統計数理（1998）
第46巻 第2号 335-343

特集「計算と最適化」
［研究ノート］

ホモトピー法と内点法

統計数理研究所　水野眞治

（受付 1998年3月9日；改訂 1998年8月10日）

要旨

線形計画問題を解く内点法は，基本的にセンターパスを追跡する方法とみなすことができる．一方，ホモトピー法は，与えられた方程式系を補助方程式系に連続的に変形する方程式系を定義し，その解集合に含まれるパスを追跡することにより，もとの方程式系を解く方法である．そこで，線形計画問題から方程式系を導き出し，補助方程式系との間のホモトピーを定義する．そして，導かれたホモトピー方程式系の解集合に含まれるパスが内点法のセンターパスであり，そのパスを追跡する方法がインフィージブル内点法とみることができることを示す．

キーワード：内点法，線形計画問題，ホモトピー法，方程式系．

1. はじめに

内点法は，線形計画問題を解く画期的なアルゴリズムとして Karmarkar (1984) により発表され，それ以来最適化の分野で活発に研究されている．現在では大規模な線形計画問題を効率よく解くアルゴリズムとして広く認められており，最適化問題を解く多くのソフトウエアに採用されている．市販のソフトウエアに最もよく使われている内点法は，Megiddo (1989), Kojima et al. (1989), Tanabe (1988) らにより提案された主双対内点法とそれを任意の初期点から実行できるようにアレンジしたインフィージブル内点法である．インフィージブル内点法は，田辺(1989)，Lustig (1990) らにより提案され，その後 Kojima et al. (1993), Zhang (1994), Mizuno (1994) らにより理論的な収束性が明らかにされた．内点法についてより詳しくは，水野 (1995a, 1995b)，土谷 (1998) などを参考にしていただきたい．

内点法は，基本的に問題の実行可能領域内に存在するセンターパスを追跡するアルゴリズムであるとみなすことができる．しかし，内点法が発表される以前から，パスを追跡する方法として，ホモトピー法がよく知られていた．ホモトピー法は，1970年代に方程式系の解を計算する方法として活発に研究された (Allgower and Georg (1990) あるいは小島 (1981) を参照)．

本論では，線形計画問題の解が非負制約付き方程式系の解となることを示し，その方程式系を解くホモトピー法が一種の内点法となっていることを示す．2節では，方程式系を解くホモトピー法を説明する．3節で線形計画問題を導入し，その解が非負制約付き方程式系の解となることを示す．4節では，線形計画問題から導かれた方程式系を解くホモトピー法を説明する．そして，5節において，ホモトピー法の一種として内点法を見る．

本論は，ホモトピー法と内点法の関係をみることを目的としており，必ずしも数学的には厳密でない議論もあることを前もってお断りする．

2. ホモトピー法

ホモトピー法は，与えられた方程式系と補助方程式系の間のホモトピー方程式系を定義し，その解集合に含まれるパスを近似的に追跡する方法である．パスを追跡するには，微分を使う方法と区分的線形近似を使う方法があるが，ここでは前者の方法のみをとりあげる．

nを正の整数とし，n次元の実数ユークリッド空間をR^nとあらわす．連続微分可能な写像f: $R^n \to R^n$が与えられたとき，$x \in R^n$を変数とする非線形方程式系

$$f(x)=0 \tag{2.1}$$

の解を求める問題を考える．このような方程式系を解くには，ある程度の近似解が得られているならばニュートン法が有効であるが，一般にそうであるとは限らない．

$x^0 \in R^n$を定数ベクトルとするとき，写像fと関連して，x^0を解とする補助方程式系

$$g(x)=0 \tag{2.2}$$

を用意する．この条件をみたすgとしてさまざまな写像が考えられるが，よく使われるのは

$$g(x):=f(x)-f(x^0)$$

あるいは

$$g(x):=x-x^0$$

などである．このようにgを定義したとき，上の補助方程式系(2.2)は，明らかに解x^0をもつ．後者の場合には，x^0が唯一の解であるが，前者の場合にはその他の解を持つこともある．

