学習用テキスト 内点法 (1)

内点法概論*1

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

内点法は 1984 年に Karmarkar [6] により発表されてから ,最適化問題などを解く方法として活発に研究された . Karmarkar は ,理論的な収束性を示しただけでなく ,線形計画問題の解法として ,内点法が単体法よりも実際に高速であると報告した . 内点法は ,Karmarkar 以前にも非線形計画問題の解法として Fiacco and McCormick [2] により研究されていた . また Dikin [1] は ,アフィンスケーリング法と呼ばれる最も単純な内点法を 1967 年に提案していた .

目次

1	内点法	1
1.1	内点法のアルゴリズム	2
1.2	内点法の理論的な収束性について	4
1.3	初期点と収束判定	
1.4	実用的な内点法	6
1.5	おわりに	-

1 内点法

最適化問題は,等式と不等式で表された制約条件をみたす実行可能解のうち,目的関数を最小(または最大)にする最適解を求める問題である.たとえば,線形計画問題は

最小化
$$egin{aligned} & oldsymbol{c}_1^T oldsymbol{x}_1 + oldsymbol{c}_2^T oldsymbol{x}_2 \\ & oldsymbol{h}_1 oldsymbol{x}_1 + oldsymbol{A}_2 oldsymbol{x}_2 = oldsymbol{b} \\ & oldsymbol{x}_1 \geq oldsymbol{0} \end{aligned}$$

 $^{^{*1}}$ 本論は,水野 [20] をもとに加筆修正を加えたものである.

と表される.制約条件に含まれるすべての不等式を等号ではなく厳密に不等号でみたす $(x_1>0)$ 点を (解析的な) 内点と呼ぶ.一つの内点が与えられているとき,その近傍においては不等式制約をあまり考慮せずに,等式制約条件のみのもとで目的関数を減少させる方向を求め,あるステップサイズだけ進むことにより,内点を更新することが可能である.内点法は,初期内点からこの手続きを繰り返すことにより,内点列を生成する.線形計画問題では,最適解は,内点ではなく,いくつかの不等式を等号でみたす境界点である.したがって,内点法は最適解以外の境界に近づかないように工夫しながら,最適解に近づく点列を生成する.

内点法には,3つの大きな特徴がある.一つ目は,内点法が線形計画問題だけに限らず,様々な問題を解くことができることである.二次計画問題,二次錐計画問題,半正定値計画問題,非線形計画問題,整数計画問題などほとんどの最適化問題に適用できる.また線形計画問題,二次計画問題の最適化条件を数学的にモデル化した線形相補性問題,それを一般化した非線形相補性問題も解くことができる.ゲーム論における均衡解を求める問題も線形相補性問題として定式化できれば,内点法を使うことができる.

二つ目は、理論的に収束が保障され、多くの場合に前もって必要な反復回数あるいは計算量が評価できることである。一般的にアルゴリズムは、問題のサイズ(変数の数、データの大きさ等)が大きくなるにつれて、多くの計算とメモリーを必要とする。計算量とメモリー量が問題のサイズに関する多項式関数で表される上界で抑えられるとき、アルゴリズムが多項式オーダであるという。線形計画問題を解く単体法は、多項式オーダであるかどうか不明であり、いくつかの単体法に対して多項式時間で解けない例題が存在する。内点法は、線形計画問題、凸二次計画問題、単調な線形相補性問題などを多項式オーダで解くことができる。

3 つ目の特徴は,実際に大規模な最適化問題を高速に解くことができることである. 1979 年に Khachian [7] によって提案された楕円体法が理論的に多項式オーダであったに もかかわらず,実用的に単体法に太刀打ちできなかったのとは大きな違いがある.

1.1 内点法のアルゴリズム

内点法は,初期の(実行可能または実行不能)内点が与えられたときに,探索方向を求めてその方向にあるステップサイズ進むという操作を繰り返すことにより内点を次々に更新し,最適解に十分近い点で停止する.このときの初期内点の求め方と停止条件については1.3節で解説する.ここでは,内点の更新方法に焦点をあてアルゴリズムを説明する.

