共正値／完全正値最適化の新展開

有馬　直彦

対称行列空間における共正値錐とその双対錐である完全正値錐が最適化理論で議論され始めたのは 1990 年代のそれも後半である．それ以降いくつもの NP 困難な問題がこれらの錐上での線形最適化問題に帰着できることが証明され，最近この分野の研究論文が急増しているようである．ここでは最近発表された，ある形の 2 次制約 2 次最適化問題とそれに対応する完全正値最適化問題の関係を示した論文と，その結果を 0-1 混合整数線形制約 2 次最適化問題に応用した論文を紹介する．またその考え方をモーメント錐に適用し多項式最適化問題に拡張した論文についてその概要を説明する．

キーワード：共正値錐，完全正値錐，錐最適化問題，0-1 混合整数最適化，多項式最適化

1. 自己紹介

この企画のテーマは「新世代が...」となっていますが，私は当年とって 62 歳なので新世代というにはかなりの無理があります．確かに研究活動を始めてまだ日が浅いのでそういう意味で編集者の方にこの機会をいただいたのだと思いますが，この企画のほかの新進気鋭の研究者の皆様とは大分状況が異なりますので，まずその辺の説明からさせていただくことにします．

私は慶応義塾大学管理工学科の関根智明研究室で学部，修士を過ごし 1977 年に修了しました．当時のこの研究室には先輩として現在東工大名誉教授の小島政和先生，筑波大学の住田潮教授，山本芳嗣教授がおられ，同期には現在チューリッヒ工科大学の福田公明教授がいて，また共同の指導教官として西野寿一先生もいらしたという誠に恵まれた環境でした．そこでこの分野の面白さを徹底的に教えられ私としても博士課程に残りたかったのですが経済的理由もあり，企業に行っても給料をもらって同じような研究ができるのではないかという甘い考えで就職しました．ところが配属されたのは研究部門とはかけ離れた部門で，何年も配置転換を希望しましたが全く聞いてもらえず，仕事も忙しく専門知識も忘れていくのでそのうちに諦めてしまいました．そして 3 年前になりますが 60 歳の定年を迎え決して華々しかったとは言いがたい 34 年間にわたる会社員人生を静かに終えました．

そこで年寄りの冷や水ですが，まだ若干未練があるこの世界の雰囲気だけにでも浸ってみたいなと思いました．大学院を受験しても受かるわけないしと思っていたところ，先生の許可があればなれるという研究生という制度があることを知りました．そこで当時東工大の小島先生に相談に行ったところ「邪魔しなきゃいいよ」ということで晴れて研究生としてスタートしました．普通の学生であれば恥ずかしくてとても聞けないような質問を小島先生に一対一で質問できて，かつ私が理解するまで懇切丁寧に教えてくれるという奇跡的な環境にいるので，ごくごく狭い範囲であれば何とかついていけるというのが現在の状況です．

2. はじめに

さて研究生になるには当然研究テーマが必要なのですが，私の卒論のテーマだった「非凸 2 次計画問題」（線形制約下での非凸 2 次関数最適化）を選びました．学部のときに刀根薫先生担当の選択科目を取ったのですが，結局生徒は私だけになってしまい，なんと刀根先生と一対一のゼミ形式で授業を受けるという幸運にも恵まれました．その関係で刀根先生から，非凸 2 次計画を切除平面法で解くアルゴリズムに対して反例を示した論文があるので読んでみたら，と言われたのが卒論をこのテーマにしたきっかけでした．私のつたない理解では，「連続最適化」の分野で，非凸 2 次計画問題は「非凸最適化問題」の中では，最も単純な問題（NP 困難な問題ということでは意味ありませんが）だとの思い込みがあったので，この空白の 34 年間にこの問題について何が起こったのかを勉強するのは私にはちょうどいいかなと思った次第です．

空白の 34 年間の間に新しく出てきたものの中に，半正定値最適化問題があります．これが非凸 2 次計画の緩和問題になることは小島先生から直々にお聞きして

ありま　なおひこ
中央大学研究開発機構
〒 112–8551 東京都文京区春日 1–13–27

いたので，小島研のゼミで S. Burer の 2009 年の有名な完全正値最適化に関する論文 [4] を読んでいるのを聞かせてもらっていたとき，初めは 0-1 条件の付いた非凸 2 次計画の緩和についての論文だろうぐらいに思っていました．ところが結論が「大域最適値が完全に一致する」というのを聞いて，私にとっては卒倒しそうなぐらいの驚きでした．ただ周りの反応を見ると「NP 困難な問題を別の NP 困難な問題に変換しただけ」と素っ気ない．でもまあ研究テーマからいってもこの分野を勉強するのは結構楽しめそうだと思いました．

