# 0-1 整数変数を含む非凸 2 次最適化問題に対する面的縮小を用いた非負半正定値緩和

田中　未来
(東京工業大学大学院社会理工学研究科経営工学専攻　現所属・同大学院社会理工学研究科経営工学専攻)
主指導教員　中田和秀 准教授　副指導教員　水野眞治 教授

## 1. はじめに

本研究では次のような 0-1 整数変数を含む非凸 2 次最適化問題について考える：

$$\left|\begin{array}{lll} \text{minimize} & \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{x}+2\boldsymbol{\gamma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} & \\ \text{subject to} & \boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\beta_i & (i=1,\dots,m), \\ & \boldsymbol{x}\geq\boldsymbol{0}, & \\ & x_j\in\{0,1\} & (j\in B). \end{array}\right. \tag{1}$$

ここで，$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\dots,\boldsymbol{\alpha}_m)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^{m\times n}$, $\boldsymbol{\beta}=(\beta_1,\dots,\beta_m)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^m$, $\boldsymbol{\gamma}\in\mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{\Gamma}\in\mathcal{S}^n$ はデータを表す定数，$\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ は変数，$B\subset\{1,\dots,n\}$ は 0-1 整数変数になる変数を指定する添字集合である．なお，$\mathcal{S}$ は対称行列錐を表す．

## 2. CPO 問題による表現と DNN 緩和

問題(1)は次の完全正値最適化（completely positive optimization；CPO）問題に等価変換できる[1]：

$$\left|\begin{array}{lll} \text{minimize} & \boldsymbol{\Gamma}\bullet\boldsymbol{X}+2\boldsymbol{\gamma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} & \\ \text{subject to} & \boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\beta_i & (i=1,\dots,m), \\ & \boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\alpha}_i=\beta_i^2 & (i=1,\dots,m), \\ & x_j=X_{jj} & (j\in B), \\ & \begin{pmatrix}1 & \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{x} & \boldsymbol{X}\end{pmatrix}\in(\mathcal{C}^{1+n})^*. & \end{array}\right. \tag{2}$$

ここで $\mathcal{C}^*=\{\boldsymbol{M}=\boldsymbol{N}\boldsymbol{N}^{\mathrm{T}}:\boldsymbol{N}\geq\boldsymbol{O}\}$ は完全正値行列錐と呼ばれる閉凸錐である．この変換により非凸性と離散性は解消されたが，一般に $\boldsymbol{M}\in\mathcal{C}^*$ かどうかを判定することは難しく，この問題は実行可能性を判定することさえ難しい．そこで本研究では $\mathcal{C}^*\subset\mathcal{S}_+\cap\mathcal{S}_{(+)}$ という包含関係を用いた非負半正定値（doubly nonnegative：DNN）緩和を行う．ここで $\mathcal{S}_+$, $\mathcal{S}_{(+)}$ はそれぞれ半正定値行列錐，非負行列錐を表す．DNN 緩和問題は半正定値最適化（semidefinite optimization：SDO）問題に帰着可能だが，等価な SDO 問題のサイズは非常に大きいため，大規模な DNN 緩和問題を既存の SDO ソルバを用いて解くことは難しい．また，問題(2)に対する DNN 緩和問題は実行可能内点解をもたないため安定に解くことは難しい．

そこで，問題(2)あるいはその DNN 緩和問題を実行可能内点解が存在しうる問題に変換する．Burer[1] は，問題(2)を等価な CPO 問題に変換することで実行可能内点解が出現する例を示している．しかし本研究の結果，$m\geq 2$ の問題に対してその方法を用いても実行可能内点解が出現しないことが明らかになった．

## 3. 面的縮小

SDO 問題を実行可能内点解をもつ問題に変換する方法として，面的縮小[5]がある．本研究では SDO 問題に対する面的縮小を拡張し，DNN 緩和問題に適用する．ここでは，次のような等式標準形の非負半正定値最適化問題に対する面的縮小について述べる：

$$\left|\begin{array}{lll} \text{minimize} & \boldsymbol{C}\bullet\boldsymbol{X} & \\ \text{subject to} & \boldsymbol{A}_i\bullet\boldsymbol{X}=b_i & (i=1,\dots,m), \\ & \boldsymbol{X}\in\mathcal{S}_+^n\cap\mathcal{S}_{(+)}^n. & \end{array}\right. \tag{3}$$

この問題に対して面的縮小を行うために，

$$\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=0,\ \boldsymbol{S}=-\sum_{i=1}^{m}\boldsymbol{A}_i y_i\in\mathcal{S}_+^{1+n} \tag{4}$$