Fiacco and McCormick [2] が研究したアルゴリズムは,障壁関数法と呼ばれている.

障壁関数は,制約領域の内点で定義され,境界に近づくと発散する関数である.この障壁 関数に重みをつけて目的関数に加えた拡張目的関数を定義する.このときの重みを固定し て拡張目的関数の最小値を求める操作と重みをパラメータとして更新する操作を交互に行 う方法である.そして,この重みがゼロに近づくとき,拡張目的関数の最小解が問題の最 適解に収束するという性質を利用する.この方法は,例えば今野・山下 [13] に詳しく解説 されている.

Dikin [1] により提案されたアフィン・スケーリング法は最も単純な内点法であり,実用的にも高速に問題を解くことができる.内点が与えられたとき,アフィン変換を使ってその点を各要素の値が1である点に写し,制約領域に含まれる球面上で目的関数を最小化し,逆アフィン変換により戻した点を求める.アフィンスケーリング法には,主問題あるいは双対問題を解く場合と,主問題と双対問題を同時に解く場合の三つのタイプがある.

Karmarkar [6] が提案したアルゴリズムは, Karmarkar 法または射影変換法と呼ばれている.この方法は,アフィンスケーリング法がアフィン変換を使うのに対して,射影変換を使う. Karmarkar 法が対象とする問題は,最適値が0である,問題がほとんど同次形をしているといったことが仮定されているが,これらの仮定を必要としない場合にも適用できる.

Karmarkar 以後,多くの内点法のアルゴリズムが提案されている.その中で最もよく知られているパス追跡法とポテンシャル減少法を概説する.

内点法では、最適解以外の境界に近づかないように内点を生成することが計算効率を上げるために重要である・線形計画問題の実行可能領域である多面体に対して、境界から最も離れた点として、Sonnevend [24] により定義された解析的中心または解析的センターがある・それは、多面体の境界との距離の積を最大にする点である・解析的中心の集合として形成される中心パスまたはセンターパス (path of centers) が内点法を理解する上で重要な概念であるので、線形計画問題を例として説明する・内点が任意に与えられたとき、その点と目的関数値が等しい実行可能領域を考える・最適解の集合が有界ならば、この領域も有界であり、解析的中心が存在する・この解析的中心は、最適値より大きな目的関数値に対してそれぞれ一点存在する・目的関数値をパラメータとして動かすと、解析的中心の集合はなめらかなパスとなり、それを中心パスと呼ぶ・上記のパラメータ値を最適値に近づければ、中心パス上の点は最適解に近づく・パス追跡法は、中心パスから離れないように内点列を生成する方法である・具体的には中心パスの近傍(中心パスを含む集合)を定義し、その外へ出ないような内点列を生成する・すなわち、その近傍上の内点で探索方向を求め、近傍からでないようなステップサイズだけ探索方向に進むことにより内点を更新する・

主問題と双対問題を解くパス追跡法は, Kojima et al. [10] と Tanabe [25] により提案された.主双対問題の中心パスは,パラメータを持つ方程式系の解集合として表わされる.探索方向は,この方程式の解を求めるニュートン法により計算される.中心パスの近傍も簡単に定義でき,その近傍からでないようにステップサイズを求める. Mizuno et al. [19] は,プレディクタ・コレクタ法と呼ばれるパス追跡法を提案した.このアルゴリズムは,プレディクタステップで双対ギャップを減少させる操作と,コレクタステップでパスの近くに戻るという操作を交互に行う.