3. 共正値／完全正値最適化問題

そろそろ本題に入ります．最近小島先生を中心にこの分野の研究をされていて私も参加させていただいているので，この機会にその一連の研究について説明します．

まず共正値／完全正値最適化問題の概要について説明します．以降，$\mathbb{R}^n$ は n 次元ベクトル空間，$\mathbb{R}^n_+$ でその非負象限，$\mathbb{S}^n$ は $n \times n$ 対称行列空間，$\mathbb{N}$ でその非負行列錐，$\mathbb{S}^n_+$ は半正定値行列錐を表します．また conv A は集合 A の凸包を表します．$X \bullet Y$ で行列の内積を表すと，$x^T A x = A \bullet xx^T$ と書けます．錐 $\mathbb{K}$ に対して

$$\mathbb{K}^* = \{A : A \bullet B \geq 0, \text{ for all B} \in \mathbb{K}\}$$

を双対錐 $\mathbb{K}^*$ と呼びます．そして共正値錐 (Copositive Cone) $\mathbb{C}$ および完全正値錐 (Completely Positive Cone) $\mathbb{C}^*$ は以下のように定義されます．

$$\begin{aligned}\mathbb{C} &= \left\{X \in \mathbb{S}^n : x^T X x \geq 0, \text{ for all } x \in \mathbb{R}^n_+\right\}\\ \mathbb{C}^* &= \left\{X \in \mathbb{S}^n : X = \sum_{i=1}^{n(n+1)/2} x_j x_j^T,\ x_j \in \mathbb{R}^n_+\right\}\\ &= \text{conv}\left\{X \in \mathbb{S}^n : X = xx^T,\ x \in \mathbb{R}^n_+\right\}\end{aligned}$$

上記定義で $\mathbb{R}^n_+$ を $\mathbb{R}^n$ で置換えると上記 3 つの集合はすべて半正定値錐 $\mathbb{S}^n_+$ の定義になります．$\{X : X = xx^T, x \in \mathbb{R}^n_+\} = \{X : X = xx^T, X \geq 0\}$ なので

$$\begin{aligned}\mathbb{C}^* &= \text{conv}\left\{X \in \mathbb{S}^n : X = xx^T,\ X \geq 0\right\}\\ \mathbb{S}^n_+ \cap \mathbb{N} &= \text{conv}\left\{X \in \mathbb{S}^n : X = xx^T\right\}\\ &\quad \cap \text{conv}\left\{X \in \mathbb{S}^n : X \geq 0\right\}\end{aligned}$$

と書けます．一般的に 2 つの集合 A と B について

$$\text{conv}(A \cap B) \subseteq (\text{conv}(A) \cap \text{conv}(B)) \tag{1}$$

の包含関係は自明なので結局

$$\mathbb{C}^* \subseteq (\mathbb{S}^n_+ \cap \mathbb{N}) \subset \mathbb{S}^n_+ \subset (\mathbb{S}^n_+ + \mathbb{N}) \subseteq \mathbb{C}$$

が成り立つことが知られています．ここで $\mathbb{C}$ と $\mathbb{C}^*$，$(\mathbb{S}^n_+ + \mathbb{N})$ と $(\mathbb{S}^n_+ \cap \mathbb{N})$，$\mathbb{S}^n_+$ と $\mathbb{S}^n_+$ はそれぞれ双対錐になっています．不思議なことに行列のサイズが 4 以下の場合は上記の両端の包含関係が等号になるということが証明されています．すなわち，$\mathbb{C}^* = (\mathbb{S}^n_+ \cap \mathbb{N})$ と $(\mathbb{S}^n_+ + \mathbb{N}) = \mathbb{C}$ が成り立ち，逆に行列のサイズが 5 以上の場合は必ずギャップが存在するということです．

実はこの一連の研究の主要な結果の一つは，最適化問題の 2 つの許容領域が「どのような条件下で包含関係 (1) の等号が成り立つか」を示したことです．また次の非常に単純な事実が重要な役割を果たします．

$$\begin{aligned}&a_1 = 0,\ a_2 = 0, \ldots,\ a_n = 0\\ \Longleftrightarrow\ &a_1 + a_2 \cdots + a_n = 0,\ a_i \geq 0 \text{ for all } i\end{aligned} \tag{2}$$

次の問題

$$\begin{aligned}\text{min.} \quad & Q \bullet X\\ \text{sub. to} \quad & A_i \bullet X = b_i \quad (i = 1, \ldots, m),\\ & X \in \mathbb{K}.\end{aligned} \tag{3}$$

を，$\mathbb{K}$ が $\mathbb{S}^n_+$ の場合は半正定値最適化問題（以後 SDP），$\mathbb{K}$ が $\mathbb{C}$ の場合を共正値最適化問題（以後 CP），$\mathbb{K}$ が $\mathbb{C}^*$ の場合を完全正値最適化問題（以後 CPP）と呼びます．ただある行列が共正値かまたは完全正値かを判断すること自体多項式のオーダーで解けないので一般的に CP，CPP は NP 困難な問題です．最近になって多くの NP 困難な問題がこれらの問題に帰着されることが証明され，この分野の論文が急増しているようです．また $\mathbb{K}$ が $(\mathbb{S}^n_+ \cap \mathbb{N})$ のとき，非負半正定値最適化問題（Doubly Non Negative 問題：以後 DNN）と呼びます．DNN は SDP に変換でき SDP は多項式のオーダーで解けるので，その包含関係から CPP のタイトな緩和問題として数値計算のために使われます．

