数理解析研究所講究録
第 1829 巻 2013 年 102-112

凹費用関数をもつ輸送問題に対する2乗和多項式緩和

神奈川大学 水谷友彦[1]
Kanagawa University Tomohiko Mizutani

東京工業大学 山下真[2]
Tokyo Institue of Technology Makoto Yamashita

概要

本稿は [9] の概説である。[9] では凹費用関数を持つ輸送問題 (CCTP) に対して 2 乗和多項式に基づく半正定値計画緩和 (SDP 緩和) を提案した。その特徴は以下の通りである。p は生産地の数、q は需要地の数、ω は緩和強度を表すとする。(1) SDP 緩和問題の行列変数の大きさは $O((\min\{p,q\})^{\omega-1})$, $\omega\geq 2$ となる。(2) 緩和強度 ω を大きくすると、SDP 緩和問題の最適値は CCTP の大域的な最適値に収束する。(3) どんな ω に対しても、SDP 緩和問題とその双対問題の間に双対ギャップは存在しない。本稿ではこのような特徴を持つ SDP 緩和の構築の仕方について解説する。

1 はじめに

凹費用関数を持つ輸送問題 (CCTP) とは以下のような問題である。生産地 $i\in I:=\{1,\ldots,p\}$ から需要地 $j\in J:=\{1,\ldots,q\}$ に製品を送るとき、輸送量 x_{ij} に対して費用は凹関数 $f_{ij}:\mathbb{R}\rightarrow\mathbb{R}$ で定まるとする。このとき、CCTP は生産、需要に関する制約の下で総費用が最小となるような輸送量を求める問題であり、次のように定式化される。

$$
(\mathbf{Q}):\left|\begin{array}{ll}
\text{Minimize} & \displaystyle\sum_{i\in I}\sum_{j\in J}f_{ij}(x_{ij}) \\
\text{subject to} & \displaystyle\sum_{j\in J}x_{ij}=a_i,\ i\in I,\ \text{and}\ \sum_{i\in I}x_{ij}=b_j,\ j\in J, \\
 & x_{ij}\geq 0,\ i\in I,\ j\in J
\end{array}\right.
$$

本稿では特に f_{ij} が 2 次の凹多項式関数である場合を考える。

この問題の特徴は f_{ij} が凹関数であることにある。実社会では、いわゆる規模の経済性によって、輸送量が増加するにつれて費用が減少するということが起こる。このような状況を反映させるために f_{ij} を凹関数としている。実際、CCTP は輸送システム、工場建設計画、生産計画などの実問題を定式化するために用いられている [2, 4, 6]。f_{ij} が凹関数で

[1]E-mail: mizutani@kanagawa-u.ac.jp
[2]E-mail: Makoto.Yamashita@is.titech.ac.jp

あることがこの問題を解くことを難しくさせている。実際、CCTP は NP 困難な問題であることが知られており [4]、大域的な最適解を求めることは難しい。

CCTP を解くための手法として、Lasserre[7] によって提案された多項式最適化問題 (POP) に対する半正定値計画緩和 (SDP 緩和) の枠組みを利用する。この緩和手法は非負多項式を 2 乗和多項式で置き換えることで得られるので、2 乗和多項式緩和 (SOS 緩和) とも呼ばれる。この手法では、緩和強度を高めると、SDP 緩和問題の最適値は POP の大域的な最適値に収束するということが理論的に保証されている。一方で、緩和強度を高めると SDP 緩和問題の規模が非常に大きくなり、実際には解くことが困難になるという課題がある。この課題に対して、Waki ら [11] は POP がある種の疎構造を有している場合、その構造を利用することで規模が小さい SDP 緩和問題を構築する手法を提案した。Lasserre の SDP 緩和手法に対して、この手法は疎な SDP 緩和手法と呼ばれる。

本稿では CCTP を POP とみなし、Waki らによって提案された疎な SDP 緩和手法を適用する。一般的には CCTP は望ましい疎構造を有していない。本稿では CCTP に対して変数変換を施すと疎構造を持つ問題に変換できることを示す。そして、その構造を観察することで以下のような特徴を持つ SDP 緩和問題を構築できることを説明する。正整数 ω を緩和強度とする。

