大域的最適化が面白い
—Lagrange緩和からPutinarの補題へ—

小島　政和

本稿では数理最適化の手法として広く使われている Lagrange 緩和から始めて多項式最適化問題の大域最適化の基礎を築いている理論を概説する.

キーワード：大域最適化，多項式最適化問題，Lagrange 緩和

1. はじめに

ときどき真っ暗な教室を思い出します．スクリーンのついた特別な教室で，オーバーヘッドプロジェクターを使ってシンプレックス法を習ったときのことです．当時（47 年前）としては最新鋭の機種だったようですが，真っ暗にしないと手書きのシンプレックス表がスクリーンに映りません．でも，多くの学生（私も含めて）は寝てしまい，シンプレックス法は身につきませんでした．救ってくれたのは真鍋龍太郎さん（当時助手，慶応では教員を“さん”付けで呼ぶのが習わし）でした．ガリ版（謄写版）刷りの穴埋め方式の教材を使って，中学生でもわかるように，丁寧にシンプレックス法の演習をしていただきました．たぶん，これが最適化を研究の対象として選んだきっかけだと思っています．

数理最適化の魅力はその幅の広さにあります．「さまざまな条件（有限な資源）の下で与えられた目的を最もよく達成する」はあらゆる分野に共通する普遍的な原理の 1 つでしょう．そのための科学を担っているのが数理最適化と言えます．数学とコンピュータを道具として使います．私はその絶妙のバランスが気に入っています．数学好きの若者はともすると不必要に数学の奥へ奥へと進みがちですが，数理最適化の最終生産物はソフトウェアです．考案したアルゴリズムが動いたときの喜びは格別です．また，計算実験がさらなる理論の発展に結びついたことはしばしば体験しています．

数理最適化問題は，大雑把に，凸性を満たす問題とそれ以外に分かれます．前者は（制約条件と目的関数が数値的に処理可能な場合には）局所的最適化を繰り返すことで大域的最適解に到達できるやさしい問題です．特殊な場合を除いて，後者の大域的最適解を計算することには困難が伴います．「凸性を超えて大域的最適化で何ができるか」は数理最適化の大きな課題です．本稿では後者の代表選手として多項式最適化問題を扱います．この問題に限定しても応用上重要なさまざまな問題を含みます．また，深遠な代数学の成果を使うことができます．その一つが，表題にあげた Putinar の補題 [1] です．

多項式最適化問題の大域的最適化は 2001 年に発表された Lasserre の論文 [2] を契機としています．それまでの最適化手法の常識を超えた画期的なものでした．しかしながら，数学としての本質は 1993 年に発表された Putinar の補題ですでにわかっていたとも言えます．他方，数年前から，有馬直彦さん（ビジネスの世界から定年退職を機に研究生活を再開した慶応大学・大学院時代の友人）との老人ペアで非凸 2 次最適化問題に対する完全正値緩和の研究を始めました [3]．この緩和は理論的には非常に強力で，あるクラスの非凸 2 次最適化問題に対してはそれと等価な完全正値緩和問題（凸錐上の線形計画の一種だが実用上は解けない）を導出します．

より最近になって有馬さんらと多項式最適化問題に対する完全正値緩和への拡張を含む統一的な枠組み，およびこの枠組への Lasserre の方法の取り込みを提案しました．それを本稿で解説しようかと目論んだのですが，(a) 計算効率よく，かつ，安定した数値解法の構築に至っていない，(b) 専門的すぎて一般の読者にはなじまないなどの理由で断念しました．それに代わって，多項式最適化問題の大域的最適化の基礎を支える Putinar の補題と Lasserre の方法をなるべくやさしく解説することにしました．理工系の学部 3 年程度の知

こじま　まさかず
東京工業大学名誉教授
〒 152–8552 東京都目黒区大岡山 2–12–1

識で無理なく読めるように配慮したつもりです．大域的最適化に多くの人に興味を持っていただくきっかけになれば幸いです．

2. 最適化問題

n-次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ で定義された**目的関数**（実数値関数）f_0 を $\mathbb{R}^n$ の部分集合 S（**許容集合**）上で最小化する一般の最適化問題を

$$\zeta^* = \inf \{ f_0(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{x} \in S \} \tag{1}$$

と記述する．ζ^* を**最適値**，ζ^* を達成する $\boldsymbol{x}^* \in S$ を**最適解**と呼ぶ．S が空集合の場合には，$\zeta^* = +\infty$ と定義する．S 内の $\boldsymbol{x}$ で $f_0(\boldsymbol{x})$ をいくらでも小さくできる場合には $\zeta^* = -\infty$ となる．これら 2 つの場合には最適解は存在しない．また，$\zeta^* > -\infty$ の場合でも最適解が存在するとは限らない．例えば，$f_0(x_1, x_2) = x_1$, $S = \{(x_1, x_2) \geq \mathbf{0} : x_1 x_2 = 1\}$.