4. 非凸 2 次計画問題

さて，この一連の研究はたまたま私が思いついたあることがきっかけでした．それは許容領域が有界な線形制約非凸 2 次計画とある CPP 緩和問題が同じ大域最適値を持つことの別証明です．中身は簡単で一連の研究で使われるいくつかのポイントが含まれていると思うのでこの証明について説明します．許容領域が有界な場合の非凸 2 次計画は $e = (1, \ldots, 1)$ とすると

$$\begin{aligned}\text{min.} \quad & x^T \bar{Q} x + 2c^T x\\ \text{sub. to} \quad & e^T x = 1,\ Ax = 0,\ x \in \mathbb{R}^n_+.\end{aligned} \tag{4}$$

と書けます．カーマーカーの内点法の証明でこの形の

線形制約が使われたことを聞いたことが最初の突破口になりました．制約式を 1 本の非同次式とそのほかをすべて同次式の形で書くことが一つの重要なポイントになります．ここで，$x \geq 0$ では $e^T x = 1$ を 2 乗しても同値，またゼロベクトルであることとノルムがゼロは同値なので $Ax = 0$ のノルムの 2 乗をとります．$Q = \bar{Q} + ce^T + ec^T$ とすると，問題 (4) は

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & Q \bullet xx^T \\ \text{sub. to} & ee^T \bullet xx^T = 1,\ A^T A \bullet xx^T = 0, \\ & x \in \mathbb{R}^n_+. \end{array}$$

と同値です．次に制約に $X = xx^T$ を加え $E = ee^T$ とすると，問題 (4) は

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & Q \bullet X \\ \text{sub. to} & E \bullet X = 1,\ A^T A \bullet X = 0, \\ & X = xx^T,\ x \in \mathbb{R}^n_+. \end{array} \tag{5}$$

と書き換えられます．ここで $X = xx^T$, $x \in \mathbb{R}^n_+$ を $X \in \mathbb{C}^*$ に置き換えた CPP を

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & Q \bullet X \\ \text{sub. to} & E \bullet X = 1,\ A^T A \bullet X = 0, \\ & X \in \mathbb{C}^*. \end{array} \tag{6}$$

とします．(5) の目的関数は線形なので下記のように制約領域の凸包をとっても最適値は変わりません．

$$\text{conv} \left\{ X : \begin{array}{l} E \bullet xx^T = 1,\ A^T A \bullet xx^T = 0 \\ X = xx^T,\ x \in \mathbb{R}^n_+ \end{array} \right\} \tag{7}$$

また，(6) の制約領域は

$$\begin{array}{l} \text{conv}\,\{X : E \bullet X = 1,\ A^T A \bullet X = 0\} \\ \cap\, \text{conv}\,\{X : X = xx^T,\ x \in \mathbb{R}^n_+\} \end{array} \tag{8}$$

と書けます．これらの集合は前述した (1) の関係になっているので，問題 (6) は問題 (5) の緩和問題ですが，実はこれらの集合は一致することが示せます．そのために (1) の逆の包含関係を証明します．$\bar{X} \in (8)$ とすると，$\bar{X}$ はいくつかの非ゼロ $\bar{x}_j$ が存在して

$$\begin{array}{l} \bar{X} = \sum_{j=1}^r \bar{x}_j \bar{x}_j^T,\quad \bar{x}_j \in \mathbb{R}^n_+, \\ E \bullet \bar{X} = 1,\quad A^T A \bullet \bar{X} = 0. \end{array} \tag{9}$$

となっています．ここで $E \bullet \bar{x}_j \bar{x}_j^T > 0$ なので，$\lambda_j = E \bullet \bar{x}_j \bar{x}_j^T$ とし $y_j = \bar{x}_j / \sqrt{\lambda_j}$ とすると

$$\sum_{j=1}^r \lambda_j y_j y_j^T = \bar{X},\quad \sum_{j=1}^r \lambda_j = 1,\ \lambda_j \geq 0.$$

なので，$y_j y_j^T$ で $\bar{X}$ を張っていることがわかります．また各 $y_j y_j^T$ は，

$$\begin{aligned} E \bullet y_j y_j^T &= E \bullet \bar{x}_j \bar{x}_j^T / \lambda_j \\ &= E \bullet \bar{x}_j \bar{x}_j^T / E \bullet \bar{x}_j \bar{x}_j^T = 1 \end{aligned}$$

なので，すべて $E \bullet X = 1$ の平面に乗っています．これは $\bar{x}_j \bar{x}_j^T$ の長さを λ_j で調整して $E \bullet X = 1$ の平面に乗せたということです．ここですべての $y_j y_j^T$ がもし $A^T A \bullet X = 0$ の平面にも乗っていれば $\bar{X} = \sum_{j=1}^r \lambda_j y_j y_j^T$ は許容領域 (7) に含まれることになり，結局許容領域 (7) と (8) は一致することになります．ここで，

$$A^T A \bullet \bar{X} = \sum_{j=1}^r \lambda_j A^T A \bullet y_j y_j^T = 0$$

です．足してゼロで，すべての j について $\lambda_j A^T A \bullet y_j y_j^T \geq 0$ なので，前述した単純な事実 (2) より結局すべての j について $A^T A \bullet y_j y_j^T = 0$ となっていることがわかります．（幾何的には平面上の点をいくつかの点で張っているとき，それらの点がすべて平面の片側にあれば，それらの点はすべて平面上にあるということです．）よって問題 (4) と (6) は全く同じ大域最適解をもつことになります．このことは S. Burer の論文の非常に簡単なケースの別証明になります．