(1) SDP 緩和問題の行列変数の大きさは $O((\min\{p,q\})^{\omega-1})$, $\omega \geq 2$ となる。

(2) 緩和強度 ω を大きくすると、SDP 緩和問題の最適値は CCTP の大域的な最適値に収束する。

(3) どんな ω に対しても、SDP 緩和問題とその双対問題の間に双対ギャップは存在しない。

(**Q**) における f_{ij} が凹平方関数である場合も、上記と同じ特徴を持った SDP 緩和問題が構築できる [9]。

本稿は 4 節からなる。まず、第 2 節において疎な SDP 緩和とその収束定理について説明する。第 3 節ではボックス制約をもつ 2 次計画問題に対する疎な SDP 緩和問題の性質をまとめる。第 4 節では CCTP に対してどのように変数変換を施すか説明した後、上記のような特徴を持つ SDP 緩和問題が構築できることを説明する。

1.1 記号や用語の定義

本稿では実数の係数と n 個の変数で構成される次のような多項式

$$f = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{F}} f_{\boldsymbol{\alpha}} \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{\alpha}},$$

を考え、このような f の集合を $\mathbb{R}[\boldsymbol{x}]$ と書く。$\boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_n)$ と $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ とし、$\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{\alpha}}$ は単項式 $x_1^{\alpha_1} \dots x_n^{\alpha_n}$ を表している。$\mathbb{Z}_+^n$ を n 次元の非負整数の集合とする。$\mathcal{F}$ は $\mathbb{Z}_+^n$ の

部分集合で、f のサポートと呼ばれる。f のサポートは $\mathrm{supp}(f)$ と表すことがある。f の次数は $\max\{|\boldsymbol{\alpha}| : \boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{F}\}$ で、これを $\deg(f)$ と書く。ここで、$|\cdot|$ はベクトルの要素の和を表す。

$\mathcal{G} \subseteq \mathbb{Z}^n_+$ に対して、$\mathbb{R}[\boldsymbol{x}, \mathcal{G}] := \{f \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}] : \mathrm{supp}(f) \subseteq \mathcal{G}\}$ とする。また、$C \subseteq \{1, \dots, n\}$ に対して、$\mathcal{A}(C) := \{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}^n_+ : \alpha_i = 0 \text{ if } i \notin C\}$ とする。これは変数 $x_i,\ i \in C$ で構成される f を $f \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}(C)]$ と表す際に使われる。

$C \subseteq \{1, \dots, n\}$ と正整数 ω に対して $\mathcal{A}^\omega(C) := \{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{Z}^n_+ : \alpha_i = 0 \text{ if } i \notin C \text{ and } |\boldsymbol{\alpha}| \leq \omega\}$ とする。これは次数が ω 以下の $f \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}(C)]$ を $f \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}^\omega(C)]$ と表す際に使われる。

$\phi \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}]$ が $f_1, \dots, f_r \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}]$ を用いて $\phi = f_1^2 + \cdots + f_r^2$ と書けるとき、ϕ は**SOS 多項式**と呼ばれる。このような SOS 多項式 ϕ の集合を $\Sigma[\boldsymbol{x}]$ で表す。SOS 多項式 $\phi \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}]$ で、特に $f_1, \dots, f_r \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}, \mathcal{G}]$ を用いて $\phi = f_1^2 + \cdots + f_r^2$ と書けるものを $\Sigma[\boldsymbol{x}, \mathcal{G}]$ で表す。

SOS 多項式は半正定値対称行列を用いて表すことができる。$\mathcal{G} \subseteq \mathbb{Z}^n_+$ に対して、$|\mathcal{G}|$ 次元ベクトル $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, \mathcal{G}) := (\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{\alpha}} : \boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{G})$ と定義し、また、$|\mathcal{G}| \times |\mathcal{G}|$ 対称行列 $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}, \mathcal{G}) := \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, \mathcal{G})\boldsymbol{u}^\top(\boldsymbol{x}, \mathcal{G})$ と定義する。$|\mathcal{G}| \times |\mathcal{G}|$ 対称行列の集合を $\mathbb{S}(\mathcal{G})$ で表し、特に半正定値対称行列であるものを $\mathbb{S}_+(\mathcal{G})$ で表す。このとき、

$$\phi \in \Sigma[\boldsymbol{x}, \mathcal{G}] \iff \exists \boldsymbol{Y} \in \mathbb{S}_+(\mathcal{G}),\ \phi = \langle \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}, \mathcal{G}), \boldsymbol{Y} \rangle. \tag{1}$$

が成立する [10, 5]。ここで、$\langle \cdot, \cdot \rangle$ はフロベニウスノルムを表す。例えば、対称行列 $\boldsymbol{X}$ と $\boldsymbol{Y}$ に対して、$\langle \boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y} \rangle = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{Y})$ となる。

