非凸2次計画問題と組合せ最適化

矢島　安敏

1. はじめに

さまざまの大域的最適化問題の中で, もっとも多くの研究がなされてきたものの一つに**非凸2次計画問題**がある. 多くの実用上重要な問題へと応用可能であるばかりではなく, 理論面においても, もっとも開拓されてきた問題である. 特に最近は, 組合せ最適化問題のような離散的な構造の問題を, 連続的な変数の最適化問題として扱うことで, 良い近似を得ようとする研究 [2, 7, 3] が行われている. そこで本稿では, いくつかの組合せ最適化問題が非凸2次計画問題へと帰着されることを示すとともに, 非凸2次計画問題に対する近似 (緩和) 手法として比較的最近提案されたものを紹介する. なお, 実際に最適化を行うためには, 分枝限定法といった枠組みが必要不可欠であるが, この辺りについては比較的最近の論文 [1] に詳しい.

以降では, R^n で n 次元の実ベクトル空間を, また $\mathcal{S}^n$ で n 次実対称行列全体を表す. その上で, 本稿で対象とする非凸2次計画問題を一般的に

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最小化} & q(x) = x^T Q x + 2c^T x \\ \text{制約} & x \in D \end{array}\right. \tag{1}$$

と表現する. ただし, $Q \in \mathcal{S}^n$, $c \in R^n$, $D \subseteq R^n$, はそれぞれ与えられた行列, ベクトル, そして部分集合であり, また $x \in R^n$ は変数ベクトルである. 行列 Q は (半) 正定値性を満たさない一般の行列であり, D は空でなく有界な凸集合と仮定する.

2. 組合せ最適化と非凸2次最適化

この節では, 離散的な制約を持った次のような数理計画問題:

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最小化} & q(x) = x^T Q x + 2c^T x \\ \text{制約} & x \in D,\ \ x \text{ は離散的} \end{array}\right. \tag{2}$$

を考える. x の**離散的**条件として, 代表的な2つ

$$B(0,1) \equiv \{\, x \in R^n \mid x_i = 0 \text{ または } 1 \,\}, \tag{3}$$

および

$$B(-1,1) \equiv \{\, x \in R^n \mid x_i = -1 \text{ または } 1 \,\}, \tag{4}$$

を考える. 例えば, 線型関数も $q(x)$ の特殊な場合と考えれば, (2) はいわゆる **0-1 整数計画問題** を含むクラスの問題である.

まず始めに, このような離散的な制約を持つ問題が, 連続的な非凸2次計画問題へと帰着することを示す. 以降, e をその要素がすべて1であるベクトル, また μ をある十分大きな正の数とする.

制約 (3) の場合は, 次の非凸2次計画問題:

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最小化} & q(x) + \mu x^T (e - x) \\ \text{制約} & x \in D, \\ & 0 \le x \le e, \end{array}\right. \tag{5}$$

を定める. 目的関数の第2項は制約領域の上では常に非負であり, また μ が十分大きな数 [6] であることより, 問題 (5) の最適解 x^* では,

$$x^{*T}(e - x^*) = 0$$

すなわち x^* は 0-1 の整数ベクトルに他ならない. 同様に, 制約 (4) の場合は, 次の非凸2次計画問題:

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最小化} & q(x) - \mu (x + e)^T (x - e) \\ \text{制約} & x \in D, \\ & -e \le x \le e, \end{array}\right. \tag{6}$$

へと帰着される. なお, 問題 (5) および (6) どちらも, μ を大きな数にしたことで凹2次関数の最小化問題となっていることに注目して欲しい.

次に, 最大カット問題, グラフ分割問題といった組合せ最適化問題が, 実際に (連続的な) 非凸2次計画問題として定式化されることを紹介する.

やじま　やすとし　東京工業大学 経営工学専攻
〒 152-8552 目黒区大岡山 2－12－1

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会. 無断複写・複製・転載を禁ず.