この話をきっかけに，小島先生を中心にいかにこの話が拡張されていったかを，発表された一連の論文でこの後説明します．

5. 一般 2 次最適化問題への拡張

前述の議論を見るとわざわざ線形制約を 2 次制約に変換しています．また証明の過程を見れば，同次式の制約式で使われている行列は共正値行列であればいいことがわかります．このようなことから最初の論文 [1] では，より一般的な下記の 2 次制約 2 次最適化問題（以降 QOP）に話を拡張します．目的関数は単純な 2 次形式で，制約式は 1 本の 2 次形式の非同次式と，複数の 2 次の同次式からなっています．

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & x^T Q x \\ \text{sub. to} & x^T H_0 x = 1,\ x \in \mathbb{R}^n_+, \\ & x^T H_k x = 0\ (k = 1, 2, \ldots, p). \end{array} \tag{10}$$

前述の非凸２次計画 (4) は $H_0 = E$, $H_1 = A^TA$ と置いた特殊ケースになっています．ここでもし同次式制約の H_k がすべて共正値行列，すなわちすべての $x \in \mathbb{R}^n_+$ について $x^T H_k x \geq 0$ だとすると，またあの単純な事実 (2) の議論から，$x \in \mathbb{R}^n_+$ で

$$x^T H_k x = 0 \ (k = 1, 2, \ldots, p) \Longleftrightarrow \sum_{k=1}^{p} x^T H_k x = 0$$

なので同次式制約は $G = \sum_{k=1}^{p} H_k$ としたとき $G \bullet xx^T = 0$ の１本にまとめることができます．そのとき $H = H_0$ とおくと問題 (10) は

$$\begin{array}{lll} \text{min.} & Q \bullet X & \\ \text{sub. to} & H \bullet X = 1, \ G \bullet X = 0, & (11) \\ & X = xx^T, \ x \in \mathbb{R}^n_+. & \end{array}$$

となります．そこで対応する CPP 緩和を

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & Q \bullet X \\ \text{sub. to} & H \bullet X = 1, \ G \bullet X = 0, \ X \in \mathbb{C}^*. \end{array} \quad (12)$$

とします．非凸２次計画 (4) での議論では，非ゼロな $x \in \mathbb{R}^n_+$ について非同次制約の行列 H が常に $x^T H x > 0$ を満たすことが必要でした．理由は後でわかりますが，この条件を共正値行列に緩めることを考えます．（このことは許容領域を非有界な場合に拡張することになります．）そこで次の集合を定義します．

$$A^{\infty} = \left\{ dd^T : \begin{array}{l} \exists(\mu_r, x_r x_r^T) \in \mathbb{R}_+ \times A \ (r = 1, 2, \ldots) \\ \text{s.t.} \ (\mu_r, \mu_r x_r x_r^T) \to (0, dd^T) \\ \text{as} \ r \to \infty \end{array} \right\}$$

そしてこの論文 [1] の結論は，問題 (10) の許容領域を $\widetilde{F}$ とすると，

(A′) H_i がすべて共正値行列 $(i = 0, 1, \ldots, p)$

(D) $\widetilde{F}^{\infty} = \left\{ dd^T : \begin{array}{l} H_i \bullet dd^T = 0, \ d \in \mathbb{R}^n_+ \\ (i = 0, 1, \ldots, p). \end{array} \right\}$

の２つの条件を満たせば $\text{conv}\,\widetilde{F}$ と問題 (12) の許容領域は一致するということです．目的関数が同一の線形関数なので，結局問題 (10) と (12) は同じ大域最適解を持つことになります．(D) の条件は非有界な場合を包含するために非常に緩い条件になっていますが，許容領域が有界な場合は

$$(D') \ \{0\} = \left\{ dd^T : \begin{array}{l} H_i \bullet dd^T = 0, \ d \in \mathbb{R}^n_+ \\ (i = 0, 1, \ldots, p). \end{array} \right\}$$

で置き換えることができます．

さて，問題 (10) はかなり特殊な QOP に見えますが，実は一般のすべての QOP が問題 (10) の形に変換できます．最も一般的な QOP は

$$\begin{array}{lll} \text{min.} & u^T Q_0 u + 2c_0^T u + \gamma_0 & \\ \text{sub. to} & u^T Q_k u + 2c_k^T u + \gamma_k = 0, & (13) \\ & (k = 1, 2, \ldots, p), \ u \in \mathbb{R}^{n-1}_+. & \end{array}$$

と書けますが，変数 u_0 を追加して，

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & u^T Q_0 u + 2u_0 c_0^T u + \gamma_0 u_0^2 \\ \text{sub. to} & u^T Q_k u + 2u_0 c_k^T u + \gamma_k u_0^2 = 0, \\ & (k = 1, 2, \ldots, p), \ u_0^2 = 1, \ (u_0, u) \in \mathbb{R}^n_+. \end{array}$$

