講座

半正定値計画とその応用
第2回　半正定値計画による緩和(1)

藤江　哲也

1. はじめに

今回と次回の2回にわたり「緩和問題としての半正定値計画」を取りあげる．この話題の始まりは，最大安定集合問題に対するLovászの論文[13]である．この論文の結果は，その後Grötschel, Lovász and Schrijverによって拡張・発展されていった．しかし，半正定値計画緩和が今日ほど注目されるようになったのは，0-1整数計画・組合せ最適化問題に対する一般論を展開したLovász and Schrijver [14]の結果と，最大カット問題に対し，半正定値計画緩和を用いた近似解法を提案したGoemans and Williamson [8]の結果が始まりである．[14]では，半正定値計画緩和の適用範囲が汎用的であることばかりでなく，半正定値計画緩和は連続緩和 (線形計画緩和) よりも強い，など緩和が理論的にも優れていることが示された．[8]では，従来知られていた近似比を大幅に更新する0.878近似解法を与えた([15]は日本語で書かれた詳しい解説である)．また，半正定値計画問題を解く内点法およびソフトウェアの開発[7]も半正定値計画緩和に大きな影響を与えている．

さて，Lovász and Schrijver [14]以来，多くの組合せ最適化問題に対して半正定値計画緩和の研究が行なわれているが，それ以外にも非線形計画や大域的最適化で対象とされる2次計画問題にまで研究対象が広がっている．第2節，第3節でその理由を明らかにする．第3節では線形化に基づいた半正定値計画緩和の導出法を紹介する．半正定値計画緩和の最大の特徴は，$\boldsymbol{x} \in R^n$ を変数とする問題を行列を変数とする問題へと緩和することである．線形化による導出法は，まず行列を変数とする問題へと再定式化し，その問題の緩和問題を作る，というものである．

そこで，まず緩和問題を定義しよう．$f : R^n \to R$, $S \subseteq R^n$ として問題(P)を考える．

$$
\text{(P)} \quad \left|\ \begin{array}{ll} \text{目的:} & f(\boldsymbol{x}) \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{x} \in S. \end{array}\right.
$$

このとき，次の問題$(\overline{\mathrm{P}})$を(P)の緩和問題 (relaxation problem) とよぶ．

$$
(\overline{\mathrm{P}}) \quad \left|\ \begin{array}{ll} \text{目的:} & g(\boldsymbol{x}) \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{x} \in \overline{S}. \end{array}\right.
$$

ただし，$g : R^n \to R$, $\overline{S} \subseteq R^n$ は

(i) $S \subseteq \overline{S}$,

(ii) $g(\boldsymbol{x}) \leq f(\boldsymbol{x})$ $({}^\forall \boldsymbol{x} \in S)$

を満たすものである．$v(\cdot)$を問題$(\cdot)$の最適値とすると，$v(\overline{\mathrm{P}}) \leq v(\mathrm{P})$，すなわち緩和問題$(\overline{\mathrm{P}})$は(P)に対する下界値を与えることが示される．半正定値計画緩和の場合，R^nが行列の空間に置き換わる．

第4節では，過去に半正定値計画とは独立に提案されたラグランジュ双対問題・固有値を用いた最適化問題，そして[8]に現れるベクトル計画問題が半正定値計画問題と等価であることを示す．

なお，以下で用いられる記号や用語については，本連載第1回をご覧いただきたい．

2. 非凸2次計画問題

半正定値計画緩和の場合，(P)に相当する最も一般的な問題は，次の2次計画問題 (Quadratic Programming problem) である．

$$
\text{(QP)} \quad \left|\ \begin{array}{ll} \text{目的:} & \boldsymbol{x}^T Q_0 \boldsymbol{x} + \boldsymbol{q}_0^T \boldsymbol{x} + \pi_0 \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{x}^T Q_i \boldsymbol{x} + \boldsymbol{q}_i^T \boldsymbol{x} + \pi_i \leq 0 \\ & \qquad (i = 1, \ldots, m). \end{array}\right.
$$

ただし，$(Q_i, \boldsymbol{q}_i, \pi_i) \in \mathcal{S}^n \times R^n \times R$ $(i = 0, 1, \ldots, m)$ である．もし，すべてのQ_iが半正定値ならば，(QP)は凸計画問題であり，多項式時間で解けることが示される(この事実は定理1からも導かれる)．しかし，こ