2.1 最大 cut 問題

無向グラフ $G=(V,E)$ と，その各枝 (i,j) に非負の重み w_{ij} が与えられたとする．便宜的に $w_{ij}=0,\ (i,j)\notin E$ と定める．頂点の部分集合 $U\subseteq V$ およびその補集合 $\overline{U}$ に対して，カット容量

$$w(U,\overline{U})=\sum_{i\in U,\, j\in\overline{U}} w_{ij}$$

を定義する．最大カット問題とは $w(U,\overline{U})$ が最大となるような頂点の部分集合 $U\subseteq V$ を求める問題である．

各ノード $i,\ i\in V$ に変数 x_i を対応させ，

$$x_i=\begin{cases} 1 & \text{もし } i\in U, \\ -1 & \text{もし } i\in\overline{U}, \end{cases}$$

と約束すれば，カット容量は

$$w(U,\overline{U})=\sum_{i\in U,\, j\in\overline{U}} w_{ij}=\frac{1}{4}\sum_{(i,j)\in E} w_{ij}(x_i-x_j)^2$$

と変数 x に関する 2 次式として表現できる．今，行列 $L(G)\in\mathcal{S}^n$ を

$$L(G)_{ij}=\begin{cases} -w_{ij} & i\neq j \\ \displaystyle\sum_{k\in V} w_{ik} & i=j \end{cases}$$

とすれば，最大カット問題は

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最大化} & \frac{1}{4}x^T L(G)x \\ \text{制約} & x\in B(-1,1), \end{array}\right. \tag{7}$$

と定式化される．さらに好都合なことに，行列 $L(G)$ は非負定値行列になっていることより，問題を

$$\max\{\ \frac{1}{4}x^T L(G)x \mid -e\leq x\leq e\ \}$$

と連続化しても，最適解は端点 – すなわち -1 か 1 の整数解 – のなかに存在することが保証される．

2.2 グラフ分割問題

最大カット問題と同様に，各枝 (i,j) に重み w_{ij} が与えられた無向グラフ $G=(V,E)$ を考える．V を要素数が等しい k 個の部分集合 $V_1,V_2,\ldots,V_k$ に，部分集合で切断される枝の重さの総和が最小となるよう分割する問題が，グラフ分割問題である．ここで，k はある与えられた定数で，グラフ G のノード数は k の整数倍になっていることを仮定する．

ここでは 0-1 の変数を使い，各ノード $i,\ (i\in V)$ に変数 $x_{ip},\ (p=1,2,\ldots,k)$ を対応させ，

$$x_{ip}=\begin{cases} 1 & \text{ノード } i \text{ が } V_p \text{ に属する}, \\ 0 & \text{それ以外}, \end{cases}$$

と約束する．

分割 $V_1,V_2,\ldots,V_k$ によって切断される枝の重さの総和を，グラフの枝の重さの総和 $\sum_{(i,j)\in E} w_{ij}$ から各部分集合 V_i 内の枝の重さの総和を引くことで計算をする．すなわち，各 $p,\ (p=1,2,\ldots,k)$ に対して，集合 V_p に枝の両端のノードが属する枝の重さの和は，

$$\sum_{(i,j)\in E} w_{ij}x_{ip}x_{jp}$$

となることより，グラフ分割問題は，

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最小化} & \displaystyle\sum_{(i,j)\in E} w_{ij}-\sum_{p=1}^{k}\sum_{(i,j)\in E} w_{ij}x_{ip}x_{jp} \\ \text{制約} & \displaystyle\sum_{i\in V} x_{ip}=|V|/k,\ p=1,2,\ldots,k, \\ & \displaystyle\sum_{p=1}^{k} x_{ip}=1,\ i\in V, \\ & x\in B(0,1) \end{array}\right. \tag{8}$$