を満たす $\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^m$ を求める．次に，$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}$ となるような $\boldsymbol{R}\in\mathbb{R}^{n\times r}$ を求め，$\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{L},\boldsymbol{R})$ が正則となるように $\boldsymbol{L}\in\mathbb{R}^{n\times(n-r)}$ をとる．ここで，$r=\mathrm{rank}(\boldsymbol{S})$ である．さらに，$\boldsymbol{U}\in\mathbb{R}^{(n-r)\times n}$ を $\boldsymbol{V}^{-1}$ の第 $1,\dots,n-r$ 行を取り出して作った部分行列とし，$\tilde{\boldsymbol{A}}_i=\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$, $\tilde{\boldsymbol{C}}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{C}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$ とおくと，問題(3)は次のように変形できる：

$$\left|\begin{array}{lll} \text{minimize} & \tilde{\boldsymbol{C}}\bullet\tilde{\boldsymbol{X}} & \\ \text{subject to} & \tilde{\boldsymbol{A}}_i\bullet\tilde{\boldsymbol{X}}=b_i & (i=1,\dots,m), \\ & \boldsymbol{X}-\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{O}, & \\ & \tilde{\boldsymbol{X}}\in\mathcal{S}_+^{n-r},\ \boldsymbol{X}\in\mathcal{S}_{(+)}^n. & \end{array}\right. \tag{5}$$

また，$\boldsymbol{L}$ を $\mathbb{R}_+^{n\times(n-r)}$ からとるとき，

$$\left|\begin{array}{lll} \text{minimize} & \tilde{\boldsymbol{C}}\bullet\tilde{\boldsymbol{X}} & \\ \text{subject to} & \tilde{\boldsymbol{A}}_i\bullet\tilde{\boldsymbol{X}}=b_i & (i=1,\dots,m), \\ & \tilde{\boldsymbol{X}}\in\mathcal{S}_+^{n-r}\cap\mathcal{S}_{(+)}^{n-r} & \end{array}\right. \tag{6}$$

は問題(3)の緩和問題になる．以下では問題(5)を強DNN 緩和問題，問題(6)を弱 DNN 緩和問題と呼ぶ．これらの問題には実行可能内点解が存在しうる．

この面的縮小を問題(2)の DNN 緩和問題に対して適用する場合，条件(4)を満たす $\boldsymbol{y}$ を簡単に構成することができる．また，面的縮小後は $2m$ 個の等式制約が冗長になるため，取り除くことができる．

## 4. 中心パスと主双対パス追跡法

強 DNN 緩和問題(5)とその双対問題に対して，ある $\mu>0$ が存在して次の条件を満たす点 $(\tilde{\boldsymbol{X}}, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}, \tilde{\boldsymbol{S}}, \boldsymbol{T})$ の集合を中心パスと呼ぶ：

$$\begin{cases} \tilde{\mathcal{A}}\tilde{\boldsymbol{X}}=\boldsymbol{b}, \boldsymbol{X}-\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{O}, & \tilde{\boldsymbol{X}}\in\mathcal{S}_{+}^{n-r}, \quad \boldsymbol{X}\in\mathcal{S}_{(+)}^{n}, \\ \tilde{\mathcal{A}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}+\tilde{\boldsymbol{S}}+\boldsymbol{U}\boldsymbol{T}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}=\tilde{\boldsymbol{C}}, & \tilde{\boldsymbol{S}}\in\mathcal{S}_{+}^{n-r}, \quad \boldsymbol{T}\in\mathcal{S}_{(+)}^{n}, \\ & \tilde{\boldsymbol{X}}\tilde{\boldsymbol{S}}=w\mu\boldsymbol{I}, \quad \boldsymbol{X}\circ\boldsymbol{T}=\mu\boldsymbol{E} \end{cases}$$

ここで $\tilde{\mathcal{A}}$ は線形写像 $\tilde{\boldsymbol{X}}\mapsto(\tilde{\boldsymbol{A}}_1\bullet\tilde{\boldsymbol{X}}, ..., \tilde{\boldsymbol{A}}_m\bullet\tilde{\boldsymbol{X}})^{\mathrm{T}}$, $\tilde{\mathcal{A}}^{\mathrm{T}}$ は $\tilde{\mathcal{A}}$ の随伴写像，$\circ$ は行列に対する Hadamard 積，$w$ は重みづけパラメータである．中心パスは滑らかな曲線になっており，$\mu\downarrow 0$ のとき中心パス上の点は最適解の１つに収束する．主双対パス追跡法は，$\mu\downarrow 0$ の方向に中心パスに沿った点列を生成することにより，主問題と双対問題を同時に解くアルゴリズムである．

