乗法的罰金関数法について

――その最近の研究動向――

今井　浩

1.　基礎研究としての内点法

線形計画法に対する内点法の研究は，ここ数年の間の集中的な研究によって商用ソフトウェアまで出現した．中には，アルゴリズム用にハード的にも特にチューニングされたシステムが，計算機システムとして大変な高額で売り出され，すでに2，3件売ったと聞いている．

このような状況は，10年前まで線形計画法と言えば，単体法（シンプレックス法）という時代であったことを思えば，かなり大々的な様変わりと言える．ここに書くまでもないことであろうが，"線形計画法＝単体法"の図式に最初の打撃を与えたのは，1970年代最後にいわゆる楕円体法が線形計画問題に対する多項式時間アルゴリズムであることが示されたのが最初であった（アルゴリズムとその解析の詳しい解説が[3]にある）．多項式時間アルゴリズムというのは，どんな線形計画問題が与えられても，それを問題のサイズの多項式オーダの時間で必ず解くアルゴリズムのことである．それに対して，従来の単体法では意地の悪い問題を考えると実際に多項式時間を超える指数時間かかってしまう．そのことから，楕円体法が単体法にとって代われるかもしれないと当初は思われたが，実際的には完全に単体法が優れていることがすぐに検証された．

現在注目されている内点法は，数年前に楕円体法の時と同じように，線形計画問題に対するある種の内点法が多項式時間アルゴリズムになっているという形で発表された．この内点法そのものは，ある意味で埋もれていた研究のリバイバルといえる．実際，内点法は単体法と同じぐらいの歴史をもっているが，線形計画法に限れば，単体法の華々しい成功の前に内点法は忘れ去られていた．そして，楕円体法の時とは違って，今度の内点法の場合には，現実に内点法が単体法と同じぐらいさらにはそれよりいいぐらいの性能を持っていることが示されたことである．

このように，内点法のリバイバルをもたらしたものは，線形計画問題に対する多項式時間アルゴリズムの構成という基礎的な研究課題であったといえる．このことは，数理計画，計算機科学などで基礎的な研究に携わっている者として，嬉しい反面，自省を促されることでもある．

このように基礎理論研究から復活してきた内点法が商用ソフトウェアとして販売される一方で，現実的なメリットの見返りか，そのような基礎理論研究の成果を知的所有権として保護しようという動きも注目される．

乗法的罰金関数法は，線形計画法に対する内点法の1つで，方法が提案された最終的な論文は Algorithmica という論文誌の線形計画法に対する内点法の最初の特集号にのっている[4]．この方法そのものはごく自然的なもので，線形計画問題に対して，それを最小化することが元の問題を解くことに等しいような乗法的罰金関数を導入し，その乗法的罰金関数をニュートン法により最小化するという方法である．

この方法は，その研究当初から日本の研究者を中心に研究されてきた．ちなみに，著者が初めてこの方法について聞いたのは，東京大学計数工学科での研究室ゼミ（合同輪講と呼ばれていた）で，その日の発表者が早めに終わったか何かで時間が余ったとき，伊理先生がそれではと黒板に乗法的罰金関数を定義し，その性質について書かれたときであった．初期の頃の結果は，1985年2月のＯＲ学会数理研究計画部会で発表されている．

その後，乗法的罰金関数法の性質が調べあげられるとともに，他の方法との関連なども明らかになっている．本稿では，現在までの基礎的な研究の成果の中で，乗法的罰金関数の性質やニュートン法特有の局所的収束性に関する性質，さらには全域的収束性に関する結果などについて簡単にまとめる．まず，2節では研究当初の結果についてまとめ，当時未解決とされていた問題を整理する．そして，3節でその内の収束性に関する問題について，最近示されている結果を述べる．4節では一般の罰金関数法と同じように，関数の中でパラメタを考えるこ

いまい　ひろし　九州大学工学部情報工学科
〒812 福岡市東区箱崎6－10－1

とについて述べる．5節では，より高次の項を考えて探索方向を改善することについて述べる．

2. 乗法的罰金関数

次の型の線形計画問題を考える．

$$\min \quad \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$$
$$\text{s.t.} \quad A\boldsymbol{x} \geqq \boldsymbol{b}$$