と定式化される．

2.3 サブセット–サム問題

サブセット–サム問題は，離散的な条件を用いることなく連続的な非凸 2 次計画問題へと定式化できる．

自然数 $a_1,a_2,\ldots,a_n$ および b が与えられたとき，以下の条件:

$$\sum_{i=1}^{n} a_i x_i=b,\quad x_i\in\{0,1\},\ i=1,2,\ldots,n, \tag{9}$$

を満たす 0-1 の変数 x_i を見つける (あるいは条件を満たすものはないこと示す) 問題が**サブセット–サム問題** である．

これに関連して，次の 2 次計画問題:

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最小化} & \left(\displaystyle\sum_{i=1}^{n} a_i x_i-b\right)^2+\sum_{i=1}^{n} x_i(1-x_i) \\ \text{制約} & 0\leq x_i\leq 1,\ i=1,2,\ldots,n, \end{array}\right. \tag{10}$$

を定義する．この問題の目的関数は，凸でも凹でもない 2 次関数である．目的関数の第 2 項目に注目すると，制約条件 $0\leq x_i\leq 1,\ (i=1,2,\ldots,n)$ より，$x_i(1-x_i)\geq 0$ であり，かつ等号を満たすのは変数 x_i が 0 か 1 のときに限られる．また，あきらかに第 1 項も非負なので，問題 (10) の目的関数の最適値が 0 ならば，またそのときに限り条件 (9) を満たす 0-1 の変数 x_i が存在することになる．

ちなみに，サブセット–サム問題は代表的な NP–完全な問題である．したがって，問題 (10) のように，「変数の上下限に関するもののみ」という単純な制約条件

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

の場合であっても, 非凸2次計画問題はNP–困難なクラスに属する難しい問題であることがわかる. さらに単純な問題

$$\min\{\ x^TQx \mid x \geq 0\ \}$$

ですらNP–困難であることが知られている [9].

2.4 最大クリーク問題

最大クリーク問題も, 離散的な条件を用いず, 直接に非凸2次計画問題へと定式化できることが知られている.

頂点の集合 $V = \{1, 2, \ldots, n\}$ と向きのない枝 (i, j), ただし $i, j \in V$, $i < j$, の集合 E からなるグラフ $G = (V, E)$ を定める. 頂点の部分集合 $\sigma \subseteq V$ で, 任意の $i, j \in \sigma$ ならば $(i, j) \in E$ のとき, σ はグラフ G のクリークと呼ばれる. グラフ G のクリーク σ で, 要素数が最大のものを求める問題が**最大クリーク問題** である.

非凸2次計画問題を考える.

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最大化} & f_G(x) = \displaystyle\sum_{(i,j)\in E} x_i x_j = \frac{1}{2} x^T A_G x \\ \text{制約} & x \in S_n, \end{array}\right. \tag{11}$$

ただし, $A_G = \{a_{ij}\}$ はグラフ G の隣接行列, また

$$S_n = \{\ x \in R^n \mid \sum_{i=1}^{n} x_i = 1,\ x \geq 0\ \}$$

である. 一般に行列 A_G は (半) 正定値でも (半) 負定値でもない行列である. x^*を問題 (11) の最適解, $\alpha^* = f_G(x^*)$ とおく. また, $\sigma \subseteq V$ を G の最大クリークとし, その要素数を $\omega(G) = |\sigma|$ とする. このとき,

$$x^* = \frac{1}{\omega(G)} \sum_{i\in\sigma} e_i, \tag{12}$$

ただし, e_i は第 i 成分のみが 1 で他は 0 であるベクトル, となる最適解が存在し,

$$f_G(x^*) = \frac{1}{\omega(G)^2}\,{}^{\omega(G)}C_2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{\omega(G)}\right)$$

であることが示されている [8]. しかし, 一般には最適解として (12) で定まるもの以外も存在してしまい, 問題 (11) より最大クリークサイズを知ることはできても, 最大クリーク σ を特定することはできない. 例えば, グラフ $G(V, E)$ が $V = \{1, 2, 3\}$, $E = \{(1, 2), (1, 3)\}$ であったとする [5]. すなわち,

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最大化} & f_G(x) = x_1x_2 + x_1x_3 \\ \text{制約} & x_1 + x_2 + x_3 = 1, \\ & x_1, x_2, x_3 \geq 0 \end{array}\right. \tag{13}$$

を考える. 簡単な計算で, 最適値は 1/4 ($\omega(G) = 2$) であり, 実行可能解のうち $x_2 + x_3 = 1/2$ を満たすものすべてが最適解であることがわかる.