ポテンシャル関数は,Karmarkar により導入された.内点に対して定義され,最適解以外の境界に近づくと $+\infty$ に発散するが,最適解では $-\infty$ に発散する.逆にポテンシャル関数値が $-\infty$ に発散する任意の点列は最適解に近づくという性質を持つ.ポテンシャル減少法は,この性質を利用して,ポテンシャル関数値が十分小さくなるまで内点列を生成することにより,最適解を求める.すなわち,内点において探索方向を求め,ポテンシャル関数値がもっとも減少するステップサイズを計算する.Iri and Imai [5] が導入した乗法的障壁関数も(対数をとれば)この性質を持つ.このような性質を持つポテンシャル関数を定義するには,前もって最適値が必要な場合がある.最適値が不明な場合には,最適値の下界値をパラメータとして持つポテンシャル関数を定義し,その下界値を更新する必要がある.線形計画問題の主問題と双対問題を同時に解く主双対ポテンシャル減少法では,このようなパラメータを必要としない.

1.2 内点法の理論的な収束性について

ていない.

内点法の理論的な収束性についての研究成果は、初期点が実行可能な場合とそれ以外の場合で大きく異なる。Karmarkar の発表から 1991 年までは、初期点が実行可能であるという仮定のもとで内点法の理論的な収束性が研究された。実際の計算実験においては、1989 年頃から実行不可能な初期点を使ったアルゴリズムが Lustig et al. [14] らにより提案され、実際に高速に問題を解くことも報告された。このようなアルゴリズムの収束性が理論的に明らかにされたのは 1991 年の末以後である。初期点が実行可能とは限らない場合のアルゴリズムをインフィージブル内点法 (infeasible-interior-point methods) と呼ぶDikin の提案したアフィンスケーリング法は、はじめは問題が非退化であるという仮定のもとでのみ収束性が示されていた。Tsuchiya and Muramatsu [28] は、退化している場合にもアフィンスケーリング法が大域的に収束することを証明した。しかし、アフィンスケーリング法で必要とされる計算量は、いまのところ多項式オーダで抑えることができ

Karmarkar 法は,反復回数が O(nL) で抑えられる多項式オーダのアルゴリズムである.ここで,n は変数の数を表し,L は問題を計算機に記述するのに必要な総ビット数を表す.そして,O(nL) は nL の高々定数倍で抑えられるという意味である.内点法では,一反復ごとに $n\times n$ 行列で表される連立一次方程式を解くので,その計算に $O(n^3)$ の基本演算を必要とする.したがって,全体として $O(n^4L)$ の基本演算を必要とする. Karmarkar は,行列の部分的な更新を使うことにより,全体の計算量を $O(n^{3.5}L)$ まで減少できることも示した.反復回数が $O(\sqrt{n}L)$ で抑えられるアルゴリズムは,Renegar [23] により提案された.Renegar の提案した方法はパス追跡法であるが, $O(\sqrt{n}L)$ 反復のポテンシャル減少法も存在する.これらと同じ計算量を必要とする多くのアルゴリズムが提案されているが,反復回数が理論的に $O(\sqrt{n}L)$ より少ないアルゴリズムはいまだに開発されていない. $O(\sqrt{n}L)$ 反復のアルゴリズムに行列の部分的更新を使えば,全体の計算量を $O(n^3L)$ に抑えることができる.

多項式オーダの内点法では,反復ごとに目的関数値と最適値の差が線形的に減少する.これは広い範囲の内点に対して成立する性質であるが,アルゴリズムで生成される内点が最適解に十分近づけば,さらに速く収束する可能性がある.そこで,1990 年頃から内点法の局所的な超一次収束性に関する研究が活発に行われた.初期の研究では,問題が非退化である,あるいは点列が収束するという仮定のもとで超一次収束が証明された.Tsuchiya [27] は,非退化の仮定をしなくとも Iri-Imai 法 [5] が超一次収束することを示した.そして,Ye et al. [30] らはプレディクタ・コレクタ法 [19] が超一次収束することを証明した.実行可能とは限らない内点を初期点とするインフィージブル内点法の大域的収束性は,Kojima et al. [8] により示された.Zhang [33] は,そのようなアルゴリズムで必要とされる反復回数が多項式オーダ $O(n^2L)$ で抑えられることを証明した.さらに計算オーダの低いアルゴリズムは,Mizuno [18] により提案され,その反復回数は O(nL) である.局所的に超一次収束するインフィージブル内点法は,Potra [22] らにより提案された.