局所最適解 $\boldsymbol{x}^* \in S$，すなわち，$\boldsymbol{x}^* \in S$ のある近傍 U が存在して，条件

$$f_0(\boldsymbol{x}^*) \leq f_0(\boldsymbol{x}) \text{ for all } \boldsymbol{x} \in S \cap U$$

を満たす $\boldsymbol{x}^* \in S$ と大域的最適解（上の条件において $U = \mathbb{R}^n$ である場合）を区別する．最適化問題は目的関数 f_0 が凸関数で許容集合 S が凸集合である凸最適化問題とそうでない非凸最適化問題に分類される．前者では局所的最適解が必ず大域的最適解になる．この場合，任意の初期点 $\boldsymbol{x}^0 \in S$ から目的関数を局所的に小さくなる方向に S 内を進めば大域的最適化解に到達できる．理論的にも双対問題が定義され，そこから得られる有用な情報が数値解法にも有効に利用されている．実際，連続最適化問題に関する多くの方法は凸最適化問題を対象として設計されており，それらを非凸最適化問題の局所最適解を求めるのに流用している．一般に大域的最適解を求めるのは難しい問題で，多くの問題では局所最適解の近似計算で我慢せざるをえない．1 節で述べたように「凸性を超えて何ができるか」は最適化分野での大きな課題である．

許容集合 S は不等式と等式で表現されることが多い．ここでは，S が m 本の不等式で表されている最適化問題を考える．すなわち，

$$S = \{ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0 \ (j = 1, \ldots, m) \}$$

と仮定する．ただし，f_j は $\mathbb{R}^n$ で定義された任意の実数値関数．等式条件 $h(\boldsymbol{x}) = 0$ を 2 つの不等式条件 $h(\boldsymbol{x}) \geq 0$ と $-h(\boldsymbol{x}) \geq 0$ に分解して S に含めることもできる．

許容集合 S を記述する関数 f_j $(j = 0, 1, \ldots, m)$ がすべて（多変数）多項式であるとき，(1) を**多項式最適化問題**と呼ぶ．さらに，すべての多項式 $f_j(\boldsymbol{x})$ $(j = 0, 1, \ldots, m)$ の次数が 2 以下であるとき，**2 次最適化問題**と呼ぶ．例えば，

$$\begin{aligned}
f_0(\boldsymbol{x}) &= x_1^3 - 2x_1x_2^2 + x_1^2x_2x_3 - 4x_3^2, \\
&\quad \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3, \\
S &= \left\{ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 : \begin{array}{l} -x_1^2 + 5x_2x_3 + 1 \geq 0, \\ x_1^2 - 3x_1x_2x_3 + 2x_3 + 2 \geq 0, \\ x_1(x_1 - 1) = 0 \ (\text{0-1 条件}), \\ x_2x_3 = 0 \ (\text{相補性条件}) \end{array} \right\}
\end{aligned}$$

で与えられる問題は 3 変数の多項式最適化問題である．この例のように，0-1 条件および相補性条件を含めることにより，多くの組合せ最適化問題を多項式最適化問題に定式化することができる．

3. Lagrange 双対問題

一般の最適化問題 (1) に対する **Lagrange 関数**は，

$$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f_0(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^{m} \lambda_j f_j(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \ \boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \ldots, \lambda_m) \in \mathbb{R}^m_+$$

で定義される．ただし，

$$\mathbb{R}^m_+ = \{ \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m : \lambda_j \geq 0 \ (j = 1, \ldots, m) \}$$

は $\mathbb{R}^m$ の非負象限である．**Lagrange 乗数** $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m_+$ を 1 つ選んで固定して，$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda})$ を変数 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に関して最小化する問題

$$\eta(\boldsymbol{\lambda}) = \inf_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \tag{2}$$

は，(1) の **Lagrange 緩和問題**と呼ばれる．任意の **Lagrange 乗数** $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m_+$ と任意の許容解 $\boldsymbol{x} \in S$ に対して，

$$\begin{aligned}
&0 \leq \lambda_j f_j(\boldsymbol{x}) \ (j = 1, \ldots, m), \\
&L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f_0(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^{m} \lambda_j f_j(\boldsymbol{x}) \leq f_0(\boldsymbol{x})
\end{aligned}$$