また, 最大クリークを特定するためには以下のようにすれば良い. グラフ G より適当にノード i を選び, i に接続している他のノードのみからなる部分グラフに対して (11) を解く. 最大クリークサイズがちょうど1だけ小さくなれば, i と接続するノードで最大クリークが構成できることがわかる. そうでないならば, i を含む最大クリークは存在しないことがわかる. このような操作を高々 n 回繰り返せば, 最終的に最大クリークが特定できる.

さらに, グラフ $G(V, E)$ の各ノードに重み w_i, $(i \in V)$ を与えた, 重み付きの最大クリーク問題の場合も, ほぼ同様な方法で非凸2次計画問題として定式化できることが知られている. $\sum_{i\in\sigma} w_i$ の最大値を $\omega(w, G)$ と書けば, 次の関係が成り立つ.

$$1/\omega(w, G) = \min\{\ x^TBx \mid x \in S_n\ \}.$$

ただし, $B \in \mathcal{S}^n$ は

$$\begin{aligned} B_{ii} &= 1/w_i,\ {}^\forall i \in V, \\ B_{ij} &= (1/w_i + 1/w_j)/2,\ {}^\forall (i, j) \notin E, \\ B_{ij} &= 0,\ {}^\forall (i, j) \in E \end{aligned}$$

である. 特に, 重みをすべて1とした場合, $B = ee^T - A_G$ であるが,

$$\begin{aligned} 1/\omega(w, G) &= \min\{\ x^T(ee^T - A_G)x \mid x \in S_n\ \} \\ &= \min\{\ 1 - x^TA_Gx \mid x \in S_n\ \} \\ &= 1 - \max\{\ x^TA_Gx \mid x \in S_n\ \} \end{aligned}$$

より, (11) を特殊な場合に含むことがわかる.

3. 楕円制約上での最適化

前節で述べたように, 非凸2次計画問題は, 一般にNP–困難な問題であった. ところが, 制約が1本の2次関数のみで定まる場合, たとえ目的関数が非凸であっても簡単に (多項式時間で) 解くことができる.

$Q_1 \in \mathcal{S}^n$, $c_1 \in R^n$, $r \in R$ を与えられた定数として, 以下の非凸問題を考える.

$$\left|\begin{array}{ll} \text{最小化} & q(x) = x^TQx + 2c^Tx \\ \text{制約} & x^TQ_1x + 2c_1^Tx \leq r, \end{array}\right. \tag{14}$$

ただし, 制約領域は空でなく, 問題 (14) は最適解を持つと仮定する. このとき, Q が非負定値行列でないこ

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会. 無断複写・複製・転載を禁ず.

とから，もし，(14) の最適解 x^* が領域の内点であれば，$x^*+\epsilon d$ もまた最適解となるような Q の 0 の固有値に対応した固有ベクトル d と適当な実数 ϵ が存在するはずである．このことより，最適解として常に

$$x^{*T}Q_1x^*+2c_1^Tx^*=r$$

を満たすものが存在することがわかる．

x^* を最適解とすれば，以下の K-K-T 条件

$$\begin{aligned}&Qx^*+c+\mu^*(Q_1x^*+c_1)=0,\\&x^{*T}Q_1x^*+2c_1^Tx^*=r,\\&\mu^*\geq 0,\end{aligned}\tag{15}$$