2　疎なSDP緩和の収束定理

Waki ら [11] によって提案された POP に対する疎な SDP 緩和とその収束定理について説明する。次のような POP (**P**) を考える。

$$(\mathbf{P}) : \left| \ \text{Minimize} \quad f(\boldsymbol{x}) \quad \text{subject to} \quad g_k(\boldsymbol{x}) \geq 0,\ k = 1, \dots, m \right.$$

ここで $f, g_1, \dots, g_m \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}]$ である。この (**P**) に対して、以下の条件を満たす集合族 $\Delta = \{C_1, \dots, C_\ell\}$ を用意する。

条件 1 $C_1, \dots, C_\ell \subseteq \{1, \dots, n\}$ とする。

1-1. $j = 2, \dots, \ell$ に対して、$C_i \supseteq C_j \cap (C_1 \cup C_2 \cup \cdots \cup C_{j-1})$ のような $C_i,\ i \in \{1, \dots, j-1\}$ が存在する。

1-2. f は $f_i \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}(C_i)]$ を用いて、$f = \displaystyle\sum_{i=1}^{\ell} f_i$ と表せる。

1-3. $g_k,\ k \in K_i$ は $g_k \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}(C_i)]$ と表せる。ここで $K_i \subseteq \{1, \dots, m\},\ i = 1, \dots, \ell$ は互いに疎な集合で、$\cup_{i=1}^{\ell} K_i = \{1, \dots, m\}$ となる。

条件 1-1 の成立は $C_1, \ldots, C_\ell$ の並べ方に依存する。コーダルグラフにおける極大クリーク族は必ずこの条件を満たし、このような性質は running intersection property と呼ばれている [1]。条件 1-3 において $\Delta = \{C_1, \ldots, C_\ell\}$ によって定まる集合族 $\{K_1, \ldots, K_\ell\}$ を Λ によって表す。

POP に対する疎な SDP 緩和は条件 1 を満たす $\Delta = \{C_1, \ldots, C_\ell\}$ とそれに付随する $\Lambda = \{K_1, \ldots, K_\ell\}$ を用いて構築する。まず、Δ と Λ を用いて $(\mathbf{P})$ の一般化ラグランジュ関数 L を導入し、次に、それから導かれるラグランジュ双対問題を考える。$\omega_0 := \lceil \deg(f)/2 \rceil$, $\omega_k := \lceil \deg(g_k)/2 \rceil$ に対して、疎な SDP 緩和の緩和強度 $\omega \in \mathbb{N}$ を $\omega \geq \max\{\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_m\}$ となるように選ぶ。制約式 g_k の乗数を $\phi_{ik} \in \Sigma[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}^{\omega-\omega_k}(C_i)]$ として一般化ラグランジュ関数 L を次のように定義する。

$$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\phi}) = f(\boldsymbol{x}) - \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{k \in K_i} \phi_{ik}(\boldsymbol{x}) g_k(\boldsymbol{x}) \text{ with } \boldsymbol{\phi} \in \Phi^\omega$$

ここで $\Phi^\omega := \{(\phi_{ik} : k \in K_i,\ i = 1, \ldots, \ell) : \phi_{ik} \in \Sigma[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}^{\omega-\omega_k}(C_i)]\}$ である。すると、$(\mathbf{P})$ のラグランジュ双対問題は

$$\text{Maximize} \quad \eta \quad \text{subject to} \quad L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\phi}) - \eta \geq 0 \quad \text{for all } \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \text{and} \quad \boldsymbol{\phi} \in \Phi^\omega \tag{2}$$

と書ける。この制約条件は多項式 $L - \eta$ が $\mathbb{R}^n$ 上で非負であることを意味している。それを $L - \eta$ が SOS 多項式の和 $L - \eta = \sum_{i=1}^{\ell} \phi_i$, $\phi_i \in \Sigma[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}^\omega(C_i)]$ で書けるという条件に置き換える。すると、以下の問題が得られる。

$$\text{Maximize} \quad \eta \quad \text{subject to} \quad f(\boldsymbol{x}) - \eta = \sum_{i=1}^{\ell} (\phi_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{k \in K_i} \phi_{ik}(\boldsymbol{x}) g_k(\boldsymbol{x})) \tag{3}$$

$L - \eta = \sum_{i=1}^{\ell} \phi_i$ は $L - \eta$ が $\mathbb{R}^n$ 上で非負であることを意味するが、その逆は成り立たない。したがって、(2) から (3) への変形は等価ではない。(3) は $(\mathbf{P})$ の緩和問題になっており、(3) は $(\mathbf{P})$ に対する**疎な二乗和多項式緩和** (疎な SOS 緩和) と呼ばれる。(3) において多項式の集合 $\mathcal{M}_i := \{\phi_i + \sum_{k \in K_i} \phi_{ik} g_k : \phi_i, \phi_{ik} \in \Sigma[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}(C_i)]\}$ を定義する。$\mathcal{M}_i$ は g_k, $k \in K_i$ によって生成される **quadratic module** と呼ばれる。$\mathcal{M}_i$ を用いると (3) は

$$\text{Maximize} \quad \eta \quad \text{subject to} \quad f - \eta \in \mathcal{M}_1 + \cdots + \mathcal{M}_\ell \tag{4}$$