と書き換えても同値です．ここで，

$$Q = \begin{pmatrix} \gamma_0 & c_0^T \\ c_0 & Q_0 \end{pmatrix} \in \mathbb{S}^n, \ H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & O \end{pmatrix} \in \mathbb{S}^n,$$

$$H_k = \begin{pmatrix} \gamma_k & c_k^T \\ c_k & Q_k \end{pmatrix} \in \mathbb{S}^n \ (k = 1, \ldots, p), \ x = (u_0, u)$$

と定義すると一般の問題 (13) は問題 (10) に書き換えられることがわかります．このためにも H_0 を共正値行列に緩めることが必要でした．

実際の論文 [1] の中ではもう少し一般化された話をしています．一つは，今までの議論では同次式制約の H_k がすべて共正値行列であることを仮定しましたが，階層構造を導入することでこの条件を緩められることを示しています．今のところこれを適用できる具体的なアプリケーションが見つからないのでご存知の方がいたら教えていただければと思います．またもう一つは，$\mathbb{R}^n_+$ を一般の閉錐 $\mathbb{K}$（凸である必要ない）に置き換えることができるので，一般化した $\mathbb{K}$ 上で議論しています．

6. 0-1 混合整数線形制約２次最適化問題

次の論文 [2] は前述の結果を下記 0-1 混合整数線形制約２次最適化問題（以降 MIQP）へ理論的に応用したものになっています．

$$\begin{array}{lll} \text{min.} & u^T Q_0 u + 2c^T u & \\ \text{sub. to} & u \in \mathbb{R}^{n-1}_+, \ Au + b = 0, & (14) \\ & u_i \in \{0, 1\} \ (i = 1, 2, \ldots, r). & \end{array}$$

各 0-1 変数 u_i にスラック変数 $u_{i+r} \geq 0$ を導入すると，0-1 条件は $u_i + u_{i+r} = 1$ かつ $u_i u_{i+r} = 0$ と表せるので，$u_i + u_{i+r} = 1$ が元々 $Au + b = 0$ の線形制約式に含まれていたとすると，問題 (14) は

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & u^TQ_0u+2c^Tu \\ \text{sub. to} & u\in\mathbb{R}^{n-1}_+,\ Au+b=0, \\ & u_iu_{i+r}=0\ (i=1,2,\ldots,r). \end{array}$$

と書けます．非凸2次計画 (4) のときと同様線形制約のノルムの2乗をとります．ノルムは非負でまた相補性条件も左辺が非負な同次式なことから，

$$g(u)=(Au+b)^T(Au+b)+\textstyle\sum_{i=1}^r u_iu_{i+r} \quad (15)$$

とすると，元の MIQP はまた単純な事実 (2) を使って

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & u^TQ_0u+2c^Tu \\ \text{sub. to} & g(u)=0,\ u\in\mathbb{R}^{n-1}_+ \end{array} \quad (16)$$

となり，たった1本の2次制約式下の2次最適化問題になります．以前と同様に追加の変数 u_0 を導入し，

$$Q=\begin{pmatrix} 0 & c_0^T \\ c_0 & Q_0 \end{pmatrix}\in\mathbb{S}^n,\ H\ =\ \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & O \end{pmatrix}\in\mathbb{S}^n$$

とします．$x=(u_0,u)\in\mathbb{R}^n_+$ として行列 G を下記を満たすように作ります．

$$G\bullet xx^T=(Au+u_0b)^T(Au+u_0b)+\textstyle\sum_{i=1}^r u_iu_{i+r}$$

すると MIQP(14) は

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & Q\bullet xx^T \\ \text{sub. to} & H\bullet xx^T=1,\ G\bullet xx^T=0,\ x\in\mathbb{R}^n_+ \end{array}$$

とも書け，この CPP 緩和は以下のようにたった2本の線形制約を持った CPP 問題になります．

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & Q\bullet X \\ \text{sub. to} & H\bullet X=1,\ G\bullet X=0,\ X\in\mathbb{C}^*. \end{array} \quad (17)$$

上記の問題は前の論文で説明した条件 (A′) を明らかに満たしています．また相補性条件の付いた変数は有界で，そのほかの変数の制約は線形なので (D) の条件も満たしていることがわかります．よって CPP 緩和問題 (17) は元の問題 (14) および (16) と全く同じ大域最適値を持つことがわかります．この問題 (17) の双対問題は

$$\begin{array}{ll} \text{max.} & y_0 \\ \text{sub. to} & Q-y_0H+y_1G\in\mathbb{C} \end{array} \quad (18)$$

となり，変数がたった2つの最適化問題です．この論文 [2] の1つの結果は，問題 (17) の最適解が有界な場合は，主問題 (17) と双対問題 (18) の間に強双対定理が成り立つということです．よってその場合は問題 (18) も元の問題 (14) と同じ大域最適値 ζ^* を持ちます．

ただし論文 [2] では一般的には最適解で y_1 が無限大に発散することも示してます．このことを考慮して次にラグランジュ緩和を考えます．ラグランジュ関数 $f(u,\lambda)=u^TQ_0u+2c^Tu+\lambda g(u),(\lambda>0)$ を導入し

$$\text{min.}\ f(u,\lambda)\quad \text{sub. to}\ u\in\mathbb{R}^{n-1}_+ \quad (19)$$