を満たす．ここで，μ^* は最適なラグランジュ乗数である．さらに，2 次の K-K-T 条件より，任意のベクトル $d\in\{\,d\neq 0\mid d^T(Q_1x^*+c_1)\leq 0\,\}$ に対して，

$$d^T(Q+\mu^*Q_1)d\geq 0\tag{16}$$

が成立しなくてはならない．また，

$$(-d^T)(Q+\mu^*Q_1)(-d)=d^T(Q+\mu^*Q_1)d$$

より，(16) は任意の $d\in R^n$ に対して成立する．したがって，(16) は

$$Q+\mu^*Q_1\ \text{ が半正定値行列}\tag{17}$$

であることに他ならない．さらに興味深いことに，条件 (15) および (17) を満たす (x^*,μ^*) は唯一に存在し [12]，ゆえに，条件 (15) および (17) は問題 (14) の最適性の必要十分条件となっている．次に，この必要十分条件を使い，(14) を凸計画問題へと帰着させよう．以下，議論を簡単にするため $Q+\mu^*Q_1$ は正則であると仮定する．また，半正定値であることを $\succeq 0$ と書くことにする．

条件 (15) より以下の関係

$$\begin{aligned}Qx^*+c&=-\mu^*(Q_1x^*+c_1),\\x^{*T}Qx^*+c^Tx^*&=-\mu^*(x^{*T}Q_1x^*+c_1^Tx^*),\\q(x^*)&=-\mu^*r+c^Tx^*+\mu^*c_1^Tx^*\end{aligned}$$

を得る．そこで，$q(x)$ の下界に対応する変数 s を導入し，不等式

$$-\mu^*r+c^Tx^*+\mu^*c_1^Tx^*\geq s$$

を得る．また $R=Q+\mu^*Q_1$ と定める．この不等式に $x^{*T}=-R^{-1}(c+\mu^*c_1)$ を代入し，

$$-\mu^*r-s-(c+\mu^*c_1)^TR^{-1}(c+\mu^*c_1)\geq 0$$

を得る．この式の左辺は schur comlement と呼ばれ，R が非負定値行列であることより，

$$\begin{bmatrix}R & c+\mu^*c_1\\(c+\mu^*c_1)^T & -s-\mu^*r\end{bmatrix}\succeq 0$$

と等価であることが知られている [4]．ゆえに，μ も変数であると考えれば，問題 (14) は

$$\left|\begin{array}{ll}\text{最大化} & s\\\text{制約} & \begin{bmatrix}Q+\mu Q_1 & c+\mu c_1\\(c+\mu c_1)^T & -s-\mu r\end{bmatrix}\succeq 0,\\&\mu\geq 0\end{array}\right.\tag{18}$$

と書きなおすことができる．これは**半正定値計画問題** (SDP) と呼ばれる凸計画問題の一つであり，線型計画問題に対する内点法を拡張することで [10]，多項式オーダのアルゴリズムが知られている．

4. 非凸 2 次計画問題の緩和

最後に，線型制約上の非凸 2 次計画問題に対する緩和問題について，比較的最近提案されたものを中心に述べることにする．すなわち，これ以降対象とする問題を

$$\left|\begin{array}{ll}\text{最小化} & q(x)=x^TQx+2c^Tx\\\text{制約} & x\in D\end{array}\right.\tag{19}$$

ただし，

$$D=\{x\in R^n\mid a_j^Tx\leq b_j,\ j=1,2,\ldots,m\}$$

$a_j\in R^n$ $(j=1,2,\ldots,m)$，および，$b_j\in R$ $(j=1,2,\ldots,m)$ とする．また，議論を簡単にするため，実行可能領域は空でなくかつ有界であると仮定する．

4.1 線型化とランク 2 緩和

まず，新たな変数 Y_{ij} $(i,j=1,2,\ldots,n$ ただし $i\leq j)$ を導入し，問題 (19) を等価に

$$\left|\begin{array}{ll}\text{最小化} & \displaystyle\sum_{i=1}^{n}Q_{ii}Y_{ii}+2\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}Q_{ij}Y_{ij}\\&\qquad\displaystyle+2\sum_{i=1}^{n}c_ix_i\\\text{制約} & x\in D,\\&Y_{ij}=x_ix_j,\ \ i,j=1,2,\ldots,n,\\&\qquad\text{ただし}\,i\leq j,\end{array}\right.\tag{20}$$