ふじえ　てつや　神戸商科大学商経学部
〒651-2103 神戸市西区学園西町 8-2-1

こでは$\boldsymbol{Q}_i$の半正定値性を仮定しない．そこで，(QP)を非凸2次計画問題とよぶ．

(QP)は，それ自身が非凸型連続最適化問題であり，大域的最適化の分野で扱われる，線形不等式制約の2次計画問題等を含む．また，(QP)は0-1整数計画問題なども含んでいる．実際，変数の0-1条件，±1条件は

$$x_j \in \{0,1\} \iff x_j^2 - x_j = 0,$$
$$x_j \in \{-1,1\} \iff x_j^2 - 1 = 0$$

と2次等式で表現できる．すなわち，半正定値計画緩和の適用範囲はかなり広い．もちろん，問題ごとの研究も数多く存在するが，これについては[6, 10, 11]等をご覧いただきたい．

3. 線形化と半正定値計画緩和問題

ここで(QP)に対する半正定値計画緩和問題を導くが，すでに述べたように，(QP)は$\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n)^T \in R^n$を変数とする問題であるにもかかわらず，半正定値計画問題は対称行列を変数とする問題であった．そこでまず，(QP)の再定式化を行なう．そのために，2次項$x_i x_j$を新しい変数X_{ij}に置き換える．すなわち，

$$X_{ij} = x_i x_j \quad (i, j = 1, \ldots, n) \tag{1}$$

として新しい変数を導入する．行列変数$\boldsymbol{X}$を用いると(1)は

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T$$

と書くことができる($\boldsymbol{X}$の第(i,j)要素はX_{ij}であり，$\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T$の第$(i,j)$要素は$x_i x_j$である)．また，一般に

$$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{Q} \boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} Q_{ij} x_i x_j = \boldsymbol{Q} \bullet (\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T)$$

と変形することができる．よって，(QP)は以下の問題と等価であることがわかる．

$$(\mathrm{QP}_L)\quad \left|\begin{array}{ll} \text{目的:} & \boldsymbol{Q}_0 \bullet \boldsymbol{X} + \boldsymbol{q}_0^T \boldsymbol{x} + \pi_0 \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{Q}_i \bullet \boldsymbol{X} + \boldsymbol{q}_i^T \boldsymbol{x} + \pi_i \le 0 \\ & \qquad\qquad (i = 1, \ldots, m), \\ & \boldsymbol{X} - \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T = \boldsymbol{O}. \end{array}\right.$$

(QP_L)も非凸2次計画問題である．しかし，(QP)における2次目的関数，2次不等式がそれぞれ線形目的関数，線形不等式になった．よって，このような操作を線形化(linearization)とよんでいる．

零行列 $\boldsymbol{O}$ は半正定値であるので，次の問題は(QP_L)の緩和問題である．

$$(\overline{\mathrm{QP}_L})\quad \left|\begin{array}{ll} \text{目的:} & \boldsymbol{Q}_0 \bullet \boldsymbol{X} + \boldsymbol{q}_0^T \boldsymbol{x} + \pi_0 \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{Q}_i \bullet \boldsymbol{X} + \boldsymbol{q}_i^T \boldsymbol{x} + \pi_i \le 0 \\ & \qquad\qquad (i = 1, \ldots, m), \\ & \boldsymbol{X} - \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T \succeq \boldsymbol{O}. \end{array}\right.$$

$(\overline{\mathrm{QP}_L})$は半正定値計画問題ではない．しかし，

$$\boldsymbol{X} - \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T \succeq \boldsymbol{O} \iff \begin{pmatrix} 1 & \boldsymbol{x}^T \\ \boldsymbol{x} & \boldsymbol{X} \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O} \tag{2}$$

が成り立つ(例えば[9])ため，行列$\boldsymbol{Y} = (Y_{ij}) \in \mathcal{S}^{1+n}$を

$$\left(\begin{array}{c|ccc} Y_{00} & Y_{01} & \cdots & Y_{0n} \\ \hline Y_{10} & Y_{11} & \cdots & Y_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Y_{n0} & Y_{n1} & \cdots & Y_{nn} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & x_1 & \cdots & x_n \\ \hline x_1 & X_{11} & \cdots & X_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n & X_{n1} & \cdots & X_{nn} \end{array}\right)$$

として導入すると，$(\overline{\mathrm{QP}_L})$は次の問題と等価になる．

$$(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})\quad \left|\begin{array}{ll} \text{目的:} & \boldsymbol{P}_0 \bullet \boldsymbol{Y} \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{E}_{00} \bullet \boldsymbol{Y} = 1 \ (\Leftrightarrow Y_{00} = 1), \\ & \boldsymbol{P}_i \bullet \boldsymbol{Y} \le 0 \ \ (i = 1, \ldots, m), \\ & \boldsymbol{Y} \succeq \boldsymbol{O}. \end{array}\right.$$