という問題 (16) のラグランジュ緩和問題を考えます．この問題は非負象限上で制約なしの非常に単純な2次最適化問題になっています．この問題の CPP 緩和は前述の Q,H_0,H_1 の定義をそのまま利用できて下記のように書くことができます．

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & (Q+\lambda G)\bullet X \\ \text{sub. to} & H\bullet X=1,\ X\in\mathbb{C}^* \end{array} \quad (20)$$

またこの問題の双対問題は

$$\begin{array}{ll} \text{max.} & y_0 \\ \text{sub. to} & Q-y_0H+\lambda G\in\mathbb{C} \end{array} \quad (21)$$

と書け，λ を固定すると問題 (20) は制約式1本，問題 (21) は1変数の単純な最適化問題になります．ここで λ に依存した問題 (19)，(20)，(21) の最適値を，$\zeta(\lambda)$，$\eta(\lambda)$，$\eta^d(\lambda)$ とします．論文 [2] では，最適解が有界ならば，$\lambda\to\infty$ のとき，$\zeta(\lambda)=\eta(\lambda)=\eta^d(\lambda)$ が単調に ζ^* に収束することを証明しています．

まとめると，元の問題 (14) は，非常に単純な形をした3つの同値な問題 (16)，(17)，(18) と3つのラグランジュ緩和問題 (19)，(20)，(21) に変換できることを示しました．これらのどれかに単純性を生かしたアルゴリズムが開発されることが期待されます．

7. 多項式最適化問題への拡張

次に論文 [1] のアイディアを多項式最適化問題まで拡張できることを示した論文 [3] の概要を説明します．

論文 [1] では，QOP(11) はある条件下で CPP 緩和 (12) と同じ大域最適値を持つことを示しました．そこでは元の n 次元ベクトル空間の問題を $n\times n$ 対称行列の空間に移して議論をしました．逆に $n\times n$ 対称行列の空間は $n(n+1)/2$ 次元のベクトル空間と同等と考えられます．そこで，対称行列 A の右上三角部分の成分を左から右，上から下へ一列に並べたベクトルを $y\in\mathbb{R}^{n(n+1)/2}$ とします．即ち A の $i\le j$ の成分を $y_k=A_{ij}$ とすると，k,i,j の間には

$$k=(i-1)(2n-i)/2+j \tag{22}$$

の関係が成り立ちます．今もし $i=j$ なら，新たに $\bar{Q}_k=Q_{ij}$，$\bar{H}_k=H_{ij}$，$\bar{G}_k=G_{ij}$ また $i\neq j$ なら，$\bar{Q}_k=2Q_{ij}$，$\bar{H}_k=2H_{ij}$，$\bar{G}_k=2G_{ij}$ とします．これらを使って n 次元ベクトル空間の問題として元の問題 (11) を成分ごとに書き下すと，k,i,j の関係 (22) から

$$\begin{aligned}
\text{min.}\quad & \sum_{i=1}^{n}\sum_{j\geq i}^{n}\bar{Q}_k x_i x_j \\
\text{sub. to}\quad & \sum_{i=1}^{n}\sum_{j\geq i}^{n}\bar{H}_k x_i x_j=1,\ \sum_{i=1}^{n}\sum_{j\geq i}^{n}\bar{G}_k x_i x_j=0, \\
& x_i,x_j\geq 0\ (x\in\mathbb{R}^n_+).
\end{aligned}$$

となります．これに対応する CPP 緩和問題 (12) を $n(n+1)/2=m$ 次元ベクトル空間の問題として成分ごとに書き下すと

$$\begin{aligned}
\text{min.}\quad & \sum_{k=1}^{m}\bar{Q}_k y_k \\
\text{sub. to}\quad & \sum_{k=1}^{m}\bar{H}_k y_k=1,\ \sum_{k=1}^{m}\bar{G}_k y_k=0, \\
& y\in\mathbb{K}\subset\mathbb{R}^m.
\end{aligned}$$

となります．錐 $\mathbb{K}$（ここでは完全正値錐と同等）は

$$\mathbb{K}=\text{conv}\left\{y\in\mathbb{R}^m:\ \begin{array}{l} y_k=x_ix_j,\ x_i,x_j\geq 0 \\ i\leq j\ (k=1,2,\ldots,m)\end{array}\right\}$$

と表すことができます．ここでまず QOP のほうを見ると，目的関数，制約式は m 個の 2 次単項式の線形結合になっています．一方 CPP の方はその一つの 2 次単項式に一つの変数を対応させた線形式になっています．

一般の任意の多項式も複数の単項式の線形結合です．実は 3 番目の論文 [3] では上記の 2 次単項式を任意の次数の同次単項式に拡張しても今までと同様な議論ができることを示しています．そこで次の多項式最適化問題を考えます．

$$\begin{aligned}
\text{min.}\quad & \psi(x) \\
\text{sub. to}\quad & h(x)=1,\ g(x)=0,\ x\in\mathbb{R}^n_+.
\end{aligned} \tag{23}$$