と書きかえる．また，この問題で，制約

$$Y_{ij}=x_ix_j,\ \ i,j=1,2,\ldots,n,\ \text{ただし}\,i\leq j\tag{21}$$

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．

は, ランク 1 制約と呼ばれるものである. 便宜的に変数 Y_{ij} からなる行列を $Y \in \mathcal{S}^n$ とすれば, この制約は

$$Y = xx^T \tag{22}$$

とコンパクトに書くことができる. 式 (22) は, Y のランクが 1 となることを要求しているもので, これがランク 1 制約と呼ばれる所以である. 以降, 問題 (20) の実行可能領域を

$$\mathcal{D} = \{(Y, x) \in R^{n(n+1)/2+n} \mid Y = xx^T,\ x \in D\},$$

さらにその凸包を $co\mathcal{D}$ と表すことにする.

ここで, 問題 (20) に関連した以下の問題:

$$\left| \begin{array}{ll} \text{最小化} & \langle Q, Y\rangle + 2c^T x \\ \text{制約} & (Y, x) \in co\mathcal{D} \end{array} \right. \tag{23}$$

を導入する. ここで, $\langle Q, Y\rangle$ は行列同士の内積で

$$\langle Q, Y\rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} Q_{ij}Y_{ij}$$

と定義されたものである. 問題 (23) の最適解を (Y^*, x^*) とする. このとき, (23) の目的関数が線型であることより, 最適解 (Y^*, x^*) は $co\mathcal{D}$ の端点で達成される. 言いかえれば, $Y^* = x^*x^{*T}$ となる最適解が存在し, したがって, 目的関数の値は問題 (19) のそれと等しくなる. ゆえに, x^* が (19) の最適解となるような (Y^*, x^*) が存在することになる.

Sherali [11] らは, $co\mathcal{D}$ を近似する線型不等式群が次のような方法で生成できることを示している. まず, D を定める任意の 2 本の線型不等式 $a_i^T x - b_i \le 0$, $a_j^T x - b_j \le 0$ の積から導かれる 2 次不等式

$$\begin{aligned} q_{ij}(x) &= (a_i^T x - b_i)(a_j^T x - b_j) \\ &= \langle (a_i a_j^T), xx^T\rangle \\ &\quad -(b_i a_j + b_j a_i)^T x + b_i b_j \ge 0, \end{aligned} \tag{24}$$

を考える. 上の 2 次不等式は, 集合 D に対して

$$\{\ x \mid q_{ij}(x) \ge 0\ \} \supseteq D$$

となる妥当な不等式である.

ゆえに, 式 (24) の項 xx^T を行列 Y で置き換えた不等式

$$\begin{aligned} &[q_{ij}(x)]_L \\ &\quad = \langle a_i a_j^T, Y\rangle - (b_i a_j + b_j a_i)^T x + b_i b_j \ge 0 \end{aligned}$$

は, 集合 $\mathcal{D}$ の妥当な不等式となる. これ以降, xx^T を行列 Y で置き換えることで D の妥当な 2 次不等式より $\mathcal{D}$ の妥当な線型不等式を得る操作を**線型化 (Linearization)** と呼ぶことにする. また, $q_{ij}(x)$ の 2 次の係数行列 $a_i a_j^T$ のランクが高々 2 であることから, $q_{ij}(x) \ge 0$ あるいは $[q_{ij}(x)]_L \ge 0$ はランク 2 の制約と呼ばれる.