## 5. 探索方向の計算

主双対パス追跡法の各反復においてボトルネックとなる探索方向の計算は，係数行列が $(-\mathcal{H},\tilde{\mathcal{A}}^{\mathrm{T}};\tilde{\mathcal{A}},\boldsymbol{O})$ であるような線形方程式系を解くことに帰着できる．ここで，$\mathcal{H}=\hat{\boldsymbol{W}}^{-1}\otimes\hat{\boldsymbol{W}}^{-1}+(\boldsymbol{U}\otimes\boldsymbol{U})\mathrm{Diag}(\boldsymbol{X}^{(-1)}\circ\boldsymbol{T})(\boldsymbol{U}\otimes\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}}$ である．ただし，$\hat{\boldsymbol{W}}$ は $\hat{\boldsymbol{W}}\tilde{\boldsymbol{S}}\hat{\boldsymbol{W}}=\tilde{\boldsymbol{X}}$ を満たす唯一の行列，$\otimes$ は Kronecker 積，$\boldsymbol{X}^{(-1)}$ は $\boldsymbol{X}$ の各成分の逆数をとった行列を表す．この係数行列は大規模かつ密であるため，大規模な問題ではこの係数行列をメモリ上に保持することは困難である．そこで本研究では，Krylov 部分空間法の１つである PSQMR 法[2]を用いることで使用メモリ量を削減する．一般に，Krylov 部分空間法の収束性は係数行列の固有値分布に依存するが，今回の場合，係数行列が主双対パス追跡法の反復点が最適解に近づくにつれて悪条件になるため，適切な前処理を行う必要がある．そこで本研究では，凸２次半正定値最適化問題で用いられている前処理[4]の拡張を行う．

$\mathcal{H}$ は $n+1$ 個の Kronecker 積で表すことができるため，複数個の Kronecker 積の和を１個の Kronecker 積で近似した前処理が考えられる．本研究では，その際に成り立ついくつかの性質を示した．これにより前処理の計算を効率よく行うことができる．

**Theorem 1.** 行列 $\boldsymbol{G}_1, ..., \boldsymbol{G}_q\in\mathbb{R}^{n\times n}$, $\boldsymbol{K}_1, ..., \boldsymbol{K}_q\in\mathbb{R}^{n\times n}$ と $\boldsymbol{\sigma}\in\{-1, +1\}^q$ に対し，$\boldsymbol{K}_p=\sigma_p\boldsymbol{G}_p$ という関係が成り立つとき，$\|\sum_{p=1}^{q}\boldsymbol{G}_p\otimes\boldsymbol{K}_p-\boldsymbol{V}_{\mathrm{L}}\otimes\boldsymbol{V}_{\mathrm{R}}\|$ を最小とする $\boldsymbol{V}_{\mathrm{L}}$, $\boldsymbol{V}_{\mathrm{R}}$ について，$\boldsymbol{V}_{\mathrm{L}}=c\boldsymbol{V}_{\mathrm{R}}$ となる定数 $c$ が存在する．

**Theorem 2.** 対称行列 $\boldsymbol{G}_1, ..., \boldsymbol{G}_q\in\mathcal{S}^n$, $\boldsymbol{K}_1, ..., \boldsymbol{K}_q\in\mathcal{S}^m$ に対し，Kronecker 積の和 $\sum_{p=1}^{q}\boldsymbol{G}_p\otimes\boldsymbol{K}_p$ が正定値であるとき，$\|\sum_{p=1}^{q}\boldsymbol{G}_p\otimes\boldsymbol{K}_p-\boldsymbol{V}_{\mathrm{L}}\otimes\boldsymbol{V}_{\mathrm{R}}\|$ を最小とする $\boldsymbol{V}_{\mathrm{L}}\otimes\boldsymbol{V}_{\mathrm{R}}$ は正定値である．

また，主双対パス追跡法が収束性を損なわないようにするために，主問題の探索方向の補正[3]を行った．

## 6. 数値実験

面的縮小と Krylov 部分空間法を用いた探索方向の計算を併用することにより，多次元ナップサック問題とポートフォリオ最適化問題については高精度の，２次割当問題とビンパッキング問題については中精度の解を高速に求めることができた．また，弱 DNN 緩和問題の最適値と元の問題の最適値との差は問題によって大きく異なり，緩和の質が大きく低下する場合があったのに対し，強 DNN 緩和問題の最適値は元の問題の最適値に非常に近かった．

### 参考文献

[1] S. Burer: On the copositive representation of binary and continuous nonconvex quadratic programs, *Mathematical Programming*, **120**, 479–495 (2009).

[2] R.W. Freund and N.M. Nachtigal: A new Krylov-subspace method for symmetric indefinite linear systems, *Proceedings of the 14th IMACS World Congress on Computational and Applied Mathematics*, 1253–1256 (1994).

[3] M. Kojima, M. Shida and S. Sindoh: Search directions in the SDP and monotone SDLCP: generalization and inexact computation, *Mathematical Programming*, **85**, 51–80 (1999).

[4] K.C. Toh: An inexact primal-dual path following algorithm for convex quadratic SDP, *Mathematical Programming*, **112**, 221–254 (2008).

[5] H. Waki and M. Muramatsu: Facial reduction algorithm for conic optimization problems, *Technical Report* (2010).