ここで $\psi(x)$，$h(x)$，$g(x)$ はすべて次数 τ の同次多項式とします．すなわち下記の性質を持つと仮定します．

$$f(\lambda x)=\lambda^\tau f(x) \text{ for every } x\in\mathbb{R}^n \text{ and } \lambda\in\mathbb{R}$$

次にいくつか多項式特有の表記法を導入します．n 次元非負整数ベクトルの集合を $\mathbb{Z}^n_+$ として，まず単項式 $x_1^{\alpha_1}x_2^{\alpha_2}\cdots x_n^{\alpha_n}$ は，$\alpha=(\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_n)\in\mathbb{Z}^n_+$ を使い x^α と表します．ある単項式の次数が τ だということは $\sum_{i=1}^n\alpha_i=\tau$ ということです．今問題 (23) に登場する単項式の種類が m 個あるとします．単項式はすべて次数 τ でそれに対応する $\alpha\in\mathbb{Z}^n_+$ が m 個あるということです．その α の集合を $\mathcal{H}=\{\alpha^1,\alpha^2,\ldots,\alpha^m\}\subset\mathbb{Z}^n_+$ とします．これら単項式を並べた m 次元列ベクトルを

$$(x^\alpha:\mathcal{H}):=(x^{\alpha^1},x^{\alpha^2},\ldots,x^{\alpha^m})$$

と表すことにします．関数 $\psi(x)$，$h(x)$，$g(x)$ はそれぞれ同次多項式で，上記単項式の線形結合の形になっています．そこで各関数の線形結合の係数で作る m 次元定数列ベクトルをそれぞれ，$(\psi_\alpha:\mathcal{H})$，$(h_\alpha:\mathcal{H})$，$(g_\alpha:\mathcal{H})$ と表します．そうすると各関数は内積の形で

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= (\psi_\alpha:\mathcal{H})^T(x^\alpha:\mathcal{H}) \\
h(x) &= (h_\alpha:\mathcal{H})^T(x^\alpha:\mathcal{H}) \\
g(x) &= (g_\alpha:\mathcal{H})^T(x^\alpha:\mathcal{H})
\end{aligned} \tag{24}$$

と表せます．次に集合 $\mathcal{H}$ に対応する m 次元空間上の

$$\begin{aligned}
\mathbb{M}(\mathcal{H}) &= \text{conv}\,\{y\in\mathbb{R}^m: y=(x^\alpha:\mathcal{H}),\ x\in\mathbb{R}^n_+\} \\
&= \text{conv}\,\{y\in\mathbb{R}^m: y_i=x^\alpha,\ \alpha\in\mathcal{H},\ x\in\mathbb{R}^n_+\}
\end{aligned}$$

で定義されるモーメント錐と呼ばれる錐を考えます．前述した完全正値錐と同等な錐 $\mathbb{K}$ は $\mathbb{M}(\mathcal{H})$ で x^α がすべての 2 次単項式のケースであることがわかります．そこで多項式最適化問題 (23) のモーメント錐緩和問題（モーメント錐上の線形制約線形最適化）を，

$$\begin{aligned}
\text{min.}\quad & (\psi_\alpha:\mathcal{H})^T y \\
\text{sub. to}\quad & (h_\alpha:\mathcal{H})^T y=1,\ (g_\alpha:\mathcal{H})^T y=0, \\
& y\in\mathbb{M}(\mathcal{H})\subset\mathbb{R}^m.
\end{aligned} \tag{25}$$

とします．論文 [3] の主要な結果の一つは，多項式最適化問題 (23) について，その許容領域を $\widetilde{F}$ としたとき，論文 [1] と全く同様なアイディアを使って，

(A′) すべての $x\geq 0$ で $h(x)\geq 0$，$g(x)\geq 0$

(D) $\widetilde{F}^\infty=\{x: h(x)=0,\ g(x)=0,\ x\in\mathbb{R}^n_+\}$

の 2 つの条件を満たせば，多項式最適化問題 (23) とモーメント錐最適化問題 (25) は同じ大域最適解を持つことを証明したことです．ここで重要なポイントは登場するすべての単項式が同じ次数だということで，それにより $\mathbb{M}(\mathcal{H})$ が錐になります．

さて，この多項式最適化問題 (23) は非常に特殊なケースのように思えますが，実は下記の任意の多項式 $\widehat{\psi}(x)$，$\widehat{h}_j(x)$ による一般の多項式最適化問題 (26) はすべて問題 (23) に変換できます．

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & \widehat{\psi}(u) \\ \text{sub. to} & \widehat{h}_j(u) = 0 \ (j = 1, \ldots, p), \ u \in \mathbb{R}^n_+. \end{array} \tag{26}$$

まず $(\widehat{h}_j(u))^2$ は常に非負なのですべての $u \in \mathbb{R}^n_+$ に対して $\widehat{h}_j(u) \geq 0$ を仮定しても一般性を失いません．そこでまたあの単純な事実 (2) より制約式は $\widehat{g}(u) = \sum_{j=1}^m \widehat{h}_j(u) = 0$ とまとめることができます．次にこの問題に登場する単項式の中で最大の次数を τ とします．新たに変数 u_0 を導入し，目的関数，制約式の各単項式に必要なだけ u_0 を掛けて，すべての単項式の次数を τ に合わせれば，登場するすべての多項式を全く同じ次数の同次式に変換できます．$\widehat{h}(u) = u_0^\tau = 1$ を制約式に追加します．$x = (u_0, u)$ として，上記調整した関数を新たに $\psi(x)$，$h(x)$，$g(x)$ とすれば，一般の多項式最適化問題 (26) はすべて問題 (23) の形に変換できました．そしてこのような変換後はすでに条件 (A′) を満たしていることがわかります．よってもし元の問題 (23) が条件 (D) を満たせば，対応するモーメント錐上の線形最適化問題 (25) は同じ大域最適解を持つわけです．