と書き直すことができる。

SOS 多項式 ϕ_i, ϕ_{ij} は半正定値対称行列を用いて表せるという事実 (1) を用いると、疎な SOS 緩和問題 (3) は以下のような形の SDP として書き直せる。

$$(\mathbf{P}^\omega) : \left| \begin{array}{ll} \text{Maximize} & \langle \boldsymbol{C}, \boldsymbol{X} \rangle \\ \text{subject to} & \mathcal{A}(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{b}, \\ & \boldsymbol{X} \in \Pi_{i=1}^{\ell} \mathbb{S}_+(\mathcal{A}^\omega(C_i)) \times \Pi_{i=1}^{\ell} \Pi_{k \in K_i} \mathbb{S}_+(\mathcal{A}^{\omega-\omega_k}(C_i)) \end{array} \right.$$

ここで$\boldsymbol{C}$は対称行列、$\boldsymbol{b}$はベクトル、$\mathcal{A}$は半正定値対称行列集合から実ベクトル集合への線形写像である。本論文では$(\mathbf{P}^{\omega})$を$(\mathbf{P})$に対する**疎なSDP緩和**と呼ぶことにする。疎なSDP緩和問題$(\mathbf{P}^{\omega})$は疎なSOS緩和問題(3)、及びそれを$\mathcal{M}_i$を用いて書きなおした問題(4)と等価な問題である。$(\mathbf{P}^{\omega})$における行列変数$\boldsymbol{X}$はブロック行列変数$\boldsymbol{X}^{(i)} \in \mathbb{S}_+(\mathcal{A}^{\omega}(C_i))$と$\boldsymbol{X}^{(i,k)} \in \mathbb{S}_+(\mathcal{A}^{\omega-\omega_k}(C_i))$との直積

$$\boldsymbol{X} = \prod_{i=1}^{\ell} \boldsymbol{X}^{(i)} \times \prod_{i=1}^{\ell} \prod_{k \in K_i} \boldsymbol{X}^{(i,k)}$$

で表される。$\boldsymbol{X}^{(i)} \in \mathbb{S}_+(\mathcal{A}^{\omega}(C_i))$のサイズは

$$\begin{aligned} |\mathcal{A}^{\omega}(C_i)| &= \binom{|C_i| + \omega}{\omega} \\ &= O(|C_i|^{\omega}) \end{aligned}$$

で、$\boldsymbol{X}^{(i,k)} \in \mathbb{S}_+(\mathcal{A}^{\omega-\omega_k}(C_i))$のサイズは

$$\begin{aligned} |\mathcal{A}^{\omega-\omega_k}(C_i)| &= \binom{|C_i| + \omega - \omega_k}{\omega - \omega_k} \\ &= O(|C_i|^{\omega-\omega_k}) \end{aligned}$$

となるので、最も大きいブロック行列変数のサイズは$O(|C_i|^{\omega})$である。したがって、要素数が少ない集合$C_i,\ i = 1, \ldots, \ell$から構成される$\Delta$を見つけることができると、規模が小さいSDP緩和問題が構築できることが分かる。例えば、$(\mathbf{P})$における多項式$f, g_k,\ k = 1, \ldots, m$を構成する単項式の数が少ない場合、つまり、単項式が疎である場合、$C_i,\ i = 1, \ldots, \ell$の要素の個数が少なくなる傾向がある。集合$C = \{1, \ldots, n\}$は条件1を自明に満たすことが分かる。LasserreのSDP緩和[7]はWakiらの疎なSDP緩和問題において$\Delta = \{C\}$としたものに対応している。

$(\mathbf{P}^{\omega})$の双対問題を$(\mathbf{P}^{\omega}_*)$と書く。また、$(\mathbf{P}^{\omega})$の最適値を$\zeta(\mathbf{P}^{\omega})$、$(\mathbf{P}^{\omega}_*)$の最適値を$\zeta(\mathbf{P}^{\omega}_*)$、$(\mathbf{P})$の大域的な最適値を$\zeta$と書く。$(\mathbf{P})$の$g_k,\ k \in K_i$によって生成されるquadratic module $\mathcal{M}_i$が次の条件を満たすとする。このとき、$\omega \to \infty$とすると、$\zeta(\mathbf{P}^{\omega})$と$\zeta(\mathbf{P}^{\omega}_*)$は$\zeta$に収束することが知られている。

