\sigma-\tau)}{n\,(1+\sigma^2)\,\theta^k}$$

となり、双対性のギャップは次式に従って減少していく。

$$c^\top x^{k+1} - b^\top w^{k+1} = \{1-(1-\sigma)\,\beta_k\}\left(c^\top x^k - b^\top w^k\right).$$

また、曲線 Γ からの離れ具合を表す指標 θ^k の値は、

$$\theta^{k+1} \leq \begin{cases} \dfrac{\sigma}{\tau} + (1-\nu)\left(\theta^k - \dfrac{\sigma}{\tau}\right) & \theta^k > \dfrac{\sigma}{\tau} \text{ のとき}, \\ \dfrac{\sigma}{\tau} & \theta^k \leq \dfrac{\sigma}{\tau} \text{ のとき}, \end{cases}$$

と評価される。ただし、

$$\nu = \frac{4\,(\sigma-\tau)\tau}{n\,(1+\sigma^2)+4\,(\sigma-\tau)\,\tau}$$

である。一方、 $\beta^k = 1$ ならば、双対性のギャップは、式

$$c^\top x^{k+1} - b^\top w^{k+1} = \sigma\,\left(c^\top x^k - b^\top w^k\right)$$

に従って減少し、 θ^{k+1} は

$$\theta^{k+1} \le \frac{\sigma}{\tau}$$

の範囲にとどまる。

この結果より、もし

$$k^* = \min\left\{ k \,\middle|\, \theta^k \le \frac{\sigma}{\tau} \right\}$$

で定義される k^* が存在すれば、

$$\theta^k \le \begin{cases} \dfrac{\sigma}{\tau} + (1-\nu)^k \left(\theta^0 - \dfrac{\sigma}{\tau}\right) & k < k^* \text{ のとき}, \\ \dfrac{\sigma}{\tau} & k \ge k^* \text{ のとき}, \end{cases}$$

となる。また、そのような k^* が存在しない場合でも、任意の k に対して、不等式

$$\theta^k \le \frac{\sigma}{\tau} + (1-\nu)^k \left(\theta^0 - \frac{\sigma}{\tau}\right)$$

が成立つ。 $1-\nu < 1$ に注意すると、いずれの場合も任意の k に対して、条件

$$\theta^k \le \max\left\{\frac{\sigma}{\tau},\, \theta^0\right\}$$

が満たされることがわかる。また、

$$\hat{k} = \min\left\{ k \,\middle|\, \theta^k < \frac{\sigma}{\tau} + 1 \right\}$$

なる $\hat{k}$ は、条件

$$(1-\nu)^k \left(\theta^0 - \frac{\sigma}{\tau}\right) < 1$$

を満たす最小の k として求められる。左辺は正なので、両辺の対数をとって整理すると、

$$k > \log_e\left(\theta^0 - \frac{\sigma}{\tau}\right) \Big/ \log_e\left(\frac{1}{1-\nu}\right)$$

を得る。右辺第 1 項は、 $O(\log_e \theta^0)$ であり、第 2 項は、

$$\frac{1}{1-\nu} = 1 + \frac{4\,(\sigma-\tau)\,\tau}{n\,(1+\sigma^2)}$$

より

$$\begin{aligned} \log_e\left(\frac{1}{1-\nu}\right) &= \log_e 1 + \frac{4\,(\sigma-\tau)\,\tau}{n\,(1+\sigma^2)} + \cdots \\ &= O\left(\frac{1}{n}\right) \end{aligned}$$

となる。よって、 $\hat{k}$ は

$$\hat{k} = O\left(n \log_e \theta^0\right)$$

と評価され、 $\hat{k}$ 以上の任意の k に対して、次の不等式が成立つ。

$$(1-\sigma)\,\beta_k \ge \frac{4\,(1-\sigma)\,(\sigma-\tau)}{n\,(1+\sigma^2)\,(\sigma/\tau+1)}. \tag{3.17}$$

一方、 $0 < \sigma < 1, 0 < \beta^k \leq 1$ より $\sigma \leq 1 - (1-\sigma)\beta^k$ であることと、

$$1 - (1-\sigma)\beta^{k-1} \leq 1 - (1-\sigma)\beta^k$$

に注意すると、双対性のギャップに関して次の不等式が成立つ。

$$c^\top x^k - b^\top w^k \leq \left(1 - (1-\sigma)\,\beta^k\right)^k \left(c^\top x^0 - b^\top w^0\right).$$

従って、 (3.17) より、 $c^\top x^k - b^\top w^k \leq \varepsilon$ となるためには、 k が条件

$$\left(1 - \frac{4\,(1-\sigma)\,(\sigma-\tau)}{n\,(1+\sigma^2)\,(\sigma/\tau+1)}\right)^k < \frac{\varepsilon}{c^\top x^0 - b^\top w^0}$$