ここで問題 (23) を具体的な例で見てみます．次の変数が 3 つで多項式の種類も 3 つという実用上は意味のない都合のいい場合を考えます．

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & x_1^2 x_2 - 2x_2^2 x_3 - 3x_1 x_3^2 \\ \text{sub. to} & x_1^2 x_2 + x_2^2 x_3 + x_1 x_3^2 = 1, \\ & x_1^2 x_2 = 0, \quad x \in R^3_+. \end{array} \tag{27}$$

ここで $\mathcal{H} = \{(2,1,0), (0,2,1), (1,0,2)\}$ で，

$$\begin{aligned} (\psi_\alpha : \mathcal{H})^T &= (1, -2, -3) \\ (h_\alpha : \mathcal{H})^T &= (1, 1, 1) \\ (g_\alpha : \mathcal{H})^T &= (1, 0, 0) \end{aligned}$$

です．これに対応するモーメント錐緩和問題は

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & y_1 - 2y_2 - 3y_3 \\ \text{sub. to} & y_1 + y_2 + y_3 = 1, \\ & y_1 = 0, \ y \in \mathbb{M}(\mathcal{H}). \end{array} \tag{28}$$

となります．ここでこのモーメント錐をじっくり見てみると，$\mathcal{H}$ の 3 つのベクトルは線形独立なことから，すべての $y \in \mathbb{R}^3_+$ について $y \in \mathbb{M}(\mathcal{H})$ を満たす $x \in \mathbb{R}^3_+$ が必ず存在します．ということはこの錐は $\mathbb{R}^3$ 空間の非負象限だということがわかります．よって問題 (28) は通常の線形計画問題になりこれを解けば，非凸計画問題 (27) の大域最適値が求まります．もちろん一般にはこんな都合のいい問題はないでしょう．実際 n 変数で τ 次の単項式の種類の数は n より遥かに大きくなるので，問題 (25) の空間の次元は大きくなり，モーメント錐 $\mathbb{M}(\mathcal{H})$ はその空間の非負象限より小さくなっていくというわけです．これでモーメント錐緩和問題 (25) のイメージが少しつかめたでしょうか．

実際の論文では，この大域最適値の同値性の証明の後，実際に下界を求める数値解法を提案しています．それは，多項式最適化問題の次数 τ を偶数に調整して単項式の 2 次形式に変換し，それを DNN 緩和問題として，疎性を利用した内点法で下限値を求める方法です．また先行研究としての Lasserre の SDP 緩和や非同次式モデルとの比較を議論しています．

8. おわりに

この 3 つの論文の後小島先生のグループはいくつかの典型的な組み合わせ問題に対して，論文 [2] で取り上げたラグランジュ緩和の双対問題 (21) を適用して数値実験を行っています．その単純な構造を利用したあるアルゴリズムを使い，一部の問題に対してかなり効率的な結果が出ているようです．また，今までの議論を統合し，任意の錐上での線形最適化 (conic programming) 緩和とそのラグランジュ緩和およびその双対性の枠組みを統一的に扱うことを考えられています．ということで，最適化問題の制約式を同次式の枠組みで考え錐上の線形最適化問題を対応させる研究は，実用的な解法についても理論的な考察についてもこれからまだまだ面白い展開があるような気がしています．

私の個人的な興味としてはいろいろあるのですが，何よりも知りたいのは完全正値錐 (CPP) と非負半正定値錐 (DNN) との違いです．DNN 問題が多項式オーダーで解けるのになぜ CPP 問題は多項式オーダーで解けないのか，5×5 行列以上（15 次元空間以上）でないと差が出ないので想像がつきません．この疑問に対して関根先生式に「要するにそうゆうことか」というわかり方ができれば，新世代としては早いですが第 2 の引退でもいいかなと．

参考文献

[1] N. Arima, S. Kim and M. Kojima, A quadratically constrained quadratic optimization model for completely positive cone programming, *SIAM Journal of Optimization*, **23**(4), 2320–2340, 2013.

[2] N. Arima, S. Kim and M. Kojima, Simplified copositive and Lagrangian relaxations for linearly constrained QOPs in continuous and binary variables. Technical Report B-469, Department of Mathematical and Computing, Sciences, Tokyo Institute of Technology, October, 2012.

[3] N. Arima, S. Kim and M. Kojima, Extension of completely positive cone relaxation to polynomial optimization. Technical Report B-471, Department of Mathematical and Computing Sciences, Tokyo Institute of Technology, Feburuary, 2013.
[4] S. Burer, On the copositive representation of binary and continuous non-convex quadratic programs, *Mathematical Programing*, **120**, 479–495, 2009.