条件 2 $\mathcal{M}_i,\ i = 1, \ldots, \ell$はアルキメデス的である。つまり、$i = 1, \ldots, \ell$に対して、$\theta_i - \sum_{j \in C_i} x_j^2 \in \mathcal{M}_i$のような正整数$\theta_i$が存在する。

定理 1 ([3, 8]) 条件1と2が成立する。このとき、$\lim_{\omega \to \infty} \zeta(\mathbf{P}^{\omega}) = \lim_{\omega \to \infty} \zeta(\mathbf{P}^{\omega}_*) = \zeta$となる。

定理1では、$(\mathbf{P})$の大域的な最適値を計算するためには$(\mathbf{P}^{\omega})$の緩和強度ωを十分大きくすることを示唆している。しかし、経験的にはωの値は2あるいは3程度で$(\mathbf{P})$の大域的な最適値、及び最適解が得られることが多いことが知られている[11]。

3 ボックス制約を持つ2次計画問題に対する疎なSDP緩和の性質

ボックス制約を持つ2次計画問題(QP)を考える。

$$
\begin{array}{lll}
\text{Minimize} & f(\boldsymbol{x}) & \\
\text{subject to} & g_k(\boldsymbol{x}) \geq 0, & k = 1, \ldots, m, \\
 & 0 \leq x_j \leq a_j, & j = 1, \ldots, n
\end{array} \tag{5}
$$

f は n 変数の2次多項式 $f \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}]$, $\deg(f) = 2$ で、g_k, $k = 1, \ldots, m$ は n 変数の1次多項式 $g_k \in \mathbb{R}[\boldsymbol{x}]$, $\deg(g_k) = 1$ である。(5) に対して条件1を満たす集合族 $\Delta = \{C_1, \ldots, C_\ell\}$ を用意する。そして、(5) に対して適切に制約式 $x_j \geq 0$, $a_j - x_j \geq 0$ を追加し、次のような冗長な表現を含んだ問題を考える。

$$
\begin{array}{llr}
\text{Minimize} & f(\boldsymbol{x}) & \\
\text{subject to} & g_k(\boldsymbol{x}) \geq 0, & k = 1, \ldots, m, \\
 & h_j^\ell(\boldsymbol{x}) \geq 0 \quad \text{and} \quad h_j^u(\boldsymbol{x}) \geq 0, & j \in C_i,\ i = 1, \ldots, \ell
\end{array} \tag{6}
$$

ここで $h_j^\ell(\boldsymbol{x}) := x_j$、$h_j^u(\boldsymbol{x}) := a_j - x_j$ としている。

$\Delta = \{C_1, \ldots, C_\ell\}$ とそれに付随して得られる $\Lambda = \{K_1, \ldots, K_\ell\}$ を考える。g_k, $k \in K_i$、及び h_j^ℓ, h_j^u, $j \in C_i$ から生成される quadratic module

$$
\mathcal{M}_i = \{\phi_i + \sum_{k \in K_i} \phi_{ik} g_k + \sum_{j \in C_i} \phi_{ij}^\ell h_j^\ell + \sum_{j \in C_i} \phi_{ij}^u h_j^u : \phi_i \in \Sigma[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}^\omega(C_i)],\ \phi_{ik}, \phi_{ij}^\ell, \phi_{ij}^u \in \Sigma[\boldsymbol{x}, \mathcal{A}^{\omega-1}(C_i)]\} \tag{7}
$$

を用いると、(6) に対する疎なSOS緩和は

$$
\text{Maximize} \quad \eta \quad \text{subject to} \quad f - \eta \in \mathcal{M}_1 + \cdots + \mathcal{M}_\ell
$$

と書ける。この問題に対して等価な変形を施すことで得られる (6) に対する疎なSDP緩和問題を $(\mathbf{P}^\omega)$ と書く。

補題 1 QP (6) とそれに対する疎なSDP緩和問題 $(\mathbf{P}^\omega)$ は以下のような性質を持つ。

1-1. ([9] の Lemma 2) quadratic module $\mathcal{M}_i$, $i = 1, \ldots, \ell$ (7) はアルキメデス的である。

1-2. ([9] の Lemma 3) (6) の実行可能領域が内点を持つとする。このとき、どんな ω に対しても、$(\mathbf{P}^\omega)$ とその双対問題 $(\mathbf{P}_*^\omega)$ との間に双対ギャップは存在しない。