ただし，

$$\boldsymbol{E}_{00} = \begin{pmatrix} 1 & \boldsymbol{0}^T \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{P}_i = \begin{pmatrix} \pi_i & \boldsymbol{q}_i^T/2 \\ \boldsymbol{q}_i/2 & \boldsymbol{Q}_i \end{pmatrix} \quad (i = 0, 1, \ldots, m)$$

である．$(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$は半正定値計画問題である．よって，$(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$または等価な問題$(\overline{\mathrm{QP}_L})$が，(QP)の半正定値計画緩和問題とよばれるものである．

順番が逆になるが，$(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$を緩和問題にする元問題$(\mathrm{QP}_{L2})$を紹介する．これは，$(\mathrm{QP}_L)$を次の事実に基づいて変形すればよい．

$$\boldsymbol{X} - \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T = \boldsymbol{O} \iff \mathrm{rank} \begin{pmatrix} 1 & \boldsymbol{x}^T \\ \boldsymbol{x} & \boldsymbol{X} \end{pmatrix} = 1. \tag{3}$$

すなわち，次の問題が(QP_{L2})となる．

$$(\mathrm{QP}_{L2})\quad \left|\begin{array}{ll} \text{目的:} & \boldsymbol{P}_0 \bullet \boldsymbol{Y} \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & Y_{00} = 1, \\ & \boldsymbol{P}_i \bullet \boldsymbol{Y} \le 0 \ \ (i = 1, \ldots, m), \\ & \mathrm{rank}\, \boldsymbol{Y} = 1. \end{array}\right.$$

図1は，今までの議論のまとめである．(QP)から半正定値計画緩和問題$(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$へ至る方法を2通り示したが，別の方法で$(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$を導くものもある．

半正定値計画緩和の有効性はさまざまな角度から論じられている．次に紹介する定理もまた，半正定値計画緩和の有効性を示すものであろう．

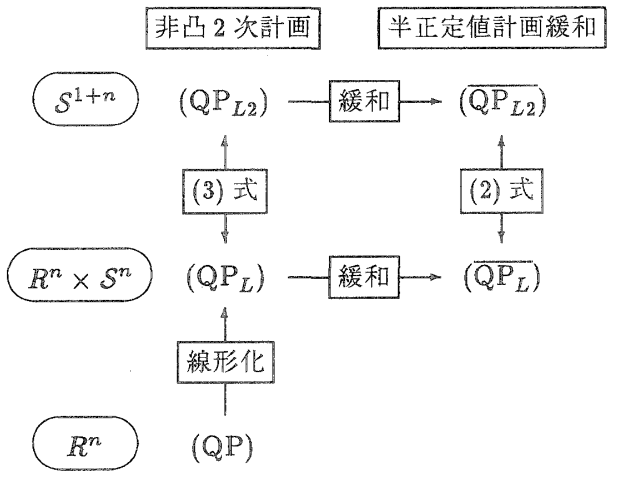

図 1: 半正定値計画緩和の導出法

定理 1 $\boldsymbol{Q}_0 \succeq \boldsymbol{O}, \boldsymbol{Q}_1 \succeq \boldsymbol{O}, \ldots, \boldsymbol{Q}_m \succeq \boldsymbol{O}$ とする (すなわち (QP) は凸計画問題). さらに, $(\overline{\mathrm{QP}_L})$ の最適解を $(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{X}^*)$ とする. このとき, $(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{x}^*\boldsymbol{x}^{*T})$ は (QP_L) の最適解であり, $\boldsymbol{x}^*$ は (QP) の最適解である. ■

最後に, (QP) に対する半正定値計画緩和が Lovász and Schrijver [14] で提案されている方法の一般化であることを説明する. [14] では, 次の 0-1 整数計画問題

$$
(\mathrm{IP}) \left| \begin{array}{ll} \text{目的:} & \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{a}_k^T\boldsymbol{x} \le b_k \quad (k = 1, \ldots, m), \\ & x_j \in \{0, 1\} \quad (j = 1, \ldots, n). \end{array} \right.
$$

を扱っている (ただし, $\boldsymbol{a}_k^T\boldsymbol{x} \le b_k$ $(k = 1, \ldots, m)$ を満たす任意の $\boldsymbol{x}$ は, $0 \le x_j \le 1$ $(j = 1, \ldots, n)$ も満たしていることを仮定する). そして (IP) を次のように再定式化する.