を満たさなければならない。両辺の対数をとって展開すると、

$$\begin{aligned} k &> \log_e\left(\frac{\varepsilon}{c^\top x^0 - b^\top w^0}\right) / \log_e\left(1 - \frac{4\,(1-\sigma)\,(\sigma-\tau)}{n\,(1+\sigma^2)\,(\sigma/\tau+1)}\right) \\ &= \log_e\left(\frac{c^\top x^0 - b^\top w^0}{\varepsilon}\right) / \left(-\log_e 1 + \frac{4\,(1-\sigma)\,(\sigma-\tau)}{n\,(1+\sigma^2)\,(\sigma/\tau+1)} - \cdots\right) \end{aligned}$$

を得る。よって、高々

$$O\left(n \log_e\left(\frac{c^\top x^0 - b^\top w^0}{\epsilon}\right)\right)$$

回の反復で、双対性のギャップは与えられた精度 ε に到達する。

結局、主双対内点法は、高々

$$O\left(n \log_e \theta^0\right) + O\left(n \log_e\left(\frac{c^\top x^0 - b^\top w^0}{\epsilon}\right)\right)$$

回の反復で終了することがわかる。

パラメータ τ および σ の選び方としては様々な方法が考えられる。たとえば

$$\tau = \frac{1}{4}, \qquad \sigma = \frac{1}{2}$$

とおくと、

$$\beta_k \geq \frac{4}{n\,\theta^k},$$

となり、双対性のギャップは不等式

$$c^\top x^{k+1} - b^\top w^{k+1} \leq \left(1 - \frac{2}{n\,\theta^k}\right)\left(c^\top x^k - b^\top w^k\right)$$

に従って減少する。また、

$$\nu = \frac{1}{5\,n+1}$$

より、曲線 Γ からの離れ具合は、次のように評価される。

$$\theta^{k+1} \leq \begin{cases} 2 + \left(1 - \dfrac{1}{5\,n+1}\right)\left(\theta^k - 2\right) & \theta^k > 2 \text{ のとき}, \\ 2 & \theta^k \leq 2 \text{ のとき}. \end{cases}$$

主双対内点法を実際に適用するには、初期探索点 $(x^0; w^0, s^0)$ を見つけなければならない。任意に選んだ $x^0 > 0$ と $s^0 > 0$ が等式制約条件 $A\,x^0 = b$, $A^\top w^0 + s^0 = c$ を満たすようにすることは事実上不可能であるため、人為変数 x_{n+1}, x_{n+2} を導入した主問題

$$
\begin{array}{ll}
\text{目的関数：} & c^\top x + \pi\, x_{n+1} \qquad\qquad \rightarrow \ \text{最小} \\
\text{制約条件：} & A\,x + (b - A\,x^0)\, x_{n+1} = b, \\
 & \left(A^\top w^0 + s^0 - c\right)^\top x + x_{n+2} = \lambda, \\
 & x \geq 0, \quad x_{n+1} \geq 0, \quad x_{n+2} \geq 0
\end{array}
\tag{3.18}
$$

と、人為変数 w_{m+1}, s_{n+1}, s_{n+2} を導入した双対問題

$$
\begin{array}{ll}
\text{目的関数：} & b^\top w + \lambda\, w_{m+1} \qquad\qquad \rightarrow \ \text{最大} \\
\text{制約条件：} & A^\top w + \left(A^\top w^0 + s^0 - c\right) w_{m+1} + s = c, \\
 & (b - A\,x^0)^\top w + s_{n+1} = \pi, \\
 & w_{m+1} + s_{n+2} = 0, \\
 & s \geq 0, \quad s_{n+1} \geq 0, \quad s_{n+2} \geq 0
\end{array}
\tag{3.19}
$$

を考える。ここで、 π, λ は十分大きな正の数である。実際、条件

$$
\begin{array}{rcl}
\pi & > & (b - A\,x^0)^\top w^0, \\
\lambda & > & \left(A^\top w^0 + s^0 - c\right)^\top x^0
\end{array}
$$

が成立つように π, λ を選べば、

$$
\begin{array}{rcl}
x^0_{n+1} & = & 1, \\
x^0_{n+2} & = & \lambda - \left(A^\top w^0 + s^0 - c\right)^\top x^0
\end{array}
$$

を満たす $(x^0, x^0_{n+1}, x^0_{n+2})$ は問題 (3.18) の実行可能内点となる。また、

$$
\begin{array}{rcl}
w^0_{m+1} & = & -1, \\
s^0_{n+1} & = & \pi - (b - A\,x^0)^\top w^0, \\
s^0_{n+2} & = & 1
\end{array}
$$