1-3. ([9] の Proposition 3) $\omega \geq 2$ とする。このとき $(\mathbf{P}^\omega)$ の最も大きいブロック行列変数のサイズは $O(|C_i|^{\omega-1})$ となる。

4 変数変換を施したCCTPに対する疎なSDP緩和

本稿ではCCTP(**Q**)に対して次のような仮定をする。

仮定 1 (**Q**) は次の 2 つの条件を満たす。

1-1. $a_i,\ b_j > 0,\ i \in I,\ j \in J$

1-2. $\sum_{i \in I} a_i = \sum_{j \in J} b_j$

最初の仮定は一般性を失わずに成立する。もし、$a_i = 0$ であれば $x_{i1} = \cdots = x_{iq} = 0$ で、また、$b_j = 0$ であれば $x_{1j} = \cdots = x_{pj} = 0$ となるので、これらの変数を除けば最初の仮定は成立する。2 番目の仮定は (**Q**) が実行可能であることを保証している。

4.1 変数変換

(**Q**) の等式制約

$$\begin{cases} \sum_{j \in J} x_{ij} = a_i, & i \in I, \\ \sum_{i \in I} x_{ij} = b_j, & j \in J \end{cases} \tag{8}$$

に対して、$\boldsymbol{x} = (x_{ij} : i \in I,\ j \in J) \in \mathbb{R}^{pq}$ から $\boldsymbol{y} = (y_{ij} : i \in I,\ j \in J) \in \mathbb{R}^{pq}$ への変数変換

$$\begin{cases} x_{ij} = y_{ij} - y_{i,j+1}, & i \in I,\ j \in J \setminus \{q\}, \\ x_{iq} = y_{iq}, & i \in I \end{cases} \tag{9}$$

を施す。これは可逆な変換で、実際に

$$y_{ij} = x_{ij} + \cdots + x_{iq}, \quad i \in I,\ j \in J$$

となる。この変換を施すと、(8) は

$$\begin{cases} y_{i1} = a_i, & i \in I, \\ \sum_{i \in I} (y_{ij} - y_{i,j+1}) = b_j, & j \in J \setminus \{q\},\ \text{and}\ \sum_{i \in I} y_{iq} = b_q \end{cases}$$

となる。2 番目の等式は $\bar{b}_j := \sum_{k=j}^{q} b_k$ を用いて $\sum_{i \in I} y_{ij} = \bar{b}_j,\ j \in J$ と書き直せるので、結局、(8) は

$$\begin{cases} y_{i1} = a_i, & i \in I, \\ \sum_{i \in I} y_{ij} = \bar{b}_j, & j \in J \end{cases} \tag{10}$$

と変換される。

更に同様な変数変換を (10) に適用する。(10) に対して $\boldsymbol{y} = (y_{ij} : i \in I,\ j \in J) \in \mathbb{R}^{pq}$ から $\boldsymbol{z} = (z_{ji} : i \in I,\ j \in J) \in \mathbb{R}^{pq}$ への変数変換

$$\begin{cases} y_{ij} = z_{ji} - z_{j,i+1}, & i \in I \setminus \{p\},\ j \in J, \\ y_{pj} = z_{jp}, & j \in J \end{cases} \tag{11}$$

を施すと、

$$\begin{cases} z_{1i} - z_{1,i+1} = a_i, & i \in I \setminus \{p\},\ \text{and}\ z_{1p} = a_p, \\ z_{j1} = \bar{b}_j, & j \in J \end{cases}$$

が得られる。1 番目の等式は $\bar{a}_i := \sum_{k=i}^{p} a_k$ を用いて $z_{1i} = \bar{a}_i,\ i \in I$ と書き直せるので、結局、(10) は

$$\begin{cases} z_{1i} = \bar{a}_i, & i \in I, \\ z_{j1} = \bar{b}_j, & j \in J \end{cases} \tag{12}$$

と変換される。

(8) は (12) と変数変換

$$(u_{ji}(\boldsymbol{z}) =)\ x_{ij} = \begin{cases} (z_{ji} - z_{j,i+1}) - (z_{j+1,i} - z_{j+1,i+1}), & i \in I \setminus \{p\}, & j \in J \setminus \{q\}, \\ z_{qi} - z_{q,i+1}, & i \in I \setminus \{p\}, & j = q, \\ z_{jp} - z_{j+1,p}, & i = p, & j \in J \setminus \{q\}, \\ z_{qp} & i = p, & j = q \end{cases}$$