ここで，$\boldsymbol{c}$, $\boldsymbol{x}$ は n 次元ベクトル，$\boldsymbol{b}$ は m 次元ベクトル，A は $m\times n$ 行列である．ベクトル $\boldsymbol{b}$ の第 i 要素を b_i で，行列 A の第 i 行ベクトルを $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}$ で表わす．この線形計画問題に対する乗法的罰金関数を次のように定義する．

$$F(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - c_0)^{m+1} \Big/ \prod_{i=1}^{m} (\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - b_i) \qquad (\boldsymbol{x} \in \mathrm{Int}\ X)$$

ここで，X は実行可能領域：

$$X = \{\boldsymbol{x} \mid A\boldsymbol{x} \geqq \boldsymbol{b}\}$$

を表わし，$\mathrm{Int}\,X$ は X の内部を表わす．また，c_0 は元の線形計画問題の目的関数の最小値 ($\min \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$) の値とし，既知であるとする（この仮定については後述）．

このように乗法的罰金関数はもともと線形であったものを非線形の世界に持ち込むものであるが，一方で次のようなよい性質がある．以下では，真の内点 $\boldsymbol{x}(0) \in \mathrm{Int}\ X$ が存在するものとし，実行可能領域 X は有界であるとする．これらの条件は非常に緩いもので，成り立っていない場合でも容易に対処できる．X が有界であるから，最適解の集合 $\hat{X}$：

$$\hat{X} = \{\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in \mathrm{Int}\ X,\ \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = c_0\}$$

も有界である．このとき，

(1) $\mathrm{Int}\,X$ の点列 $\boldsymbol{x}(\nu)$ ($\nu=0,1,2,\ldots$) に対して $F(\boldsymbol{x}(\nu)) \to 0$ ならば，$\boldsymbol{x}(\nu)$ と $\hat{X}$ の距離は0に収束する．したがって，最適解が $\hat{\boldsymbol{x}}$ 唯一の場合には，$\hat{\boldsymbol{x}}$ に収束する[4]．

$F(\boldsymbol{x}) > 0$ ($\boldsymbol{x} \in \mathrm{Int}\,X$) である．したがって，このことから，元の線形計画問題を解くには，乗法的罰金関数を $\mathrm{Int}\,X$ で最小化して，$F(\boldsymbol{x})$ を0に収束させる点列を求めれば良いことがわかる（最終的に線形計画問題の最適解は内点ではなく境界上でとられるが，十分 $F(\boldsymbol{x})$ が0に近ければ，そのような厳密な最適解を求めることができる）．

さらに，この乗法的罰金関数 $F(\boldsymbol{x})$ に関しては次のようなよい性質が成り立つ．

(2) $F(\boldsymbol{x})$ は $\mathrm{Int}\,X$ で狭義の凸関数である[4]．

これより，一般の非線形問題でおこる局所解への収束とか，ヘシアン（2階微分）が正則でなくなってニュートン法の反復ができなくなるとかいったことがおこらない．そうであるなら，$F(\boldsymbol{x})$ を最小化する最も素直な方法は，ニュートン法を適用することである．すなわち，$\boldsymbol{x}(0)$ から出発して，各段階でニュートン方向

$$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N}} = -(\nabla^2 F)^{-1} \nabla F$$

を計算し，その方向への直線探索を行なって，解の更新を行なっていく方法である．この方法を，乗法的罰金関数法と呼ぶ．

ニュートン法の局所的超1次収束性についてはよく知られているが，この場合は最適解のところでヘシアンが存在せず，一般の超1次収束の議論は適用できない．実際，通常の場合ニュートン方向 $-(\nabla^2 F)^{-1}\nabla F$ へのステップ幅は1に収束するのに対して，非退化の場合の乗法的罰金関数方向へのステップ幅は $m-n$ に収束する．このことに関しては次のことがわかっている．

(3) 線形計画問題が完全に非退化である場合（すなわち，最適解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ は唯一であり，そこで効いている制約式の数はちょうど n である），乗法的罰金関数法は局所的に2次収束する[4]．