を満たす $(w^0, w^0_{m+1}, s^0, s^0_{n+1}, s^0_{n+s})$ は問題 (3.19) の実行可能内点である。さらに、問題 (3.1) の最適解 x^* と問題 (3.7) の最適解 (w^*, s^*) に対して、条件

$$
\begin{array}{rcl}
\pi & > & (b - A\,x^0)^\top w^*, \\
\lambda & > & \left(A^\top w^0 + s^0 - c\right)^\top x^*
\end{array}
$$

が成立っているならば、$(\overline{x}, \overline{x}_{n+1}, \overline{x}_{n+2})$ を問題 (3.18) の最適解とするとき、 $\overline{x}$ は問題 (3.1) の最適解であり $\overline{x}_{n+1} = 0$ となる。さらに、$(\overline{w}, \overline{w}_{m+1}, \overline{s}, \overline{s}_{n+1}, \overline{s}_{n+2})$ を問題 (3.19) の最適解とするとき、 $(\overline{w}, \overline{s})$ は問題 (3.7) の最適解であり $\overline{w}_{m+1} = 0$ となる [1, Theorem 7.4] 。

現実の問題に対して主双対内点法をより効率よく動作させるために、様々な改良が試みられている。その一つは、各反復で条件 $x^k > 0$ と $s^k > 0$ が満たされることだけを要求するような主

双対非実行可能内点法の考え方である。このとき、(3.13) に含まれる t^k と s^k は 0 であるとは限らないため、探索方向ベクトル $(d_x^k; d_w^k, d_s^k)$ は

$$
\begin{aligned}
d_w^k &= \left(A\,X_k\,S_k^{-1}A^\top\right)^{-1}\left\{A\,X_k\,S_k^{-1}\left(u^k - X_k^{-1}p^k\right) + t^k\right\}, \\
d_s^k &= u^k - A^\top d_w^k\,, \\
d_x^k &= S_k^{-1}\left(v^k - X_k\,d_s^k\right)
\end{aligned}
\tag{3.20}
$$

となる。これを d_x^k について書直すと、

$$
d_x^k = d_{x_{\mathrm{ctr}}}^k + d_{x_{\mathrm{obj}}}^k + d_{x_{\mathrm{feas}}}^k
$$

となる。ただし、

$$
\begin{aligned}
d_{x_{\mathrm{ctr}}}^k &= \mu_k\left\{X_k\,S_k^{-1} - X_k\,S_k^{-1}A^\top\left(A\,X_k\,S_k^{-1}A^\top\right)^{-1}A\,X_k\,S_k^{-1}\right\}X_k^{-1}e, \\
d_{x_{\mathrm{obj}}}^k &= -\left\{X_k\,S_k^{-1} - X_k\,S_k^{-1}A^\top\left(A\,X_k\,S_k^{-1}A^\top\right)^{-1}A\,X_k\,S_k^{-1}\right\}c, \\
d_{x_{\mathrm{feas}}}^k &= X_k\,S_k^{-1}A^\top\left(A\,X_k\,S_k^{-1}A^\top\right)^{-1}t^k
\end{aligned}
$$

である。d_x^k の第 1 項 $d_{x_{\mathrm{ctr}}}^k$ は、積項 $X_k^{-1}e$ からもわかるように、点 x^k を R_+^n の中心へ引戻す力として作用する。また、第 2 項 $d_{x_{\mathrm{obj}}}^k$ は、積項 $-c$ からもわかるように、目的関数値を減少させる方向であることがわかる。また、

$$
\begin{aligned}
A\,d_{x_{\mathrm{ctr}}}^k &= 0, \\
A\,d_{x_{\mathrm{obj}}}^k &= 0
\end{aligned}
$$

より、これら二つの成分が主問題 (3.1) の実行可能性の満足度合を変化させることはない。一方、第 3 項 $d_{x_{\mathrm{feas}}}^k$ に対しては、積項 t^k の定義より

$$
A\,d_{x_{\mathrm{feas}}}^k = b - A\,x^k
$$

が成立ち、主問題 (3.1) の実行可能性を改善する働きをもつことがわかる。よって、$x^0 > 0$, $s^0 > 0$ を満たす任意の点 $(x^0; w^0, s^0)$ から出発しても、実行可能性は次第に改善され、ある反復 k' において実行可能となれば、それ以後のすべての反復 $k \geq k'$ において、$t^k = 0$ が保たれる。