の下で等価である。この変数変換を $u_{ji}(\boldsymbol{z})$ と書こう。すると、CCTP (**Q**) は

$$\begin{array}{ll} \text{Minimize} & \displaystyle\sum_{j \in J} \sum_{i \in I} f_{ij}(u_{ji}(\boldsymbol{z})) \\ \text{subject to} & z_{j1} = \bar{b}_j, \quad j \in J, \\ & z_{1i} = \bar{a}_i, \quad i \in I, \\ & u_{ji}(\boldsymbol{z}) \geq 0, \quad j \in J,\ i \in I \end{array} \tag{13}$$

と書き直すことできる。

(13) の変数 z_{ji} は有界閉区間上の値を取る。実際、$\sum_{j \in J} x_{ij} = a_i,\ x_{ij} \geq 0$ から y_{ij} は $0 \leq y_{ij} \leq a_i$ となり、故に z_{ji} は $0 \leq z_{ji} \leq \bar{a}_i$ となる。また、(13) において変数 $z_{j1},\ j \in J$ と $z_{1i},\ i \in I$ は定数なので消去できる。これらの変数を消去した後、z_{ji} の添字 j と i の値を 1 ずつ減らす。すると、(13) は次のように書き直せる。

$$\begin{array}{ll} \text{Minimize} & \displaystyle\sum_{j \in J} \sum_{i \in I} f_{ij}(v_{ji}(\boldsymbol{z})) \\ \text{subject to} & v_{ji}(\boldsymbol{z}) \geq 0, \quad j \in J,\ i \in I, \\ & 0 \leq z_{ji} \leq \delta_{ji}, \quad j \in J',\ i \in I' \end{array} \tag{14}$$

δ_{ji} は $\delta_{ji} > \bar{a}_i$ を満たす実数で、$v_{ji}(\boldsymbol{z})$ は

$$v_{ji}(\boldsymbol{z}) := \begin{cases} z_{(1,1)} + c, & j = 1, \quad i = 1, \\ -z_{(j-1,1)} + z_{(j,1)} + b_j, & j \in J' \setminus \{1\}, \quad i = 1, \\ -z_{(1,i-1)} + z_{(1,i)} + a_i, & j = 1 \quad i \in I' \setminus \{1\}, \\ (z_{(j-1,i-1)} - z_{(j-1,i)}) - (z_{(j,i-1)} - z_{(j,i)}), & j \in J' \setminus \{1\}, \quad i \in I' \setminus \{1\}, \\ -z_{(1,p-1)} + a_p, & j = 1, \quad i = p, \\ z_{(j-1,p-1)} - z_{(j,p-1)}, & j \in J' \setminus \{1\}, \quad i = p, \\ -z_{(q-1,1)} + b_q, & j = q, \quad i = 1, \\ z_{(q-1,i-1)} - z_{(q-1,i)}, & j = q, \quad i \in I' \setminus \{1\}, \\ z_{(q-1,p-1)}, & j = q, \quad i = p \end{cases}$$

である。ここで $c := \bar{a}_1 - \bar{a}_2 - \bar{b}_2$、$J' := \{1, \ldots, q-1\}$、$I' := \{1, \ldots, p-1\}$ とする。(**Q**) と (14) の大域的な最適値は一致し、(**Q**) の大域的な最適解は (14) の大域的な最適解に変換 (9)、(11) に由来する線形変換を施すことで得られる。

(14) の実行可能領域を $\mathcal{V}$ と書く。δ_{ji} を $\delta_{ji} > \bar{a}_i$ と選ぶと $\mathcal{V}$ は内点を持つ。

補題 2 ([9] の Lemma 4) 仮定 1 が成立するとする。このとき、$\mathcal{V}$ は内点を持つ。

この補題の最初の仮定は (**Q**) において一般性を失わずに成立する。もし、$a_i = 0$ であれば $x_{i1} = \cdots = x_{iq} = 0$ で、また、$b_j = 0$ であれば $x_{1j} = \cdots = x_{pj} = 0$ となるので、これらの変数を除けば補題の最初の仮定は成立する。2 番目の仮定は (**Q**) が実行可能であることを保証している。

4.2 変数変換を施した CCTP の集合族 Δ

(**Q**) の目的関数 f_{ij} が 2 次の凹関数

$$f_{ij}(x_{ij}) = \mu_{ij} x_{ij}^2 + \nu_{ij} \text{ with } \mu_{ij} < 0.$$

であるとする。このとき、変数変換を施した CCTP (14) は

$$(\mathbf{R}) : \left| \text{ Minimize } \sum_{j \in J} \sum_{i \in I} \mu_{ij} v_{ji}^2(\boldsymbol{z}) + \nu_{ij} \quad \text{subject to} \quad \boldsymbol{z} \in \mathcal{V} \right.$$