が成り立つことより，任意の $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m_+$ に対して，

$$\eta(\boldsymbol{\lambda}) = \inf_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \leq \inf_{\boldsymbol{x} \in S} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \leq \zeta^*$$

であることがわかる．すなわち，Lagrange 緩和問題の最適値 $\eta(\boldsymbol{\lambda})$ は (1) の最適値 ζ^* の下界になる．

(1) の最適値 ζ^* の下界 $\eta(\boldsymbol{\lambda})$ は $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m_+$ の選び方に

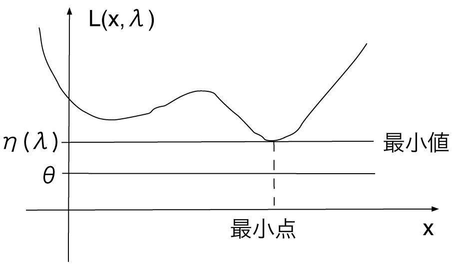

図 1　Lagrange 緩和問題（$\lambda \in \mathbb{R}^m_+$ は固定）の変形．不等式 $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) - \theta \geq 0$ がすべての $x \in \mathbb{R}^n$ で成立するような $\theta \in \mathbb{R}$ の上限を求める問題

依存する．最良の下界は **Lagrange 双対問題**

$$\eta^* = \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m_+} \eta(\boldsymbol{\lambda}) = \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m_+} \inf_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \qquad (3)$$

によって与えられる．

5 節での議論のために問題 (3) を少し変形しておこう．内側の Lagrange 緩和問題 $\inf_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda})$ は

$$\eta(\boldsymbol{\lambda}) = \sup_{\theta} \{\theta : L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \geq \theta \ (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n)\}$$

と等価である．ここでは $\boldsymbol{x}$ は変数ではない．図 1 参照．したがって，Lagrange 双対問題 (3) は

$$\eta^* = \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m_+, \theta} \left\{ \theta : \begin{array}{c} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) - \theta \geq 0 \\ (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n) \end{array} \right\} \qquad (4)$$

と変形できる．

4. 簡単な 1 変数多項式最適化問題

この節では，$n = 1$，$m = 2$，

$$\begin{aligned} & f_0(x) = x(x - 20),\ f_1(x) = -x(x - 10), \\ & f_2(x) = -(x - 4)(x - 6)(x - 8), \\ & S = \{x \in \mathbb{R} : f_j(x) \geq 0,\ j = 1, 2\} \end{aligned} \qquad (5)$$

とした多項式最適化問題 (1) について考える．簡単な計算により，S は 2 つの閉区間 $[0, 4]$ と $[6, 8]$ からなり，最適解 $x^* = 8$，最適値 $\zeta^* = -96$ であることがわかる．Lagrange 関数は，

$$\begin{aligned} L(x, \boldsymbol{\lambda}) &= f_0(x) - \lambda_1 f_1(x) - \lambda_2 f_2(x) \\ &= (1 + \lambda_1)x^2 - (10\lambda_1 + 20)x \\ &\quad + \lambda_2(x - 4)(x - 6)(x - 8) \end{aligned}$$

となる．$\lambda_2 > 0$ のときは，$L(x, \boldsymbol{\lambda})$ は $x \in \mathbb{R}$ に関する 3 次関数となるので，$\inf_{x \in \mathbb{R}} L(x, \boldsymbol{\lambda}) = -\infty$．したがって，Lagrange 双対問題 (3) では $\lambda_2 = 0$ に限定して差しつかえない．このとき，$x = (5\lambda_1 + 10)/(1 + \lambda_1)$ で $L(x, \boldsymbol{\lambda})$ の最小値

$$\begin{aligned} \eta(\boldsymbol{\lambda}) &= -(5\lambda_1 + 10)^2/(1 + \lambda_1) \\ &= -100 - 25\lambda_1^2/(1 + \lambda_1) \end{aligned}$$

が達成される．ゆえに，

$$\begin{aligned} \eta^* &= \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^2_+} \eta(\boldsymbol{\lambda}) = \eta((0, 0)) \\ &= \inf_{x \in \mathbb{R}} L(x, (0, 0)) = -100 \end{aligned}$$