補助方程式系 (2.2) を方程式系 (2.1) まで連続的に変形するため，変数xとパラメータtを持ち，$t=0$のときfに一致し，$t=1$のときにgに一致する写像，すなわち，次の条件をみたす写像$h: R^n \times [0,1] \to R^n$を導入する：

$$h(x,0)=f(x),$$
$$h(x,1)=g(x).$$

このような写像hをfとgのホモトピーと呼ぶ．上記の条件を満たすもっと簡単なホモトピーは，

$$h(x,t):=tg(x)+(1-t)f(x)$$

である．

xとtをともに変数とみなし，方程式系

$$h(x,t)=0 \tag{2.3}$$

を考える．この方程式系では，変数の数が方程式の数より1つ多い．したがって，適当な条件のもとで (非退化の場合に)，領域$R^n \times (0,1]$上で，この方程式系の解集合

$$S:=\{(x,t): h(x,t)=0, x \in R^n, t \in (0,1]\}$$

は，互いに交わらないパスとループの集まりとなる(図1参照)．この定義において，$t=0$が含まれないことに注意する．このことから，写像fの解集合が非退化となる (有限個の孤立点よりなる) とは仮定していない．

ホモトピーhと写像gの定義から明らかなように，

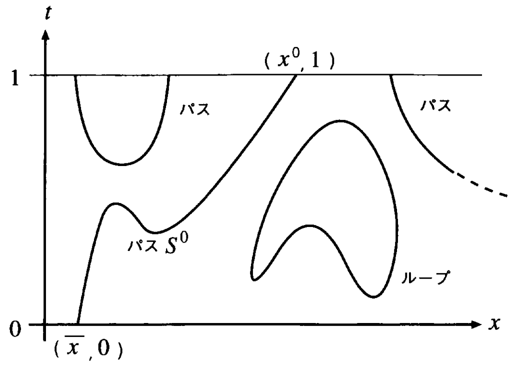

図1. ホモトピー方程式系の解集合.

$$h(x^0, 1)=0$$

が成立する．すなわち，点 $(x^0, 1)$ は方程式系 (2.3) の解であり，集合 S の要素である．また，この点 $(x^0, 1)$ は，ホモトピーの定義域 $R^n \times [0, 1]$ の境界上にある．したがって，集合 S には点 $(x^0, 1)$ を1つの端点とするパスが含まれる．このパスを S^0 と呼ぶとき，次の3つの場合が考えられる．

（i） S^0 は有界で，他方の端は境界 $R^n \times \{0\}$ にいくらでも接近する．
（ii） S^0 は有界で，他方の端点も境界 $R^n \times \{1\}$ 上にある．
（iii） S^0 は発散する．

ここで，（i）と（ii）で表現が異なっているのは，S が $R^n \times (0, 1]$ 上で定義されている（$t=1$ は含まれているが，$t=0$ は含まれていない）からである．すなわち，S^0 が有界で他方の端が境界 $R^n \times \{1\}$ にいくらでも接近すれば必ず実際に端点が $R^n \times \{1\}$ 上にある．

最初に場合（i）を考える（図1参照）．パス S^0 の1つの端点 $(x^0, 1)$ は，既知である．したがって，この点を出発点として，パス S^0 を数値的に追跡する，すなわち S^0 上の点列 $\{(x^k, t^k)\}$ を生成することができるとする．S^0 は有界であるから，点列 $\{(x^k, t^k)\}$ には，集積点 $(\bar{x}, \bar{t})$ が存在する．ホモトピーは連続であるから，この点 $(\bar{x}, \bar{t})$ はホモトピー方程式系 (2.3) の解である．また，場合（i）の条件より $\bar{t}=0$ となる．このとき，ホモトピーの定義から

$$h(\bar{x}, 0)=f(\bar{x})=0$$

が成立する．このようにして，方程式系 (2.1) の解 $\bar{x}$ を求めることができる．何らかの条件により，場合（ii）あるいは（iii）が起こり得ないならば，上に述べた方法により方程式系 (2.1) を解くことができる．たとえば，補助方程式系 (2.2) がただ一つの解しか持たない場合（線形方程式系の場合など）には，（ii）は起こり得ない．また，解集合 S が有界であるならば，場合（iii）は起こり得ない．実際，ある種の写像（たとえば多項式）f に対して，S が有界となるような補助写像 g が知られている．