1.3 初期点と収束判定

内点法は,内点を次々と更新することにより解に収束する点列を生成する方法である. そこで,初期内点をどのように準備するか,そして,いつどのように収束を判定するかといった問題が起こる.ここでは,線形計画問題について解説する.

まず始めに初期点として実行可能な内点を使う場合について考える.一般に,線形計画問題の実行可能解を求めることは,最適解を求めることと同程度に難しい.そこで,実行可能内点を求めるためには,人工問題を作る必要がある.人工問題は,明かな初期実行可

能解をもち,その人工問題の最適解を求めることにより,元の問題の最適解を求めることができるか,あるいは実行不能であることを判定できるような問題である.このような人工問題を作るにはビッグエム (big M) と呼ばれる大きな係数を必要とし,その定数が小さすぎると問題の実行可能性の判定に失敗する可能性があり,大きすぎると計算効率が悪くなるというジレンマがある.Ye et al. [31] は,ビッグエムを必要としない同次自己双対問題 (homogeneous and self-dual problem) を人工問題として使う方法を提案した.

インフィージブル内点法の初期内点は簡単に求められる.スラック変数を使うことにより,線形計画問題のすべての不等式条件を非負条件で表せば,任意の正の点が内点となる.初期点として,たとえばすべての要素の値が1という点を使える.理論的には大きな値の初期点を使うと計算量を多項式オーダで抑えることができるが,実際の計算では問題の性質などを利用して初期点を選ぶことになる.初期点の選び方がインフィージブル内点法の計算効率に大きな影響を与えるが,最適な初期点の選び方は判明していない.

内点法の収束条件として目的関数値と最適値の下界値の差が 2^{-2L} であるという不等式を使えば,その条件をみたす内点から目的関数値を増加させない端点を計算することにより,最適解を得ることができる.しかし,問題のサイズを表す L は大きな値であり,計算機上で 2^{-2L} より小さな値を計算することは非現実的であり,実際には計算機に依存した十分小さな数を使う.また,インフィージブル内点法では,目的関数値だけでなく,実行可能性も収束判定につけ加えなければならない.

1.4 実用的な内点法

内点法には様々なアルゴリズムがあることを 2 節で述べたが,線形計画問題を解く内点法を実際にプログラミングする場合には,計算効率を高めるために以下のことを考慮することが大事である.

- 1. 主問題を解く主内点法,双対問題を解く双対内点法,あるいは主問題と双対問題を同時に解く主双対内点法のいずれを使うか?
- 2. 初期点をどうするか?
- 3. 探索方向の求め方.
- 4. ステップサイズの決め方.
- 5. 連立一次方程式の解法.

内点法の数値実験では,Lustig et al. [14, 15] に代表されるように,主内点法あるいは 双対内点法よりも主双対内点法が使われることが多い.その理由は,主双対内点法が主問 題と双対問題の関係をうまく利用した内点法であり,計算効率がよい場合が多いからである.また,主双対内点法では,初期内点が不明な場合に人工問題を作らなくとも,インフィージブル内点法がそのまま使えるという利点もある.

初期点については,はじめから実行可能解の得られる特殊な問題を除いて,実行不能な内点が使われている.その理由としては,人工問題を使う場合にはビッグエムの値の決め方が難しい,人工問題のサイズが元の問題より大きくなり計算効率が落ちるといったことがある.人工問題として Ye et al. [31] の提案した同次自己双対問題を使うことにより,計算効率よく線形計画問題を解くことができるという報告もある.