上の操作で得られた不等式群で定まる領域を

$$[\mathcal{D}]_L^2 = \{(Y, x) \mid [q_{ij}(x)]_L \ge 0,\ i, j = 1, 2, \ldots, m\}$$

とすれば, 線型計画問題

$$\left| \begin{array}{ll} \text{最小化} & \langle Q, Y\rangle + 2c^T x \\ \text{制約} & (Y, x) \in [\mathcal{D}]_L^2 \end{array} \right. \tag{25}$$

が得られる. あきらかに, 包含関係 $[\mathcal{D}]_L^2 \supseteq co\mathcal{D}$ より上の線型計画問題は問題 (23) の緩和問題である.

集合 $[\mathcal{D}]_L^2$ に関連して, いくつかの性質が知られている. 今, 任意のベクトル $d_1, d_2 \in R^n$ に対して

$$\alpha_j \equiv \max\{d_j^T x \mid x \in D\},\ j = 1, 2$$

を定める. すなわち, 元問題の実行可能領域 D 対して妥当な不等式を任意に 2 本

$$d_1^T x \le \alpha_1 \quad \text{および} \quad d_2^T x \le \alpha_2$$

とする. このとき次の定理 [11] が成立する.

定理 1

$$\{(Y, x) \mid [(d_1^T x - \alpha_1)(d_2^T x - \alpha_2)]_L \ge 0\} \supseteq [\mathcal{D}]_L^2$$

すなわち $[\mathcal{D}]_L^2$ は 2 本の不等式の積を線型化することで得られる $\mathcal{D}$ の緩和のなかでもっとも強いものとなっている. また, 線型計画問題 (25) に関連して, 次の定理が示されている.

定理 2 $(Y, x) \in [\mathcal{D}]_L^2$ ならば $x \in D$ である. 特に, x が D の端点となっていれば, $Y = xx^T$ を満たす.

したがって, (Y^*, x^*) を (25) の最適解とすれば, $\langle Q, Y^*\rangle + 2c^T x^*$ は元の非凸 2 次計画問題 (19) の下界値となり, 同時に $x^* \in D$ より $q(x^*)$ は上界値を与え, また x^* が D の端点でもあれば, この解が (19) の最適解となるのである.

4.2 楕円を使った緩和

最後に, 領域 D を楕円を使って緩和するアプローチを紹介する. まず問題 (19) の制約 D を

$$\{\ x \mid b_j^L \le a_j^T x \le b_j^U,\ j = 1, 2, \ldots, m\ \}$$

と表す. D が空でなく有界であることから $-\infty < b_j^L \le b_j^U < \infty$, $(j = 1, 2, \ldots, m)$ である. また

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会. 無断複写・複製・転載を禁ず.

$b_j \equiv (b_j^L + b_j^U)/2$ と定義しなおす．そこで，それぞれの j に対して，2つの不等式 $b_j^L \le a_j^T x$ および $a_j^T x \le b_j^U$ の積から導かれる2次不等式を

$$q_j(x) = x^T a_j a_j^T x - 2b_j^T x + b_j^L b_j^U \le 0$$

とおけば，D は m 本の2次不等式の共通部分として

$$\{\, x \mid q_j(x) \le 0,\ j = 1, 2, \ldots, m \,\},$$

と表現することができる．3. 節において1本の2次不等式からなる制約であれば，非凸2次関数が SDP と呼ばれる問題を解くことで，最小化ができることを述べた．しかし，$m = 2$ の場合ですら，筆者の知る限りでは多項式時間の算法はまだ発見されていない（もちろん NP–困難であるか否かも未解決である）．そこで，m 個の非負のパラメータ t_j，$(j = 1, 2, \ldots, m)$ を導入し，D を以下のように緩和する．

$$D(t) = \{\, x \mid \sum_{j=1}^{m} t_j q_j(x) \le 0 \,\} \tag{26}$$

$D(t) \supseteq D$ であることはあきらかであろう．ゆえに，t をパラメータとして含む問題:

$$\left| \begin{array}{ll} \text{最小化} & q(x) = x^T Q x + 2c^T x \\ \text{制約} & x \in D(t), \end{array} \right. \tag{27}$$