退化している場合にも超1次収束性を示すであろうことは予想されていた．また，全域的収束性については乗法的罰金関数がテイラー展開の2次の項まででよく近似できると仮定したときには，1次収束することが示されていた[4]．その仮定そのものはきついものであるが，証明の中で必要とされている部分はニュートン方向に関係するところだけであり，その部分で条件が成り立っていれば全域的1次収束がいえる．また，これらの予想については計算機実験的には確かめられていた．

乗法的罰金関数に関して，ここでは簡単のためいくつかの仮定をした．その中で一見して最も目立つものは，線形計画問題の目的関数の最適値がわかっているという仮定であろう．最適値は，最適解がわかればすぐに求められるが，最適解を求めることが今の問題だからである．理論的には，与えられた線形計画問題をその双対問題と組み合せた問題を考えることにより，容易に条件を満たす等価な線形計画問題を構成できる．ただし，この方法では問題のサイズが大きくなるという欠点がある．もちろん，もともとの情報量は一緒なので，双対問題部分の扱い方を工夫すればこの欠点は克服できると思われる．

最適解値既知の仮定が成り立っていない場合に対処する別の方法は，c_0 を最適目的関数値以下の値からスタートし，その c_0 に関する乗法的罰金関数をニュートン法で最小化しながら，同時に c_0 を最適解値に収束させていくという方法である[2]．また，同論文では，この方法の議

論の過程で，乗法的罰金関数に関する双対性の議論，いわゆる中心トラジェクトリの議論が行なわれている．この方法については以前にOR学会誌[1]にわりと詳しいものがのっているので，ここではそれを参照するにとどめておく．

3. 局所的および全域的収束性

乗法的罰金関数の局所的収束性については，他の方法との関係を明らかにすることなどを通して，より精密な結果が得られきている．Tsuchiya, Tanabe [6]は，乗法的罰金関数法の探索方向 $\boldsymbol{d}_{\mathrm{N}}$ が，いわゆるアフィンスケーリング法の探索方向 $\boldsymbol{d}_{\mathrm{AS}}$ と中心トラジェクトリにそった方向 $\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}$ の1次結合で表わされる[7]ことを利用した，より拡張した解析を行なっている．以下，その結果についてまとめる．

方向 $\boldsymbol{d}_{\mathrm{AS}}$, $\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}$ はそれぞれ他の解説でも取り上げられているので，ここではその定義だけを記しておく．

$$D=\mathrm{diag}\,[\boldsymbol{a}_1{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_1),\ 1/(\boldsymbol{a}_2{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_2),\ldots,\ 1/(\boldsymbol{a}_m{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_m)]$$

$$B=AD^2A$$

$$\boldsymbol{d}_{\mathrm{AS}}=-B^{-1}\boldsymbol{c}$$

$$\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}=B^{-1}DA\boldsymbol{e}$$

ここで，$\boldsymbol{e}$は $(1,1,\ldots,1)^{\mathrm{T}}$ なる m 次元ベクトルである．

Tsuchiya, Tanabe [6]は，まず，方向 $\boldsymbol{d}_{\mathrm{AS}}, \boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}$ の漸近的振舞いに関する解析を行ない，それを1次結合での係数の漸近的評価と組み合せて，$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N}}$ が$-\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}$ の方向に漸近すること，$-\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}$ 方向が漸近的に2次収束を示すことから，$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N}}$ 方向の2次収束性を導いている．また，本稿とは直接関係しないが，アフィンスケーリング法の方向 $\boldsymbol{d}_{\mathrm{AS}}$ に関しては，局所的に1次収束することが示されている．

同論文では，退化している場合についても論じている．そこでは，最適解 $\boldsymbol{x}$ は唯一であるが，$\hat{\boldsymbol{x}}$ では $h\ (\geq n)$ 本の制約が効いている場合について詳しく解析している．さらに，最適解が唯一つでない場合についても同様に2次収束することが予想されている．

一方，全域的収束性に関しては，最近厳密な直線探索を仮定したとき，乗法的罰金関数法が全域的1次収束性を示すことが，Zhang, Shi [8]によって示されている．その手法は，乗法的罰金関数のヘシアンをアフィンスケーリングで使われる行列 B で近似し，関連した行列の固有値を評価するといったものである．ただし，計算量の観点などからは次のような点が指摘される：