$$
(\mathrm{IP1}) \left| \begin{array}{ll} \text{目的:} & \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & x_j(b_k - \boldsymbol{a}_k^T\boldsymbol{x}) \ge 0 \\ & \qquad (j = 1, \ldots, n; k = 1, \ldots, m), \\ & (1 - x_j)(b_k - \boldsymbol{a}_k^T\boldsymbol{x}) \ge 0 \\ & \qquad (j = 1, \ldots, n; k = 1, \ldots, m), \\ & x_j^2 - x_j = 0 \quad (j = 1, \ldots, n). \end{array} \right.
$$

すなわち, (IP) における妥当不等式 $x_j \ge 0$ と $b_k - \boldsymbol{a}_k^T\boldsymbol{x} \ge 0$, $1 - x_j \ge 0$ と $b_k - \boldsymbol{a}_k^T\boldsymbol{x} \ge 0$ をそれぞれ掛け算して2次不等式を作る. (IP1) は (QP) の特殊な場合となり, (QP) から $(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$ を作ったようにして (IP1) の半正定値計画緩和ができる. これが [14] で提案されている方法である. [2, 12] は [14] の拡張であり, [14] についても言及されている.

4. 半正定値計画緩和の導出法

本節では, 線形化以外の導出方法を紹介する.

4.1 ラグランジュ緩和

$\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \ldots, \lambda_m)^T \ge \boldsymbol{0}$ に対し, 次の問題を考える.

$$
(\mathrm{LR}_{\boldsymbol{\lambda}}) \left| \begin{array}{ll} \text{目的:} & \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}_0\boldsymbol{x} + \boldsymbol{q}_0^T\boldsymbol{x} + \pi_0 \\ & \quad + \sum_{i=1}^m \lambda_i(\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{x} + \boldsymbol{q}_i^T\boldsymbol{x} + \pi_i) \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{x} \in R^n. \end{array} \right.
$$

$(\mathrm{LR}_{\boldsymbol{\lambda}})$ は緩和問題の条件を満たしており, ラグランジュ緩和問題とよばれる. すなわち, $v(\mathrm{LR}_{\boldsymbol{\lambda}}) \le v(\mathrm{QP})$ が成り立つ. そして, $v(\mathrm{QP})$ に最も近い, すなわち $v(\mathrm{LR}_{\boldsymbol{\lambda}})$ を最大化する問題がラグランジュ双対問題

$$
(\mathrm{LD}) \left| \begin{array}{ll} \text{目的:} & v(\mathrm{LR}_{\boldsymbol{\lambda}}) \to \text{最大化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{\lambda} \ge \boldsymbol{0}. \end{array} \right.
$$

である. ところが, $\boldsymbol{Q}_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i\boldsymbol{Q}_i \succeq \boldsymbol{O}$ でない場合, $v(\mathrm{LR}_{\boldsymbol{\lambda}}) = -\infty$ となることが知られているので,

$$
(\mathrm{LD}) \left| \begin{array}{ll} \text{目的:} & v(\mathrm{LR}_{\boldsymbol{\lambda}}) \to \text{最大化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{Q}_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i\boldsymbol{Q}_i \succeq \boldsymbol{O},\ \boldsymbol{\lambda} \ge \boldsymbol{0}, \end{array} \right.
$$

または

$$
(\mathrm{LD}) \left| \begin{array}{ll} \text{目的:} & t \to \text{最大化} \\ \text{条件:} & v(\mathrm{LR}_{\boldsymbol{\lambda}}) - t \ge 0, \\ & \boldsymbol{Q}_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i\boldsymbol{Q}_i \succeq \boldsymbol{O},\ \boldsymbol{\lambda} \ge \boldsymbol{0} \end{array} \right.
$$

をラグランジュ双対問題としてよい. さらに

$$
\begin{gathered} v(\mathrm{LR}_{\boldsymbol{\lambda}}) - t \ge 0,\ \boldsymbol{Q}_0 + \textstyle\sum_{i=1}^m \lambda_i\boldsymbol{Q}_i \succeq \boldsymbol{O},\ \boldsymbol{\lambda} \ge \boldsymbol{0} \\ \Updownarrow \\ \boldsymbol{P}_0 + \textstyle\sum_{i=1}^m \lambda_i\boldsymbol{P}_i - t\boldsymbol{E}_{00} \succeq \boldsymbol{O},\ \boldsymbol{\lambda} \ge \boldsymbol{0} \end{gathered}
$$

を示すことができる [11]. 結局, ラグランジュ双対問題は

$$
(\mathrm{LD}) \left| \begin{array}{ll} \text{目的:} & t \to \text{最大化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{P}_0 + \sum_{i=1}^m \lambda_i\boldsymbol{P}_i - t\boldsymbol{E}_{00} \succeq \boldsymbol{O}, \\ & \boldsymbol{\lambda} \ge \boldsymbol{0} \end{array} \right.
$$

となることがわかった. これは半正定値計画問題であり, しかも $(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$ の双対問題である. (QP) に対するラグランジュ双対問題は [5, 17] 等で扱われている.