を解けば (19) の下界が得られる．さらに (27) の最適値を $E(t)$ とし，t に関して最大化

$$\max\{\, E(t) \mid t \ge 0 \,\} \tag{28}$$

することで，より強力な下界を得ることが期待できる．3. 節で行ったのと同様な変形をすれば，(28) は次の SDP:

$$\left| \begin{array}{ll} \text{最大化} & s \\ \text{制約} & \begin{bmatrix} Q & b \\ b^T & -s \end{bmatrix} \\ & + \sum_{j=1}^{m} t_j \begin{bmatrix} a_j a_j^t & -b_j \\ -b_j^T & b_j^L b_j^U \end{bmatrix} \succeq 0, \\ & t \ge 0, \end{array} \right. \tag{29}$$

と等価であることが示される．問題 (28)（あるいは (29)）を解くことで，$D(t)$ の形で記述可能な楕円の族の中で，もっとも下界を大きくする楕円で D を近似したときの下界が得られる．さらに，前節で導入した2次不等式 (24) も D に対して妥当なものなので，非負のパラメータ t_{ij}，$(i, j = 1, 2, \ldots, m)$ を加え，$D(t)$ を

$$\{\, x \mid \sum_{j=1}^{m} t_j q_j(x) - \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i}^{n} t_{ij} q_{ij}(x) \le 0 \,\} \tag{30}$$

とより記述力が高いものにすれば，一層強い下界が得られることが期待できる．実際，前節で取り上げた最大カット問題 [3] やグラフ分割問題 [7] に対し，ここで示したような緩和を用いた研究もいくつかなされている．

参考文献

[1] C. A. Floudas and V. Visweswaran, *Quadratic optimization*, in Handbook of global optimization, vol. 2 of Nonconvex Optim. Appl., Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1995, pp. 217–269.

[2] M. X. Goemans and D. P. Williamson, *Improved approximation algorithms for maximum cut and satisfiability problems using semidefinite programming*, J. Assoc. Comput. Mach., 42 (1995), pp. 1115–1145.

[3] C. Helmberg and R. Weismantel, *Cutting plane algorithms for semidefinite relaxation*, in Topics in semidefinite and interior-point methods (Toronto, ON, 1996), vol. 18 of Fields Inst. Commun., Amer. Math. Soc., Providence, 1998, pp. 197–213.

[4] R. A. Horn and C. R. , Johnson, *Matrix analysis*, Cambridge University Press, Cambridge-New York, 1985.

[5] R. Horst, P. M. , Pardalos, and N. V. Thoai, *Introduction to global optimization*, vol. 3 of Nonconvex Optimization and its Applications, Kluwer Academic Publishers, 1995.

[6] R. Horst and H. Tuy, *Global optimization*, Springer-Verlag, Berlin, second ed., 1993. Deterministic approaches.

[7] S. E. Karisch and F. , Rendl, *Semidefinite programming and graph equipartition*, in Topics in semidefinite and interior-point methods (Toronto, ON, 1996), vol. 18 of Fields Inst. Commun., Amer. Math. Soc., Providence, 1998, pp. 77–95.

[8] T. S. Motzkin and E. G. Strauss, *Maxima for graphs and a new proof of a theorem of turan*, Canada. J. Math., 17 (1965), pp. 33–35.

[9] K. G. Murty and S. N. Kabadi, *Some NP-complete problems in quadratic and nonlinear programming*, Math. Programming, 39 (1987), pp. 117–129.

[10] Y. Nesterov and A. Nemirovskii, *Interior-point polynomial algorithms in convex programming*, vol. 13 of SIAM Studies in Applied Mathematics, SIAM, Philadelphia, 1994.

[11] H. D. Sherali and C. H. Tuncbilek, *A reformulation-convexification approach for solving nonconvex quadratic programming problems*, J. Global Optim., 7 (1995), pp. 1–31.

[12] H. Tuy, *Convex analysis and global optimization*, vol. 22 of Nonconvex Optimization and its Applications, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998.

© 日本オペレーションズ・リサーチ学会．無断複写・複製・転載を禁ず．