内点法で使われるほとんどの探索方向は,センタリング方向とアフィンスケーリング方向と呼ばれる二つの方向の凸結合で表すことができる.アフィンスケーリング方向は,その名が示すようにアフィンスケーリング法で使われる方向である.センタリング方向は,解析的中心を求めるためのニュートン方向である.探索方向は,この二つのベクトルを凸結合するときの重みにより決定される.Lustig et al. の数値実験ではアフィンスケーリング方向に 99% 以上の重みを与え,ほんの少しだけセンタリング方向に重みを与えている.また,Mehrotra [16] により提案されたプレディクタ・コレクタ法を使うと,計算効率が上がると言われている.

ステップサイズについては、理論的にはパス追跡法またはポテンシャル減少法などにより決定する必要があり、その場合に多項式オーダの計算量での収束が保証されている.しかし、実際に数値実験した結果の報告では、理論的に収束が保証されているステップサイズより長くとる場合に計算効率がよい.すなわち、理論では最悪の場合を考えて危険な行動をとらないが、実際にはある程度冒険した方が速いといったことであろう. Lustig et al. が使っているステップサイズは、現在の点から探索方向に向かって実行可能領域の境界に達するまでのステップサイズに一定の割合 (99% 以上) を乗じて計算されている.

大規模な線形計画問題の係数行列は,ほとんどの要素が 0 である.そのような行列は疎行列と呼ばれる.この疎行列の性質を使い,連立一次方程式を効率よく解く必要がある.よく使われる方法は,行列の Cholesky 分解である.このとき,分解した行列が疎構造を保持するように,前もって変数あるいは制約式の順序を並べ変えることも重要である.

1.5 おわりに

内点法を勉強する,あるいは研究する場合に参考となる文献をいくつか紹介する. Karmarkar 法については, Goldfarb and Todd [3] が詳しい.パス追跡法とポテンシャ ル減少法については,それぞれ Gonzaga [4] と Todd [26] に要領よくまとめられている. 線形相補性問題の内点法については,Kojima et al. [9] にパス追跡法とポテンシャル減少法が解説され,理論的な結果もすべて証明されている.非線形計画問題の内点法は,Nesterov and Nemirovski [21] がセルフコンコーダント (self-concordant) 関数を導入し,統一的に扱っている.日本語の文献としては,今野 [12] の第 14 章に内点法が取り上げられ,Karmarkar 法などが解説されている.水野 [17] と Write[29] には,主双対内点法が説明されている.また,小島・土谷・水野・矢部 [11] と Ye[32] では,内点法全般について,詳しく解説されている.

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] Fiacco, A. V. and McCormick, G. P.: "Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques", John Wiley & Sons, New York (1968).
- [3] Goldfarb, D. and Todd, M. J.: "Linear Programming, Handbooks in Operations Research and Management Sciences, Volume 1, Optimization" North-Holland, Amsterdam (1989) 73–170.
- [4] Gonzaga C. C.: "Path Following Methods for Linear Programming", SIAM Review **34** (1992) 167–227.
- [5] Iri, M. and Imai, H.: "A Multiplicative Barrier Function Method for Linear Programming", *Algorithmica* 1 (1986) 455–482.
- [6] Karmarkar, N.: "A New Polynomial-Time Algorithm for Linear Programming", Combinatorica 4 (1984) 373–395.
- [7] Khachian, L. G.: "A Polynomial Algorithm in Linear Programming", *Dokklady Akademiia Nauk SSSR* **244** (1979) 1093–1096.
- [8] Kojima, M., Megiddo, N. and Mizuno, S.: A Primal-Dual Infeasible-Interior Point Algorithm for Linear Programming, *Mathematical Programming* **61** (1993) 261–280.
- [9] Kojima M., Megiddo N., Noma T. and Yoshise A.: "A Unified Approach to Interior Point Algorithms for Linear Complementarity Problems", Springer-Verlag, New York (1991).
- [10] Kojima, M., Mizuno, S. and Yoshise, A.: "A Primal-Dual Interior Point Algorithm for Linear Programming", *Progress in Mathematical Programming, Inte-*