4.2 ベクトル計画

(QP) において, 行列 $\boldsymbol{Q}_i$ の (k, ℓ) 要素を $Q_{k\ell}^i$, ベクトル $\boldsymbol{q}_i$ の第 j 要素を q_j^i と書くことにする. すなわち

(QP)：

$$\text{目的:}\quad \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} Q^0_{k\ell}x_k x_\ell + \sum_{j=1}^{n} q^0_j x_j + \pi_0 \to \text{最小化}$$

$$\text{条件:}\quad \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} Q^i_{k\ell}x_k x_\ell + \sum_{j=1}^{n} q^i_j x_j + \pi_i \le 0 \qquad (i=1,\ldots,m)$$

と書き直す．このとき，ベクトル計画緩和問題は，各変数 x_j をベクトル $v_j \in R^{n+1}$ に置き換えることで，次のように与えられる：

(VP)：

$$\text{目的:}\quad \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} Q^0_{k\ell}v_k^T v_\ell + \sum_{j=1}^{n} q^0_j v_0^T v_j + \pi_0 \to \text{最小化}$$

$$\text{条件:}\quad \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} Q^i_{k\ell}v_k^T v_\ell + \sum_{j=1}^{n} q^i_j v_0^T v_j + \pi_i \le 0 \qquad (i=1,\ldots,m),$$

$$v_0 \in R^{n+1},\ v_0^T v_0 = 1,$$

$$v_j \in R^{n+1}\ (j=1,\ldots,n).$$

単位長ベクトル v_0 は定数1の役割をするものであり，$x_i x_j$ を $v_i^T v_j$ に，x_j を $v_0^T v_j$ に置き換えたものがベクトル計画緩和問題 (VP) である．ここで，(QP) の実行可能解 $x_1,\ldots,x_n$ に対し，v_0 を適当な単位長ベクトル，$v_j = x_j v_0$ $(j=1,\ldots,n)$ として定義される $v_0, v_1, \ldots, v_n$ は (VP) の実行可能解であり，かつ目的関数値は (QP) のそれと一致する．したがって，$v(\mathrm{VP}) \le v(\mathrm{QP})$ であり，(VP) の最適値は (QP) の最適値の下界を与える．また，同様の議論によって，(VP) の最適解 $v_0^*, v_1^*, \ldots, v_n^*$ の張る空間の次元が1ならば，(QP) の最適解を構成することができる．

(VP) は $(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$ と等価である．次にこの事実を示そう．まず，$v_0, v_1, \ldots, v_n$ を (VP) の実行可能解とし，$v_0, v_1, \ldots, v_n$ を列としてもつ $(n+1)\times(n+1)$ 行列を V とする．さらに $Y = V^T V$ とする．このとき，

- $v_k^T v_\ell = Y_{k\ell}\quad (k,\ell = 0,1,\ldots,n),$
- $v_0^T v_0 = 1 \ \Leftrightarrow\ Y_{00} = 1 \ \Leftrightarrow\ E_{00} \bullet Y = 1,$
- $$\begin{aligned}&\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} Q^i_{k\ell}v_k^T v_\ell + \sum_{j=1}^{n} q^i_j v_0^T v_j + \pi_i \\ &= \sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n} Q^i_{k\ell}v_k^T v_\ell + \sum_{j=1}^{n} q^i_j v_0^T v_j + \pi_i v_0^T v_0 \\ &= P_i \bullet Y \quad (i=0,1,\ldots,m),\end{aligned}$$
- $Y \succeq O$

であるから，Y は $(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$ の実行可能解である．逆に，Y を $(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$ の実行可能解とする．$Y \succeq O$ なので，$Y = V^T V$ となるような $(n+1)\times(n+1)$ 行列 V が存在する．このとき，V の列ベクトル $v_0, v_1, \ldots, v_n$ が (VP) の実行可能解であることを確認することは難しくない．したがって，(VP) と $(\overline{\mathrm{QP}_{L2}})$ は等価な問題であることが示された．

ベクトル計画 (VP) は近似解法の設計に利用されることが多い．その代表例が最大カット問題[8]である．ここでは，最大カット問題への適用を紹介する．その前に，最大カット問題では，(QP) として定式化すると線形項が消えることに注意しなければならない．すなわち，後に定義する最大カット問題 (MC) は

$$(\mathrm{QP})\ \left|\ \begin{array}{ll}\text{目的:} & x^T Q_0 x + \pi_0 \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & x^T Q_i x + \pi_i \le 0 \\ & \qquad (i=1,\ldots,m)\end{array}\right.$$