であることがわかる．$\eta^* = -100$ は (1) の最適値 $\zeta^* = -96$ の下界になっている。

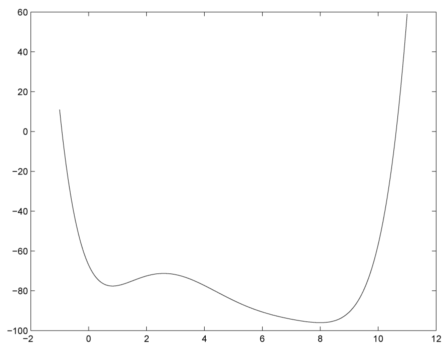

図 2　6 次の拡張 Lagrange 関数．$\lambda_1(x)$ = ある 4 次の非負多項式，$\lambda_2(x)$ = ある 2 次の非負多項式

より良い下界を求めるために，Lagrange 乗数 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^2_+$ を x の非負多項式 $\boldsymbol{\lambda} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^2_+$ に拡張する．すなわち，$L(x, \boldsymbol{\lambda}(x)) = f_0(x) - \lambda_1(x) f_1(x) - \lambda_2(x) f_2(x)$．このような拡張を行っても，Lagrange 緩和問題および双対問題の最適値が (1) の最適値の下界を与えることは保証される．最初に，x の非負多項式の次数は必ず偶数次数であることを注意しておく．例えば，$\lambda_1(x)$ をある 4 次の非負多項式，$\lambda_2(x)$ をある 2 次の非負多項式にとって，拡張 Lagrange 関数を構成すると，図 2 に示されたような 6 次の多項式が得られる．元問題の最小解 $x = 8$ で，拡張 Lagrange 関数が一意的な最小値 -96 を達成しており，元問題と拡張 Lagrange 関数の最小化が等価であることがわかる．そのような $\lambda_1(x)$，$\lambda_2(x)$ は，後述する二乗多項式緩和の解として導出され，それを実装したソフトウェア SparsePOP[4] で計算した．計算方法については 7 節で述べる．

5. 多項式最適化問題に対する拡張 Lagrange 双対問題と二乗和多項式緩和

n 変数の多項式 $f(\boldsymbol{x})$ がすべての $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ で非負の値をとるとき**非負多項式**，また，有限個

の n 変数の多項式 $g_k(\boldsymbol{x})$ $(k=1,\dots,\ell)$ の二乗の和で $f(\boldsymbol{x})=\sum_{k=1}^{\ell} g_j(\boldsymbol{x})^2$ と表現できるとき**二乗和多項式**と呼ぶ．例えば，

$$\begin{aligned}f(\boldsymbol{x})=&3+x_1^2-2x_2^2-6x_1^2x_2+9x_1^2x_2^2+x_2^4\\=&(\sqrt{2})^2+(x_2^2-1)^2+(x_1-3x_1x_2)^2\end{aligned}$$

は 2 変数の二乗和多項式で，次数が 0，2，2 の 3 つの多項式の二乗の和で記述されている．このように，最高次数の単項式は必ず偶数になる（上の例では，x_2^4 と $x_1^2x_2^2$ の次数が 4）．また，明らかに，二乗和多項式は非負多項式であるが，一般に逆は成り立たない．ただし，1 変数の場合には任意の非負多項式は二乗和多項式になっている．

一般に，次数 $2d$ の二乗和多項式 $f(\boldsymbol{x})$ は，次数が d までのすべての単項式を並べた $r=\begin{pmatrix} n+d \\ d \end{pmatrix}$ 次元ベクトル

$$\boldsymbol{u}_d(\boldsymbol{x})=(1,x_1,\dots,x_n,x_1^2,x_1x_2,\dots,x_1^d,\dots,x_n^d)$$

と $r\times r$ 半正定値行列 $\boldsymbol{V}$を用いて$f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{u}_d(\boldsymbol{x})\boldsymbol{V}\boldsymbol{u}_d(\boldsymbol{x})^t$（$\boldsymbol{u}_d(\boldsymbol{x})$ に関する半正定値 2 次形式）で表せる．ただし，t はベクトルの転置を表す．このような $\boldsymbol{V}$ を求めるには，$f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{u}_d(\boldsymbol{x})\boldsymbol{V}\boldsymbol{u}_d(\boldsymbol{x})^t$ の両辺が任意の $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ に関して等しいことから導かれる $\boldsymbol{V}$ の各要素に関する線形方程式を満たす半正定値行列 $\boldsymbol{V}$ を求めればよい．

例えば，上記の 2 変数の二乗和多項式では $\boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x})=(1,x_1,x_2,x_1^2,x_1x_2,x_2^2)$，$\boldsymbol{V}:6\times 6$ 対称行列 として，

$$\begin{aligned}&3+x_1^2-2x_2^2-6x_1^2x_2+9x_1^2x_2^2+x_2^4\\=&\boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x})\boldsymbol{V}\boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x})^t\ (\forall \boldsymbol{x}),\ \boldsymbol{V}:\text{半正定値}\end{aligned}$$