また、主双対内点法においては、主変数と双対変数との間で異なるステップサイズを用いることも可能である。すなわち、探索点を次式に従って更新する。

$$
\begin{aligned}
x^{k+1} &= x^k + \beta_k^P\,d_x^k\,, \\
w^{k+1} &= x^k + \beta_k^D\,d_w^k\,, \\
s^{k+1} &= x^k + \beta_k^D\,d_s^k\,.
\end{aligned}
\tag{3.21}
$$

ここで、$x^{k+1} > 0, s^{k+1} > 0$ を保証するための最も簡単な方法は、$\alpha \in (0,1)$ に対して

$$
\begin{aligned}
\beta_k^P &= \frac{1}{\max\{\,1, -(d_x^k)_1/(\alpha\,x_1^k), \cdots, -(d_x^k)_n/(\alpha\,x_n^k)\,\}}, \\
\beta_k^D &= \frac{1}{\max\{\,1, -(d_s^k)_1/(\alpha\,s_1^k), \cdots, -(d_s^k)_n/(\alpha\,s_n^k)\,\}}
\end{aligned}
\tag{3.22}
$$

と選ぶ方法である。

主双対非実行可能内点法では、各探索点 $(x^k; w^k, s^k)$ が実行可能領域にすら入っていない可能性があるため、厳密には μ_k を固定してニュートン法の反復を繰返さなければならない。しかしながら、最適解を求めるためには μ_k の値を 0 に近づけなければならないことに注意すると、実際の計算においては、各反復で μ_k の値を少しずつ小さくしていく方が望ましい。そこで、

$$\mu_k = \frac{(x^k)^\top s^k}{n}$$

と定めることにする。主双対非実行可能内点法のアルゴリズムは、次のように記述される。

アルゴリズム IPD：

ステップ 1（初期設定）： 十分小さな正の数 ε_1, ε_2, ε_3 とパラメータ $\alpha \in (0,1)$ を定める。$x^0 > 0, s^0 > 0$ を満たす初期探索点 $(x^0; w^0, s^0)$ を選び、$k := 0$ とおく。

ステップ 2（中間変数の計算）： 以下の計算を行う。

$$\begin{aligned} \mu_k &:= \frac{(x^k)^\top s^k}{n}, \\ t^k &:= b - Ax^k, \\ u^k &:= c - A^\top w^k - s^k, \\ v^k &:= \mu_k e - X_k S_k e. \end{aligned}$$

ステップ 3（最適性の判定）： もし

$$\mu_k < \varepsilon_1, \quad \frac{\| t^k \|}{\| b \| + 1} < \varepsilon_2, \quad \frac{\| u^k \|}{\| c \| + 1} < \varepsilon_3$$

ならば、x^k を主問題の最適解, (w^k, s^k) を双対問題の最適解として停止する。さもなければ、ステップ 4 へ進む。

ステップ 4（探索方向の計算）： 式 (3.20) に従って、探索方向ベクトル $(d_x^k; d_w^k, d_s^k)$ を計算する。

ステップ 5（非有界の判定）： もし、

$$t^k = 0, \quad d_x^k > 0, \quad c^\top d_x^k < 0$$

ならば、主問題は有界でないため停止する。また、

$$u^k = 0, \quad d_s^k > 0, \quad b^\top d_w^k > 0$$

である場合も、双対問題が有界でないため停止する。さもなければ、ステップ 6 へ進む。

ステップ 6（ステップサイズの計算）： 式 (3.22) に従って、ステップサイズ β_k^P, β_k^D を定める。

ステップ 7（探索点の更新）： 式 (3.21) に従って、次の探索点 $(x^{k+1}; w^{k+1}, s^{k+1})$ を定める。$k := k+1$ としてステップ 2 へ戻る。 □

このほか、双対アフィン変換法の場合と同様に、曲線 Γ を連続的に追跡するような冪級数法を構成することもできるが、その詳細は文献 [1, §7.3.7] を参照されたい。

4. おわりに

本稿では、文献 [1] の第 5 章および第 6 章に記述されている、線形計画問題に対するカーマーの射影変換法とアフィン変換法について紹介した。特に、最後に述べた主双対内点法は、線形計画問題にとどまらず、2 次計画問題、さらには、一般の非線形計画問題に対しても拡張され、多くの研究者によってその大域的収束性や局所的な収束率が研究されている。また、大規模な問題に対する数値実験を通して、実用的にも非常に有効な方法として注目を集めている。本稿が、内点法に興味をおもちの方、あるいは、内点法を用いて計算をしてみようと思っておられる方の参考になれば幸いである。

参考文献

[1] S.-C. Fang and S. Puthenpura, *Linear Optimization and Extensions: Theory and Algorithms*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1993.