数値的にパス S^0 を追跡する方法（プレディクタ・コレクタ法）を簡単に説明する．詳しくは，小島（1981）あるいは Allgower and Georg (1990) を参照していただきたい．数値的にパスを追跡するには，パス上に点列 $\{(x^k, t^k)\}$ を生成する．$t^0=1$ とすれば，初期点は (x^0, t^0) である．第 k 番目のパス上の（近似）点 (x^k, t^k) が求められているとしよう．この点において，パス S^0 の接ベクトル方向 (dx, dt) を計算する．この方向は，ホモトピーのヤコビ行列を使った連立一次方

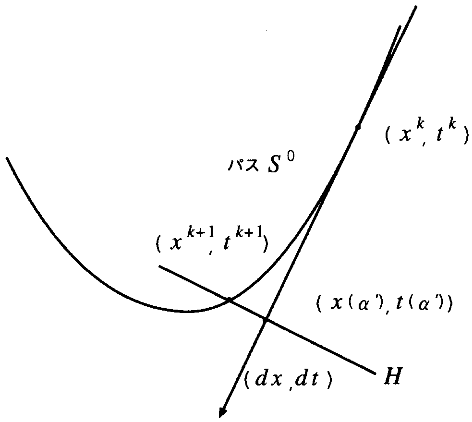

図2. ホモトピー法による点の更新.

程式系を解くことにより計算できる．現在の点からこの接線方向にステップサイズ α だけ進んだ点を

$$(x(\alpha), t(\alpha)) := (x^k, t^k) + \alpha(dx, dt)$$

とする．この点は，パスの接線上にあるから，ステップサイズ α が小さいならば，パスから大きく離れない (図2参照)．適当なステップサイズ α' をきめ，$(x(\alpha'), t(\alpha'))$ を求める．この点を通り，接線方向 (dx, dt) と直交する超平面 H を考える．ステップサイズ α' が十分小さいならば，超平面 H とパス S^0 は交点を持ち，その交点は点 $(x(\alpha'), t(\alpha'))$ からあまり離れていないはずである (図2参照)．したがって，ニュートン法などにより，容易にこの交点 (の近似点) を計算することができる．そのようにして計算される新しい点を (x^{k+1}, t^{k+1}) とする．この操作を繰り返すことによりパス S^0 上の点列 $\{(x^k, t^k)\}$ を生成する．そして，パラメータ t^k の値が0となる (あるいは十分小さくなる) ときの点 x^k が解きたい方程式系 (2.1) の解となる．この方法において，パスの接線方向に進むステップをプレディクタ，そこからパス上の点に戻るステップをコレクタと呼ぶ．

3. 線形計画問題

この節では，線形計画問題とその双対問題を導入し，線形計画問題の解が非負制約付き方程式系を解くことにより求められることを示す．

線形計画問題は，線形制約の下で線形関数を最小化する変数を求める問題として，次のように定式化できる．

$$\begin{array}{lll} (\mathrm{P}) & \text{最小化} & c^T x \\ & \text{制約条件} & Ax = b, \quad x \geq 0. \end{array}$$

ここで，$x \in R^n$ が変数で，$A \in R^{m \times n}$, $b \in R^m$, $c \in R^n$ は定数データである．この問題を主問題とするとき，その双対問題は，次のように定式化される．

$$\begin{array}{lll} (\mathrm{D}) & \text{最大化} & b^T y \\ & \text{制約条件} & A^T y + s = c, \quad s \geq 0, \end{array}$$

ここで，$y \in R^m$ と $s \in R^n$ が変数である．

線形計画問題の双対定理により，主問題(P)に最適解が存在するならば，双対問題にも最適解が存在し，その最適値が等しい．このとき，

$$c^T x - b^T y = (A^T y + s)^T x - (Ax)^T y = s^T x = 0$$

が成立する．この条件と変数 x と s の非負条件より，相補性条件

$$x_i = 0 \quad \text{または} \quad s_i = 0$$

がすべての要素に対して成り立つ．ベクトル x の各要素を対角成分として持つ n 次の対角行列を X とあらわすとき，上記の条件は

$$Xs = 0$$

とあらわすことができる．したがって，主問題の最適解を x^*，双対問題の最適解を (y^*, s^*) とするとき，$(x, y, s) = (x^*, y^*, s^*)$ は，次の条件を満たす

$$\begin{aligned} Ax &= b\,, \\ A^T y + s &= c\,, \\ Xs &= 0\,, \\ (x, s) &\geq 0\,. \end{aligned}$$