を解けばよい．最初の恒等式両辺の単項式を比較することにより，

$$\begin{aligned}\text{定数項}\Rightarrow&\ 3=V_{11},\\ x_2^2\ \text{の係数}\Rightarrow&\ -2=2V_{16}+V_{33},\\ x_1^2\ \text{の係数}\Rightarrow&\ 1=2V_{14}+V_{22},\\ x_1^2x_2\ \text{の係数}\Rightarrow&\ -6=2(V_{25}+V_{34}),\\ x_1^2x_2^2\ \text{の係数}\Rightarrow&\ 9=V_{55}+2V_{46},\\ x_2^4\ \text{の係数}\Rightarrow&\ 1=V_{66}\\ \text{上記以外の項の係数}\Rightarrow&\ 0=V_{ij}\end{aligned}$$

を得る．これより，$V_{11}=3, V_{16}=V_{61}=-1, V_{22}=1, V_{25}=V_{52}=-3, V_{55}=9, V_{66}=1, V_{ij}=0$（その他）にとればよいことがわかる．

一般に，与えられた多項式が非負多項式であることを検証するのは特別な場合を除いて難しいが，上述したように，任意の二乗和多項式は単項式を並べたベクトル $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ の半正定値 2 次形式 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{V}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})^t$ で構成でき，かつ，与えられた多項式 $f(\boldsymbol{x})$ が二乗和多項式であることを検証するのは，$f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{V}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})^t$ $(\forall\boldsymbol{x})$ なる $r\times r$ 半正定値行列 $\boldsymbol{V}$ の存在に帰着される．一般に，そのような $\boldsymbol{V}$ の存在は半正定値最適化問題（例えば [5] 参照）を解くことによって判定できる．それゆえ，拡張 Lagrange 緩和および拡張 Lagrange 双対問題では，Lagrange 乗数の替わりに二乗和多項式が使われることになる．Σ で**二乗和多項式の集合**を表す．Σ は凸錐となる．すなわち，任意の $f(\boldsymbol{x})$，$g(\boldsymbol{x})\in\Sigma$ と任意の λ，$\mu\geq 0$ に対して，$\lambda f(\boldsymbol{x})+\mu g(\boldsymbol{x})\in\Sigma$ が成り立つ．

拡張 Lagrange 関数

$$\begin{aligned}L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))=&f_0(\boldsymbol{x})-\sum_{j=1}^{m}\lambda_j(\boldsymbol{x})f_j(\boldsymbol{x}),\ \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\\ &\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})=(\lambda_1(\boldsymbol{x}),\dots,\lambda_m(\boldsymbol{x}))\in\Sigma^m\end{aligned}$$

を用いて，拡張双対問題

$$\begin{aligned}&\sup_{\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})\in\Sigma^m}\ \inf_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))\\ =&\sup_{\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})\in\Sigma^m,\theta}\left\{\theta:\ \begin{array}{l}L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))-\theta\geq 0\\ (\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n)\end{array}\right\}\end{aligned}$$

を導入する．後の表現については 3 節の (4) 参照．無限本の不等式条件

$$L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))-\theta\geq 0\ (\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n)$$

は $L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))-\theta$ が $\boldsymbol{x}$ の非負多項式であることを意味する．非負多項式を二乗和多項式に置き換えると多項式最適化問題 (1) の**二乗和多項式緩和**

$$\eta^*=\sup_{\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})\in\Sigma^m,\theta}\{\theta: L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))-\theta\in\Sigma\}\quad(6)$$

を得る．次節で述べる補題により，「許容領域 S が有界」を保証するある条件下で，(6) の最適値が (1) の最適値に一致することがわかる．

6. Putinar の補題

多項式の部分集合 Λ（凸錐）を

$$\Lambda=\left\{\lambda_0(\boldsymbol{x})+\sum_{j=1}^{m}\lambda_j(\boldsymbol{x})f_j(\boldsymbol{x}):\ \begin{array}{l}\lambda_j(\boldsymbol{x})\in\Sigma\\ (j=0,\dots,m)\end{array}\right\}$$