の形になる．この場合 $(\overline{\mathrm{QP}_L})$ は

$$(\overline{\mathrm{QP}_L})\ \left|\ \begin{array}{ll}\text{目的:} & Q_0 \bullet X + \pi_0 \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & Q_i \bullet X + \pi_i \le 0 \\ & \qquad (i=1,\ldots,m), \\ & X - xx^T \succeq O\end{array}\right.$$

となるが，実は x を消去した問題

$$(\overline{\mathrm{QP}_L})\ \left|\ \begin{array}{ll}\text{目的:} & Q_0 \bullet X + \pi_0 \to \text{最小化} \\ \text{条件:} & Q_i \bullet X + \pi_i \le 0 \\ & \qquad (i=1,\ldots,m), \\ & X \succeq O\end{array}\right.$$

と等価になることは容易に示される．

以上を考慮しながら，まずは最大カット問題を定義する．無向グラフ $G=(V,E)$ および各枝 $e=\{i,j\}\in E$ に非負の重み $W_e = W_{ij} = W_{ji}$ が与えられている．また，頂点の部分集合 $S \subseteq V$ に対するカットを $\delta(S) = \{\{i,j\}\in E \mid |\{i,j\}\cap S| = 1\}$ と定義し，カットの重みを $\sum_{e\in\delta(S)} W_e$ とする．このとき，重み最大のカットを求める問題を最大カット問題という．最大カット問題の定式化は

$$(\mathrm{MC})\ \left|\ \begin{array}{ll}\text{目的:} & \dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{\{i,j\}\in E} W_{ij}(1 - x_i x_j) \to \text{最大化} \\ \text{条件:} & x_i \in \{-1,1\}\ \ (i \in V).\end{array}\right.$$

で与えられる．すなわち，x^* を (MC) の最適解とすると，$S^* = \{i \in V \mid x_i^* = 1\}$ に対するカットが最大カット問題の最適解になる．(MC) は

$$\text{(MC)}\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & \dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{\{i,j\}\in E} W_{ij}(1-x_ix_j)\to\text{最大化}\\ \text{条件:} & x_i^2=1\ \ (i\in V)\end{array}\right.$$

と変形でき，確かに線形項が存在しないので，

$$(\overline{\text{MC}})\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & \dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{\{i,j\}\in E} W_{ij}(1-X_{ij})\to\text{最大化}\\ \text{条件:} & X_{ii}=1\ \ (i\in V),\\ & \boldsymbol{X}\succeq\boldsymbol{O}\end{array}\right.$$

が半正定値計画緩和問題，

$$\text{(MCV)}\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & \dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{\{i,j\}\in E} W_{ij}(1-\boldsymbol{v}_i^T\boldsymbol{v}_j)\to\text{最大化}\\ \text{条件:} & \boldsymbol{v}_i^T\boldsymbol{v}_i=1\ \ (i\in V),\\ & \boldsymbol{v}_i\in R^n\end{array}\right.$$

がベクトル計画緩和問題となる $(n=|V|)$．詳細は [8, 15] をご覧いただきたい．

4.3 固有値

行列 $\boldsymbol{A}\in\mathcal{S}^n$ の固有値を非増加順に

$$\lambda_1(\boldsymbol{A})\geq\ldots\geq\lambda_n(\boldsymbol{A})$$

と記す．$\boldsymbol{A}$ が半正定値であるための必要十分条件は，$\lambda_n(\boldsymbol{A})\geq 0$ となることであった．はじめに $\lambda_1(\boldsymbol{A})$ の計算を考える．

まず，比較的よく知られている公式として，

$$\lambda_1(\boldsymbol{A})=\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}}=\max_{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}=1}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

がある (Rayleigh-Ritz[9])．つまり，$\lambda_1(\boldsymbol{A})$ は 2 次計画問題

$$\text{(RR)}\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\to\text{最大化}\\ \text{条件:} & \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}=1\end{array}\right.$$

の最適値に一致する．次に，より直接的な定式化

$$\text{(EIG)}\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & z\to\text{最小化}\\ \text{条件:} & z\geq\lambda_i(\boldsymbol{A})\ \ (i=1,\ldots,n)\end{array}\right.$$

を考える．この問題自体は意味をなさないように見えるが，実は半正定値計画問題

$$\text{(EIG)}\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & z\to\text{最小化}\\ \text{条件:} & z\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\succeq\boldsymbol{O}\end{array}\right.$$