逆に，(x, y, s) がこれらの条件をみたすならば，x と (y, s) は，それぞれ主問題(P)と双対問題(D)の最適解である．

以上の議論をまとめると，写像 $f: R^{n+m+n} \to R^{n+m+n}$ を

(3.1) $$f(x, y, s) := (Ax - b, A^T y + s - c, Xs)$$

と定義すれば，主問題と双対問題の最適解の組 (x^*, y^*, s^*) は，非負制約付き方程式系

(3.2) $$f(x, y, s) = 0\,, \qquad (x, s) \geq 0$$

の解である．逆に，この制約付き方程式系の解は主問題と双対問題の解となる．このようにして，線形計画問題から方程式系が導かれる．

4. 線形計画問題とホモトピー法

前節で線形計画問題から導かれた非負制約付き方程式系 (3.2) をホモトピー法で解くことを考える．

まず，補助方程式系の解として適当な定数ベクトル $(x^0, y^0, s^0) \in R^{n+m+n}$ を定める．ただし，$(x^0, s^0) > 0$ をみたすとする．最も単純な決め方は，すべての要素が 1 であるベクトル e に対して $x^0 = e, y^0 = 0, s^0 = e$ とする．このベクトル (x^0, y^0, s^0) と前節(3.1)で定義した写像 f を使い，写像

$$\begin{aligned} g(x, y, s) &:= f(x, y, s) - f(x^0, y^0, s^0) \\ &= (A(x - x^0), A^T(y - y^0) + (s - s^0), Xs - X^0 s^0) \end{aligned}$$

を定義する．明らかに，$g(x^0, y^0, s^0) = 0$ が成立し，(x^0, y^0, s^0) は補助方程式系(2.2)の解である．

つぎにホモトピー $h: R^{n+m+n} \times [0, 1] \to R^{n+m+n}$ を

$$(4.1)\qquad \begin{aligned} h(x,y,s,t) &:= tg(x,y,s)+(1-t)f(x,y,s)\\ &= f(x,y,s)-tf(x^0,y^0,s^0)\\ &= (Ax-b-t(Ax^0-b),\ A^Ty+s-c-t(A^Ty^0+s^0-c),\\ &\quad\ Xs-tX^0s^0) \end{aligned}$$

により定義し，ホモトピー方程式系 (2.3) を考える．2節で定義したように，ホモトピー方程式系の解集合を S とする．一般にホモトピー方程式系の解集合 S は，複数のパスとループからなり非常に複雑であるが，線形計画問題より導かれた方程式系の場合には，つぎのような特徴がある．

定理 1. ホモトピー方程式系の解集合 S は，非負制約 $(x,s)\geq 0$ を満たす領域 $\{(x,y,s,t)\in R^{n+m+n}\times(0,1]:(x,s)\geq 0\}$ 上で1つのパス S^0 となっている．このパス S^0 は，t に関して単調で，$(x^0,y^0,s^0,1)$ を1つの端点とする．線形計画問題 (P) が最適解を持つならば，S^0 は有界であり，もう一方の端は境界 $R^{n+m+n}\times\{0\}$ 上の1点 $(\bar{x},\bar{y},\bar{s},0)$ に収束する．もし，線形計画問題 (P) が最適解を持たない（実行不能であるか最小値が存在しない）ならば，S^0 は非有界である．

この定理は，任意の t に対してホモトピー方程式系が非負領域で高々1つの解をもつことと，そのような解を持つパラメータ t の集合が開区間となっていることから簡単に導かれる．詳しい証明についてはたとえば Mizuno et al. (1995) を参照していただきたい．