で定義する．

Putinar の補題 [1] (a)「許容領域 S が有界である」を仮定する．このとき，(b)「Λ に属する $p(\boldsymbol{x})$ が存在して集合 $\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n : p(\boldsymbol{x})\geq 0\}$ が有界」は S 上のすべての $\boldsymbol{x}$ で正の値をとる任意の多項式 $f(\boldsymbol{x})$ が Λ に属するための必要十分条件である．

この補題を拡張双対問題 (6) に適用しよう．$\zeta^*\geq\eta^*$ は 4 節の議論よりわかるが，きちんと証明しておく．$\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})$, θ を (6) の許容解とすると

$$f_0(\boldsymbol{x})\geq\sum_{j=1}^m\lambda_j(\boldsymbol{x})f_j(\boldsymbol{x})+\theta\ (\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n).$$

したがって，$f_0(\boldsymbol{x})\geq\theta\ (\forall\boldsymbol{x}\in S)$. ゆえに,

$$\zeta^*{=}\inf\{f_0(\boldsymbol{x}):\boldsymbol{x}\in S\}\geq\eta^*$$

を得る．

逆の不等式を証明するために，条件 (a)，(b) を仮定する．条件 (a) より，(1) は最適解 $\boldsymbol{x}^*$ と最適値 $\zeta^*=f(\boldsymbol{x}^*)$ を持つ．このとき，任意の $\epsilon>0$ に対して，$f_0(\boldsymbol{x})-(\zeta^*-\epsilon)>0\ (\forall\boldsymbol{x}\in S)$ が成り立つ．すなわち，$f_0(\boldsymbol{x})-(\zeta^*-\epsilon)$ は S 上のすべての $\boldsymbol{x}$ で正の値をとる多項式である．Putinar の補題により，$f_0(\boldsymbol{x})-(\zeta^*-\epsilon)\in\Lambda$, すなわち，以下の条件を満たす $\lambda_0(\boldsymbol{x})\in\Sigma$, $\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})=(\lambda_1(\boldsymbol{x})\ldots,\lambda_m(\boldsymbol{x}))\in\Sigma^m$ が存在する．

$$f_0(\boldsymbol{x})-(\zeta^*-\epsilon)=\lambda_0(\boldsymbol{x})+\sum_{j=1}^m\lambda_j(\boldsymbol{x})f_j(\boldsymbol{x}).$$

書き換えると,

$$\begin{aligned}&L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))-(\zeta^*-\epsilon)\\&=f_0(\boldsymbol{x})-\sum_{j=1}^m\lambda_j(\boldsymbol{x})f_j(\boldsymbol{x})-(\zeta^*-\epsilon)\\&=\lambda_0(\boldsymbol{x})\in\Sigma.\end{aligned}$$

これは $\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})$, $\theta=(\zeta^*-\epsilon)$ が二乗和多項式緩和問題 (6) の許容解であることを意味する．ゆえに，$\eta^*\geq\zeta^*-\epsilon$ を得る．$\epsilon>0$ は任意であったから，$\eta^*\geq\zeta^*$ が証明された．

条件 (b) は少しわかりにくいので説明を加える．$p(\boldsymbol{x})\in\Lambda$ と仮定すると，$\lambda_j(\boldsymbol{x})\in\Sigma\ (j=0,\ldots,m)$ が存在して，$p(\boldsymbol{x})=\lambda_0(\boldsymbol{x})+\sum_{j=1}^m\lambda_j(\boldsymbol{x})f_j(\boldsymbol{x})$. したがって,

$$\begin{aligned}&\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n:p(\boldsymbol{x})\geq 0\}\\&=\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n:\lambda_0(\boldsymbol{x})+\sum_{j=1}^m\lambda_j(\boldsymbol{x})f_j(\boldsymbol{x})\geq 0\}\\&\supset\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n:f_j(\boldsymbol{x})\geq 0\ (j=1,\ldots,m)\}=S.\end{aligned}$$

ゆえに，条件 (b) が成り立てば許容領域 S が有界となる．(b) より強い条件としては

(b') ある j に対して，集合 $\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n:f_j(\boldsymbol{x})\geq 0\}$ が有界.

(b") $\lambda_j\geq 0\ (j=1,\ldots,m)$ が存在して集合 $\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n:\sum_{j=1}^m\lambda_jf_j(\boldsymbol{x})\geq 0\}$ が有界.