と等価であることが示される ($\boldsymbol{I}$ は単位行列)．実際，$\boldsymbol{A}$ の固有値 λ に対して $z-\lambda$ は $z\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$ の固有値となることに注意すると，

$$\lambda_n(z\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=z-\lambda_1(\boldsymbol{A})$$

である．したがって，

$$\begin{aligned}z\geq\lambda_1(\boldsymbol{A})\quad&\Longleftrightarrow\quad z-\lambda_1(\boldsymbol{A})\geq 0\\ &\Longleftrightarrow\quad\lambda_n(z\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})\geq 0\\ &\Longleftrightarrow\quad z\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\succeq\boldsymbol{O}\end{aligned}$$

となる．(EIG) の双対問題は

$$\text{(EIGD)}\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & \boldsymbol{A}\bullet\boldsymbol{X}\to\text{最大化}\\ \text{条件:} & \boldsymbol{I}\bullet\boldsymbol{X}=1,\\ & \boldsymbol{X}\succeq\boldsymbol{O}\end{array}\right.$$

である．興味深いことに，(RR) の半正定値計画緩和 $(\overline{\text{RR}})$ は (EIGD) に一致する．すなわち，半正定値計画の弱双対定理を用いると

$$\begin{aligned}\lambda_1(\boldsymbol{A})=v(\text{RR})\quad&\leq\quad v(\overline{\text{RR}})\\ &=\quad v(\text{EIGD})\leq v(\text{EIG})=\lambda_1(\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

となって，上記の値はすべて一致することがわかった．(ただし，(EIG) と (EIGD) は強双対定理が成立するための条件を満たしているので，$v(\text{EIGD})=v(\text{EIG})$ は上記とは独立に確認できる)．

続いて，固有値が目的関数に現れる，次のような問題を考えよう．

$$\text{(EP)}\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & \lambda_1(\boldsymbol{X})\to\text{最小化}\\ \text{条件:} & \boldsymbol{A}_k\bullet\boldsymbol{X}=b_k\ \ (k=1,\ldots,m).\end{array}\right.$$

つまり，最大固有値を最小にするような対称行列 $\boldsymbol{X}$ を求める問題である．そしてこの場合にも

$$\text{(EP)}\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & z\to\text{最小化}\\ \text{条件:} & z\geq\lambda_i(\boldsymbol{X})\ \ (i=1,\ldots,n),\\ & \boldsymbol{A}_k\bullet\boldsymbol{X}=b_k\ \ (k=1,\ldots,m)\end{array}\right.$$

と変形すれば

$$\text{(EP)}\left|\begin{array}{ll}\text{目的:} & z\to\text{最小化}\\ \text{条件:} & z\boldsymbol{I}-\boldsymbol{X}\succeq\boldsymbol{O},\\ & \boldsymbol{A}_k\bullet\boldsymbol{X}=b_k\ \ (k=1,\ldots,m)\end{array}\right.$$

という半正定値計画緩和問題と等価であることがわかる．(EP) 自身は凸計画問題であり，NP-困難な問題の上界値計算などに現れる．今回は，最大カット問題に対する上界値計算を紹介する．

そのために，無向グラフ $G=(V,E)$ および非負重み W_e $(e\in E)$ が与えられたとき，$e\notin E$ に対して $W_e=0$ とする．これによって任意の頂点対 $i,j\in E$ $(i\neq j)$ に重みを付加するが，このように変更しても問題は変わらない．また，$i\neq j$ のとき $L_{ij}=-W_{ij}$，$L_{ii}=\sum_{j\neq i}W_{ij}$ として定義される行列 $\boldsymbol{L}\in\mathcal{S}^n$ を導

入する．$\boldsymbol{L}$ は Laplacian 行列とよばれている．さらに，$\boldsymbol{u}=(u_1,\ldots,u_n)^T$ に対して，(i,i) 要素を u_i とする対角行列 $\mathrm{Diag}(\boldsymbol{u})$ を定義する．このとき，

$$
\text{(MCE)}\left|\begin{array}{ll} \text{目的:} & \frac{n}{4}\lambda_1(\boldsymbol{L}+\mathrm{Diag}(\boldsymbol{u}))\rightarrow \text{最小化} \\ \text{条件:} & \sum_{i=1}^n u_i = 0 \end{array}\right.
$$

は，最大カット問題に対する上界値を与えることが示されている [3]．この問題は，半正定値計画問題

$$
\text{(MCE)}\left|\begin{array}{ll} \text{目的:} & \frac{n}{4}z \rightarrow \text{最小化} \\ \text{条件:} & z\boldsymbol{I}-(\boldsymbol{L}+\mathrm{Diag}(\boldsymbol{u}))\succeq \boldsymbol{O}, \\ & \sum_{i=1}^n u_i = 0 \end{array}\right.
$$