上の定理において，S^0 が有界な場合には，収束先の点 $(\bar{x},\bar{y},\bar{s})$ は，線形計画問題の主問題と双対問題の解の組である．したがって，パス S^0 を初期点 $(x^0,y^0,s^0,1)$ から追跡し点列 $\{(x^k,y^k,s^k,t^k)\}$ を生成するとき，有界であれば線形計画問題の最適解を得ることができ，発散すれば問題に最適解が存在しないことを判定できる．

5. 内 点 法

線形計画問題の内点法は，ホモトピー法と密接な関係がある．とくに，インフィージブル内点法は，定理1で定義したパス S^0 を追跡するホモトピー法の1つとみなすことができる．ここでは，2節で説明したプレディクタ・コレクタ法にもとづき，インフィージブル内点法を説明する．

定理1にあるように，パス S^0 は t に関して単調である．このことを利用すれば，ホモトピー法を次のように単純化することができる．

- プレディクタステップにおいて，ステップサイズを簡単に計算する．
- コレクタステップでは，接線方向に直交する超平面ではなく，パラメータ t を固定した超平面を使う．
- コレクタステップでは，パス S^0 に近づけば十分で，パス上の点に戻る必要はない．

上記のように簡単化された方法がインフィージブル主双対内点法である．このアルゴリズムを具体的に説明する．

まず，ステップサイズの計算法について述べる．パス S^0 は，その定義と (4.1) より

$$\begin{aligned} S^0=\{(x,y,s,t)\in R^{n+m+n}\times(0,1] &: (x,s)\geq 0,\ Ax-b-t(Ax^0-b)=0,\\ &A^Ty+s-c-t(A^Ty^0+s^0-c)=0,\ Xs-tX^0s^0=0\} \end{aligned}$$

とあらわすことができる．任意の正の定数 $\beta\in(0,1)$ に対して，S^0 の定義における最後の等式を

緩和することにより，パス S^0 の近傍を

$$N(\beta)=\{(x,y,s,t)\in R^{n+m+n}\times(0,1]:(x,s)\geq 0, Ax-b-t(Ax^0-b)=0,$$
$$A^Ty+s-c-t(A^Ty^0+s^0-c)=0, \|Xs-tX^0s^0\|\leq\beta t(x^0)^Ts^0/n\}$$

と定義する．2つの値 $0<\beta_1<\beta_2<1$ に対して大小2つの近傍 $N(\beta_1)$ と $N(\beta_2)$ を使う．ここで紹介する内点法では，点列 $\{(x^k,y^k,s^k,t^k)\}$ を小さい方の近傍 $N(\beta_1)$ 内に生成する．すなわち，近傍 $N(\beta_1)$ 内の点をパス上の点の近似とみなす．いま k 番目の点 $(x^k,y^k,s^k,t^k)\in N(\beta_1)$ が得られているとする．この点 (x^k,y^k,s^k,t^k) でパス S^0 の接線方向 (dx,dy,ds,dt) を計算する（実際には，点 (x^k,y^k,s^k,t^k) はパス S^0 上にあるとは限らないので，この点を通り，S^0 を近似するパスの接線を計算する）．プレディクタステップでは，この接線方向に進み，大きい方の近傍 $N(\beta_2)$ からでない最大のステップサイズ α' を求め，中間点

$$(x',y',s',t'):=(x^k,y^k,s^k,t^k)+\alpha'(dx,dy,ds,dt)$$

を計算する．

次に，コレクタステップでは，パラメータを $t=t'$ に固定し，S^0 上の点を定める方程式系

$$Ax-b-t'(Ax^0-b)=0,$$
$$A^Ty+s-c-t'(A^Ty^0+s^0-c)=0,$$
$$Xs-t'X^0s^0=0$$

に対して，得られている点 (x',y',s') からニュートン法を繰り返し適用する．そして，小さい方の近傍 $N(\beta_1)$ 内の点が得られた時点で，その点と t' の組を次の点 $(x^{k+1},y^{k+1},s^{k+1},t^{k+1})$ とする．

インフィージブル内点法は，上記のプレディクタステップとコレクタステップを繰り返すことにより，パス S^0 を追跡する点列を生成する．そして，その結果として線形計画問題を解くことができる．