等が考えられる．理論的には，S が有界であるとすると，$S\subset\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n:\sum_{i=1}^n x_i^2\leq M\}$ なる十分大きな正数 M をとって，不等式 $M-\sum_{i=1}^n x_i^2\geq 0$ を制約条件に加えると条件 (b') が満たされる．また，S が有界な多面体であるときには，(b") が満たされる．

7. 二乗多項式緩和問題 (6) の近似数値解法

二乗多項式緩和問題 (6) の制約条件 $L(x,\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))-\theta\in\Sigma$ は，二乗多項式 $\lambda_k(\boldsymbol{x})\in\Sigma\ (k=0,1,\ldots,m)$ を選んで，恒等式

$$L(x,\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))-\theta=\lambda_0(\boldsymbol{x})\ (\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n)\qquad(7)$$

が成立することを要請している．ただし，$\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x})=(\lambda_1(\boldsymbol{x}),\ldots,\lambda_m(\boldsymbol{x}))$. 最初に，候補となる二乗多項式 $\lambda_k(\boldsymbol{x})\in\Sigma$ の次数（偶数） $2d\ (k=0,1,\ldots,m)$ を以下のように定める．$\lambda_k(\boldsymbol{x})\in\Sigma\ (k=1,\ldots,m)$ の最小次数は 0 である．このとき左辺の $L(x,\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))$ の次数は，多項式 $f_k(\boldsymbol{x})$ の次数 $\omega_k\ (k=0,1,\ldots,m)$ の最大値に一致する．そこで，右辺 $\lambda_0(\boldsymbol{x})$ の次数 $2d_0$ を $2d_0\geq\max_{k=0,1,\ldots,m}\omega_k$ を満たすように定める．この d_0 によって，二乗多項式緩和問題 (6) の有限次元の部分問題 (8) が定まり，その最適値 $\eta(d_0)\leq\eta^*$ を計算することになる．

恒等式 (7) の左辺の $L(x,\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))$ の次数を最大 $2d_0$ にそろえるためには，各 $\lambda_k(\boldsymbol{x})\ (k=1,\ldots,m)$ の次数 $2d_k$ は $\omega_k+2d_k\leq 2d_0$ すなわち $d_k\leq\lfloor d_0-\omega_k/2\rfloor$ を満たす必要がある．ただし，$\lfloor a\rfloor$ は a を超えない最大の整数を表す．そのような d_k の中で二乗多項式緩和 (8) が最も強くなるように最大の $d_k=\lfloor d_0-\omega_k/2\rfloor$ を選ぶ．このように選んだ $d_k\ (k=0,1,\ldots,m)$ に対して，次数が d_k 以下の多項式の有限個の多項式の二乗和で表される多項式の集合を $\Sigma(d_k)\subset\Sigma$ と置いて，二乗多項式緩和問題 (6) の部分問題

$$\eta(d_0)=\sup\left\{\theta:\begin{array}{l}L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}))-\theta=\lambda_0(\boldsymbol{x})\\(\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n),\ \theta\in\mathbb{R},\\\lambda_k(\boldsymbol{x})\in\Sigma(d_k)\\(k=0,1,\ldots,m)\end{array}\right\}\quad(8)$$

を考える．$d_0<d_0'$ ならば $\eta(d_0)\leq\eta(d_0')\leq\eta^*$ であり，条件 (a)，(b) が満たされるときには，Putinar の補題により，$\lim_{d_0\to\infty}\eta(d_0)=\eta^*$ が成立する．

5 節で示したように，各二乗和多項式 $\lambda_k(\boldsymbol{x})\in\Sigma(d_k)$ は次数 d_k 以下の単項式からなる $r_k=\begin{pmatrix}n+d_k\\d_k\end{pmatrix}$ 次元のベクトル $\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{x})$ の半正定値 2 次形式 $\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{x})\boldsymbol{V}^k\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{x})^t$ で表すことができる ($k=0,1,\ldots,m$)．したがって，(8) の制約条件は

$$\begin{aligned}&f_0(\boldsymbol{x})-\sum_{k=1}^{m}\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{x})^t\boldsymbol{V}^k\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{x})f_k(\boldsymbol{x})-\theta\\&=\boldsymbol{u}_0(\boldsymbol{x})^t\boldsymbol{V}^0\boldsymbol{u}_0(\boldsymbol{x})\ (\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n),\qquad(9)\\&\boldsymbol{V}^k:\text{半正定値}\ (k=0,1,\ldots,m),\ \theta\in\mathbb{R}\end{aligned}$$

と等価になる．$\boldsymbol{x}$ に関する恒等式 (9) は左辺 − 右辺の多項式が恒等的に 0 の多項式になることを意味している．このことより，5 節で説明したように，半正定値行列変数 $\boldsymbol{V}^k$ ($k=0,1,\ldots,m$) の要素と θ に関する線形方程式が導かれ，結局，(8) は半正定値計画問題となる．