- 直線探索が厳密に行なえることを仮定しているが，そのための手間を評価していない（多項式オーダの時間で問題を解くためには，もちろんこの部分も多項式時間で行なえないといけない）．
- 直線探索の手間をのぞいた部分については，$O(n^7L)$ 回のニュートン法反復を必要とすることしか示されていない（Lは線形計画問題の入力サイズ）．これは，他の方法が $O(nL)$ とか $O(\sqrt{n}L)$ 回の反復しか要しないのと比べると，多項式ではあるもののまだ大きい．

論文[8]はまだ予備的なものであるので著者らによってすでにこれらの結果は改善されている可能性はある．最終的に上記の2点を解決できて，$O(nL)$ 反復回で乗法的罰金関数法が収束することが示せるかどうかは，まだ未解決の興味ある問題である．

4. 乗法的罰金関数のパラメタ化

一般の罰金関数法では，よくパラメタを変えながら元の問題の最適解を求めるということが行なわれる．乗法的罰金関数法ではどうであろうか．

乗法的罰金関数での c_0 はパラメタとみなすことができる．c_0 については，前述したように最適線形目的関数値より小さな値から始め，それを最適値に収束させながら罰金関数を最小化していく方法はすでに論じられている（[2]；前述したように[1]に解説がある）．

他のパラメタとして，$F(\boldsymbol{x})$ の分子の $(\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-c_0)^{m+1}$ の $m+1$ を $M\geq m+1$ なる M を導入してその M で置き換えることが考えられる．すなわち，関数 $F_M(\boldsymbol{x})$：

$$F_M(\boldsymbol{x})=(\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-c_0)^M\Big/\prod_{i=1}^{m}(\boldsymbol{a}_i{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i)$$

を最小化することを考えるわけである．このとき，$F(\boldsymbol{x})$ に関して成り立った性質(1)，(2)は $F_M(\boldsymbol{x})$ に対しても成り立つ．$F_M(\boldsymbol{x})$ が凸関数であることは，[4]で書かれている．

$F_M(\boldsymbol{x})$ をニュートン法で最小化するときの探索方向を $\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},M}$ で表わす．すなわち，

$$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},M}=-(\nabla^2F_M)^{-1}\nabla F_M$$

$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},M}$ を $M\geq m+1$ なる全ての M に対して考え，それの張る空間 $\mathrm{span}\,[\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},M}\,|\,M\geq m+1]$ を考えると

(4) $\mathrm{span}\,[\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},M}\,|\,M\geq m+1]=\mathrm{span}\,[\boldsymbol{d}_{\mathrm{AF}},\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}]$ である．

このように $\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},M}$ はある平面内に含まれる．この平面 $\mathrm{span}\,[\boldsymbol{d}_{\mathrm{AF}},\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}]$ に関しては，Yamashita[7]が直線探索の代わりにこの平面内での $F(\boldsymbol{x})$ の最小化を行なうこと

を提案している．また，同論文ではこの平面が他の多項式時間アルゴリズムの方向を含んでいることを利用して，この平面探索を行なうアルゴリズムが多項式時間テルゴリズムになることを示している．この性質(4)は，こういった乗法的罰金関数のパラメタ化からもこの平面が導出されることを示している．

このパラメタ化に関して，$M\to\infty$の極限を考えるということが，理論的興味から考えられる．$M\to\infty$の極限の方向を $\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},\infty}$ で表わすと，

(5) $$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},\infty}\propto(\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-c_0-\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}B^{-1}D\boldsymbol{A}\boldsymbol{c})\,\boldsymbol{d}_{\mathrm{AF}}-(\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}B^{-1}\boldsymbol{c})\,\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}$$

であり，$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},\infty}$ 方向に直線探索していくとやはり局所的に2次収束性を示す．また，$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},\infty}$ は元の線形目的関数値 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ の減少方向にもなっている[5]．