6. おわりに

本論では，インフィージブル内点法が方程式系を解くホモトピー法と見ることができることを示した．しかし，これは内点法の1つの見方に過ぎず，このような見方だけでは，内点法の今日までの発展をすべて説明することは不可能である．

極端な言い方をすれば，Karmarkar (1984) による発表以前において，ホモトピー法を使い線形計画問題を解くことができたはずである．しかし，当時そのようなことを実行あるいは研究しようとは誰も考えなかった．それは，ホモトピー法を使って線形計画問題を解いても，シンプレックス法より効率よく解けるはずはないと思っていたからである．内点法が，ホモトピー法とは別に，独自の解法として研究されてきたからこそ，現在あるようにシンプレックス法と同等あるいはそれ以上のアルゴリズムになったのである．そして，内点法が十分発展した現在だからこそ，ホモトピー法と内点法の関係を本論にあるように振り返って見ることができた．

謝　辞

本論の初稿に対して査読者から有益なコメントをいただいたことに感謝します．また，本研究の一部は，統計数理研究所共同研究（9-共研 B-2，9-共会-3）ならびに文部省科学研究費基盤研究（C）（08680478）から補助を受け行われました．

参考文献

Allgower, E. L. and Georg, K. (1990). *Numerical Continuation Methods*, Springer, Berlin.

Karmarkar, N. (1984). A new polynomial-time algorithm for linear programming, *Combinatorica*, **4**, 373-395.

小島政和 (1981).『相補性と不動点』, 産業図書, 東京.

Kojima, M., Mizuno, S. and Yoshise, A. (1989). A primal-dual interior point algorithm for linear programming, *Progress in Mathematical Programming, Interior-Point and Related Methods* (ed. N. Megiddo), 29-47, Springer, New York.

Kojima, M., Megiddo, N. and Mizuno, S. (1993). A primal-dual infeasible-interior-point algorithm for linear programming, *Math. Programming*, **61**, 261-280.

Lustig, I. J. (1990). Feasibility issues in primal-dual interior-point method for linear programming, *Math. Programming*, **49**, 145-162.

Megiddo, N. (1989). Pathways to the optimal set in linear programming, *Progress in Mathematical Programming, Interior-Point and Related Methods* (ed. N. Megiddo), 131-158, Springer, New York.

Mizuno, S. (1994). Polynomiality of infeasible-interior-point algorithms for linear programming, *Math. Programming*, **67**, 109-119.

水野眞治(1995a). 線形相補性問題の内点法,『離散構造とアルゴリズム IV』(室田一雄 編), 61-97, 近代科学社, 東京.

水野眞治 (1995b). 内点法 (1)-(4), 日本オペレーションズ・リサーチ学会誌, **35**, 321-326, 376-381, 437-442, 508-512.

Mizuno, S., Todd, M. J. and Ye, Y. (1995). A surface of analytic centers and primal-dual infeasible-interior-point algorithms for linear programming, *Math. Oper. Res.*, **20**, 135-162.

Tanabe, K. (1988). Centered Newton method for mathematical programming, *System Modeling and Optimization* (eds. M.Iri and K. Yajima), 197-206, Springer, New York.

田辺國士 (1989). Centered Newton method for linear programming: exterior point method, 統計数理, **37**, 146-148.

土谷 隆(1998). 最適アルゴリズムの新展開——内点法とその周辺 I, II, システム・制御・情報, **42**, 218-226, 334-343.

Zhang, Y. (1994). On the convergence of a class of infeasible interior-point methods for the horizontal linear complementarity problem, *SIAM J. Optim.*, **4**, 208-227.

Homotopy Methods and Interior-point Methods

Shinji Mizuno

(The Institute of Statistical Mathematics)

An interior-point method for linear programming basically traces a path of centers in the feasible region of the problem. A homotopy method finds a solution of a system of equations by tracing a path which consists of the solutions to a homotopy between the given system of equations and an auxiliary system. Since a linear programming problem can be transformed into a system of equations with nonnegative constraints, we explain an infeasible-interior-point algorithm in a framework of a homotopy method for the system of equations induced from a primal-dual pair of linear programming problems.

Key words: Interior-point methods, linear programming, homotopy methods, system of equations.