4 節で述べた 1 変数多項式最適化問題 (5) を例にとって説明する．例 (5) では，$\omega_0=2$，$\omega_1=2$，$\omega_2=3$ であるから，$d_0\geq 2$ となる．ここでは，

$$d_0=3,\ d_1=\lfloor d_0-\omega_1/2\rfloor=2,\ d_2=\lfloor d_0-\omega_2/2\rfloor=1$$

とすると，(8) の制約条件は

$$\begin{aligned}&x(x-20)+(1,x,x^2)\boldsymbol{V}^1(1,x,x^2)^T(x(x-10))\\&+(1,x)\boldsymbol{V}^2(1,x)^t(x-4)(x-6)(x-8)-\theta\\&=(1,x,x^2,x^3)\boldsymbol{V}^0(1,x,x^2,x^3)^t\ (\forall x\in\mathbb{R}),\\&\boldsymbol{V}^0,\ \boldsymbol{V}^1,\ \boldsymbol{V}^2:4\times4,\ 3\times3,\ 2\times2\ \text{半正定値行列}\end{aligned}$$

となる．最初の恒等式より，$\boldsymbol{V}^0$，$\boldsymbol{V}^1$，$\boldsymbol{V}^2$ の要素と θ に関する線形方程式が得られる．例えば，

$$\begin{aligned}&x\text{ の 0 次の項}\Rightarrow-192V^2_{11}-\theta=V^0_{11},\\&x\text{ の 1 次の項}\Rightarrow-20-10V^1_{11}+104V^2_{11}-384V^2_{12}\\&\qquad=2V^0_{12}\end{aligned}$$

を得る．

8. 計算例

どのような問題が解けるかの計算例を示しておく．

$$f_0(\boldsymbol{x})=-6.3x_5x_8+5.04x_2+0.35x_3+x_4+3.36x_6,$$

$$S=\left\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{14}\ :\begin{array}{l}-0.82x_2+x_5-0.82x_6=0,\\x_2x_9+10x_3+x_6=0,\\\text{その他等式 7 本（最大次数 3)},\\\text{各 }x_i\text{ の上下限制約}\end{array}\right\}.$$

多項式の疎性を考慮した Lasserre の方法の改良版 SparsePOP[4] を使うと約 1 秒程度で大域的最適解を計算できる．$d_0=3$ で $\eta(d_0)=\eta^*=\zeta^*$ を達成している．より大規模な問題の数値計算実験結果は [6] を参照．

9. おわりに

二乗多項式緩和のもう少し詳しい解説は [7] でなされている．細部に興味を持たれた方は原論文 [2] を参照されたい．しかし，そのまま実装したのでは極小規模な問題しか解けない（例えば，前節の問題を解くことはできなかった)．論文 [6] では，多項式の疎性を考慮した Lasserre の方法の改良を提案している．それを実装した SparsePOP[4] による計算例を前節で示した．より最近の発展については [8] 等参照．

謝辞 本稿への投稿を誘ってくださった松井知己先生，執筆のお世話をいただいた小林隆史先生にお礼申し上げます．

参考文献

[1] M. Putinar, "Positive polynomials on compact semi-algebraic sets," *Indiana University Mathematics Journal*, **42**, 969–984, 1993.
[2] J. B. Lasserre, "Global optimization with polynomials and the problems of moments," *SIAM Journal on Optimization*, **11**, 796–817, 2001.
[3] 有馬直彦，"共正値／完全正値最適化の新展開，" オペレーションズ・リサーチ，**59**, 159–166, 2014.
[4] H. Waki, S. Kim, M. Kojima, M. Muramatsu and H. Sugimoto, "SparsePOP: A sparse semidefinite programming relaxation of polynomial optimization problems," *ACM Transactions on Mathematical Software*, **35**, 15, 2008.
[5] 小島政和，"半正定値計画問題の組み合わせ最適化問題の応用に向けて，" オペレーションズ・リサーチ，**40**, 216–221, 1997.
[6] H. Waki, S. Kim, M. Kojima and M. Muramatsu, "Sums of squares and semidefinite programming relaxations for polynomial optimization problems with structured sparsity," *SIAM Journal on Optimization*, **7**, 218–242, 2006.
[7] 小島政和，脇隼人，"多項式最適化問題に対する半正定値計画緩和，" システム／制御／情報，**48**, 477–482, 2004.
[8] M. F Anjos and J. B. Lasserre (eds.), *Handbook on Semidefinite, Conic and Polynomial Optimization*, Springer, 2012.