- rior Point and Related Methods (ed. N. Megiddo) Springer, New York (1989) 29–47.
- [11] 小島政和, 土谷隆, 水野眞治, 矢部博:内点法, 朝倉書店 (2001)
- [12] 今野浩: 線形計画法, 日科技連 (1987).
- [13] 今野浩, 山下浩: 非線形計画法, 日科技連 (1978).
- [14] Lustig, I. J., Marsten, R. E. and Shanno, D. F. (1991). "Computation Experience with a Primal-Dual Interior Point Method for Linear Programming", *Linear Algebra and its Applications* 152, 191–222.
- [15] Lusting I. J., Marsten R. E. and Shanno D. F.: "Interior Point Methods: Computational State of Art", ORSA Journal on Computing 6 (1994) 1–14.
- [16] Mehrotra, S.: "On the Implementation of a Primal-Dual Interior Point Method", SIAM Journal on Optimization 2 (1992) 575–601.
- [17] 水野眞治: 線形計画問題の主双対内点法,統計数理 40 (1992) 27-44.
- [18] Mizuno, S.: "Polynomiality of Infeasible-Interior-Point Algorithms for Linear Programming", *Mathematical Programming* **67** (1994) 109–119.
- [19] 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.
- [20] 水野眞治: 内点法 (1), オペレーションズリサーチ,日本オペレーションズリサーチ 学会,(1995) 312-326.
- [21] Nesterov Y. and Nemirovskii A.: "Interior-Point Polynomial Algorithms in Convex Programming", SIAM Studies in Applied Mathematics, Philadelphia, USA (1994).
- [22] Potra, F. A.: "A Quadratically Convergent Predictor-Corrector Method for Solving Linear Programs from Infeasible Starting Points", Mathematical Programming 67 (1994) 383-406.
- [23] Renegar, J.: "A Polynomial-Time Algorithm Based on Newton's Method for Linear Programming", *Mathematical Programming* **40** (1988) 59-93.
- [24] Sonnevend, G.: "An Analytic Center for Polyhedrons and New Classes of Global Algorithms for Linear (Smooth, Convex) Programming", Lecture Notes in Control and information Sciences 84 (1986) 866–878.
- [25] Tanabe, K.: "Centered Newton Method for Linear Programming and Quadratic Programming", Proceedings of the 8th Mathematical Programming Symposium,

- Japan (1987) 131–152.
- [26] Todd M. J.: "Potential-Reduction Methods in Mathematical Programming", Cornell University, New York (1995).
- [27] Tsuchiya, T.: "Quadratic Convergence of Iri and Imai's Algorithm for Degenerate Linear Programming", Journal of Optimization Theory and Applications, 87 (1995) 703–726.
- [28] Tsuchiya, T. and Muramatsu, M.: "Global Convergence Result of a Long-Step Affine Scaling Algorithm for Degenerate Linear Programming Problems", SIAM Journal on Optimization 5 (1995) 525–551.
- [29] Wright, S.: "Primal-Dual Interior-Point Methods", SIAM (1997)
- [30] Ye, Y., Güler, O., Tapia, R. A. and Zhang, Y.: "A Quadratically Convergent $O(\sqrt{n}L)$ -Iteration Algorithm for Linear Programming", *Mathematical Programming* **59** (1993) 151–162.
- [31] Ye, Y., Todd, M. J. and Mizuno, S.: "An $O(\sqrt{n}L)$ -Iteration Homogeneous and Self-Dual Linear Programming Algorithm", Mathematics of Operations Research 19 (1994) 53–67.
- [32] Ye, Y.: "Interior Point Algorithms, Theory and Analysis", Wiley Intersience (1997).
- [33] 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.