になるが，(MCE) が $(\overline{\text{MC}})$ の双対問題と等価であることが [8, 16] に示されている．

固有値を用いた最適化問題は歴史があり，Donath-Hoffman は 1973 年の論文 [4] において，グラフ分割問題 (最小化問題) に対し，固有値を用いた下界値を提案している．固有値を用いた最適化問題が半正定値計画緩和に変換できることは，[1] に詳しく述べられている．[1] では，$\lambda_1(\boldsymbol{X})+\cdots+\lambda_k(\boldsymbol{X})$ の最小化問題など，(EP) よりも広いクラスの問題が半正定値計画問題に変換できることを示している．

5. おわりに

今回は，(QP_L) に対する緩和問題として半正定値計画緩和問題 $(\overline{\text{QP}_L})$ を導入した．また，これに加えて線形計画緩和問題

$$
(\widetilde{\text{QP}_L})\left|\begin{array}{ll} \text{目的:} & \boldsymbol{Q}_0\bullet\boldsymbol{X}+\boldsymbol{q}_0^T\boldsymbol{x}+\pi_0\rightarrow \text{最小化} \\ \text{条件:} & \boldsymbol{Q}_i\bullet\boldsymbol{X}+\boldsymbol{q}_i^T\boldsymbol{x}+\pi_i\leq 0 \\ & \qquad\qquad (i=1,\ldots,m) \end{array}\right.
$$

を導入すると，より一層広がりを持った議論ができる．しかし，$(\widetilde{\text{QP}_L})$ は本連載の枠からはみ出すため，今回は取りあげなかった．興味ある方は [6] およびその参考文献等をご覧いただきたい．

次回は，理論的にもそして歴史的にも重要な，最大安定集合問題の話題を取りあげる予定である．

参考文献

[1] Alizadeh W.F.: Interior point methods in semidefinite programming with application to combinatorial optimization. *SIAM J. on Optimization*, **5** (1995) 13–51.

[2] Balas E., Ceria S. and Cornuéjols G.: A lift-and-project cutting plane algorithm for mixed 0-1 programs. *Math. Prog.*, **58** (1993) 295–324.

[3] Delorme C. and Poljak S.: Laplacian eigenvalues and the maximun cut problem. *Math. Prog.*, **62** (1993) 557–574.

[4] Donath W.E. and Hoffman A.J.: Lower bounds for the partitioning of graphs. *IBM J. of Research and Development*, **17** (1973) 420–425.

[5] Fujie T. and Kojima M.: Semidefinite programming relaxation for nonconvex quadratic programs. *J. of Global Optimizaion*, **10** (1997) 367–380.

[6] 藤江哲也: "線形化と LP 緩和／SDP 緩和", 第 11 回 RAMP シンポジウム論文集, 35–48 (1999).

[7] 藤沢克樹: "SDPA(半正定値計画問題に対するソフトウェア)", オペレーションズ・リサーチ, **45** (2000) 124–131.

[8] Goemans M.X. and Williamson D.P.: Improved approximation algorithms for maximum cut and satisfiability problems using semidefinite programming. *J. of ACM*, **42** (1995) 1115–1145.

[9] Horn R.A. and Johnson C.R.: "Matrix Analysis", Cambridge University Press (1985).

[10] 小島政和: "半正定値計画の組合せ最適化への応用に向けて", オペレーションズ・リサーチ, **42** (1997) 216–221.

[11] 小島政和: "半正定値計画とその組合せ最適化への応用", 離散構造とアルゴリズム V (藤重悟 編), 近代科学社, 203–249 (1998).

[12] Kojima M. and Tunçel L.: Cones of matrices and successive convex relaxations of nonconvex sets. *SIAM J. on Optimization*, **10** (2000) 750–778.

[13] Lovász L.: On the Shannon capacity of a graph. *IEEE Trans. Inform. Theory*, **25** (1979) 1–7.

[14] Lovász L. and Schrijver A.: Cones of matrices and set functions and 0-1 optimization. *SIAM J. on Optimization*, **1** (1991) 166–190.

[15] 松井知己: "半正定値計画を用いた最大カット問題の .878 近似解法", オペレーションズ・リサーチ, **45** (2000) 140–145.

[16] Poljak S. and Rendl F.: Nonpolyhedral relaxations of graph-bisection problems. *SIAM J. on Optimization*, **5** (1995) 467–487.

[17] Shor N.Z.: Quadratic optimization problems. *Soviet Journal of Computer and Systems Sciences*, **25** (1987) 1–11.