この性質(5)は，アフィンスケーリング方向 $\boldsymbol{d}_{\mathrm{AF}}$ と対比しておもしろい，$\boldsymbol{d}_{\mathrm{AF}}$ も $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ の減小方向であるが，局所的には1次収束的な振舞いしか示さない．ただ，$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},\infty}$ という方向は，$\boldsymbol{d}_{\mathrm{N},M}$ の大きさが$M\to\infty$のとき0になっていくことなどからも，その方向だけで実際に役に立つような方向ではないと思われている．

[4]では，直線探索を改善する手法として線形反復手法(linear subiteration scheme)を示しているが，笹川[5]はその手法により生成される方向は全てここまでで述べた平面に含まれていることを示している．

5. 3次元探索

前節では直線探索を平面探索に拡張することについて触れた．すると，さらに3つめの方向を導入して3次元探索をアルゴリズムの過程で行なうことが考えられる．3つめの方向としてはニュートン法を高次化して得られる方向が考えられる．すなわち，各点でそこでのニュートン方向へ微少に動くことにより構成されるトラジェクトリ（アナログニュートンパス）の主法線ベクトル $\boldsymbol{z}$ が候補として上げられる．

主法線ベクトル $\boldsymbol{z}$ の導出は少々複雑であるが，簡潔に表わせる結果として次のことが示されている[5]．

(6) $\boldsymbol{z}\in\mathrm{span}\,[\boldsymbol{d}_{\mathrm{AF}},\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}},\boldsymbol{d}_3]$

ここで，$\boldsymbol{d}_3$ は

$$\boldsymbol{d}_3=B^{-1}\left(\sum_{i=1}^{m}\left\{\frac{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}_{\mathrm{N}}}{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i}\right\}^2\frac{\boldsymbol{a}_i}{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i}\right)$$

で定義される．

$\boldsymbol{d}_3$ は $\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}$ が

$$\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}=B^{-1}\left(\sum_{i=1}^{m}\frac{\boldsymbol{a}_i}{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i}\right)$$

で表わされることと比べられる $\boldsymbol{d}_3\notin\mathrm{span}\,[\boldsymbol{d}_{\mathrm{AS}},\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}}]$ なので $\mathrm{span}\,[\boldsymbol{d}_{\mathrm{AF}},\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}},\boldsymbol{z}]=\mathrm{span}\,[\boldsymbol{d}_{\mathrm{AF}},\boldsymbol{d}_{\mathrm{C}},\boldsymbol{d}_3]$ となり，$\boldsymbol{z}$ の複雑な式を扱わずに3次元探索空間を構成することができる．

3次元探索による効果については，まだあまりわかっていない．

6. まとめ

乗法的罰金関数法について，最近の研究成果などを中心にまとめた．計算量の観点からは，最近 $O(n^{2.5}L)$ 回のLビット計算を行なうだけで線形計画問題を解くアルゴリズムが開発されたと聞く．乗法的罰金関数法についても計算量の観点からの検討をより加えていくことと，それと同時にそれらの結果が実用的には何を意味するのかを明らかにしていくことが必要であろう．

参考文献

[1] 今井浩：線形計画問題に対する乗法的罰金関数法について，オペレーションズ・リサーチ，Vol.32, No.1 (1987), pp.29—33.

[2] H. Imai: Extensions of the Multiplicative Penalty Function Method, *Journal of the Operations Research Society of Japan*, Vol.30 No.2 (1987), pp.160—178.

[3] 伊理正夫：線形計画法，共立出版，1986.

[4] M. Iri and H. Imai: A Multiplicative Barrier Function Method for Linear Programming. *Algorithmica*, Vol.1(1986), pp.455—482.

[5] 笹川卓：線形計画法における内点法の研究．東京大学大学院工学系研究科計数工学専攻修士論文，1988

[6] T. Tsuchiya and K. Tanabe: Local Convergence Properties of Newton Methods in Linear Programming, Technical Report, The Institute of Statistical Mathematics, 1988.

[7] H. Yamashita: A Polynomially and Quadratically Convergent Method for Linear Programming, Preprint, 1986.

[8] Zhang and Shi: On Polynomial Property of Iri-Imai's New Algorithm for Linear Programming, Prepsint, 1988.