となる。(**R**) に対して、次のような C_{ji} から構成される集合族 $\Delta = \{C_{ji} : j \in J'', \ i \in I''\}$

$$C_{ji} = \{(j, i), (j+1, i), \ldots, (q-1, i), (1, i+1), (2, i+1), \ldots, (j+1, i+1)\}$$

と、次のような $\widetilde{C}_{ji}$ から構成される集合族 $\widetilde{\Delta} = \{\widetilde{C}_{ji} : j \in J'', \ i \in I''\}$

$$\widetilde{C}_{ji} = \{(j, i), (j, i+1), \ldots, (j, p-1), (j+1, 1), (j+1, 2), \ldots, (j+1, i+1)\}$$

を考える。これらは $|C_{ji}| = q+1$ and $|\widetilde{C}_{ji}| = p+1$ である。ここで J'' は $J'' := \{1, \ldots, q-2\}$ と I'' は $I'' := \{1, \ldots, p-2\}$ としている。

補題 3 ([9] の Lemma 5) $\Delta = \{C_{ji} : j \in J'',\ i \in I''\}$ と $\widetilde{\Delta} = \{\widetilde{C}_{ji} : j \in J'',\ i \in I''\}$ は条件 1 を満たす。

集合族 Δ° を $q \geq p$ の場合は $\Delta^\circ = \Delta$ とし、そうでない場合は $\Delta^\circ = \widetilde{\Delta}$ とする。Δ° を用いて $(\mathbf{R})$ に冗長なボックス制約を追加し (6) の形に修正する。修正した $(\mathbf{R})$ に対して Δ° を用いて疎な SDP 緩和問題 $(\mathbf{R}^\omega)$ を構築する。その双対問題を $(\mathbf{R}^\omega_*)$ と書く。今、補題 3 から Δ° は条件 1 を満たすことが分かる。また、補題 1-1 から修正した $(\mathbf{R})$ は条件 2 を満たすことが分かる。したがって、修正した $(\mathbf{R})$ に対する疎な SDP 緩和 $(\mathbf{R}^\omega)$ の収束性を定理 1 を用いて保証できる。更に、補題 2 から修正した $(\mathbf{R})$ の実行可能領域は内点を持つので、補題 1-2 が成立する。ここで、$(\mathbf{R}^\omega)$ の最適値を $\zeta(\mathbf{R}^\omega)$、$(\mathbf{R}^\omega_*)$ の最適値を $\zeta(\mathbf{R}^\omega_*)$、$(\mathbf{R})$ の大域的な最適値を ζ と書く。

定理 2 ([9] の Proposition 1) どんな ω に対しても $\zeta(\mathbf{R}^\omega) = \zeta(\mathbf{R}^\omega_*)$ が成立する。更に、$\lim_{\omega\to\infty} \zeta(\mathbf{R}^\omega) = \lim_{\omega\to\infty} \zeta(\mathbf{R}^\omega_*) = \zeta$ となる。

$|\Delta^\circ| = \min\{q+1, p+1\}$ であるので、補題 1-3 から $(\mathbf{R}^\omega)$ の最も大きいブロック行列のサイズは、$\omega \geq 2$ で

$$\binom{\min\{p+1, q+1\} + \omega - 1}{\omega - 1} = O((\min\{p, q\})^{\omega-1})$$

となる。したがって、p あるいは q が小さい場合は CCTP に対して規模の小さい SDP 緩和が構築できることが分かる。例えば、$(p, q) = (5, 200)$ や $(p, q) = (10, 100)$ の場合、CCTP の大域的な最適解にかなり近い良質な解が得られることを確認した。[9] の第 5 節において、これに関する詳しい数値実験の結果を報告している。

参考文献

[1] J.R.S. Blair and B. Peyton. An introduction to chordal graphs and clique trees. In A. George, J.R. Gilbert, and J.W.H. Liu, editors, *Graph Theory and Sparse Matrix Computation*, volume 56 of *IMA Volumes in Mathematics and its Applications*, pages 1–29. Springer, 1993.

[2] G. Gallo, C. Sandi, and C. Sodini. An algorithm for the min concave cost flow problem. *Eur. J. Oper. Res.*, 4(4):248–255, 1980.

[3] D. Grimm, T. Netzer, and M. Schweighofer. A note on the representation of positive polynomials with structured sparsity. *Arch. Math.*, 89(5):399–403, 2007.

[4] G.M. Guisewite and P.M. Pardalos. Minimum concave cost network flow problems: applications, complexity, and algorithms. *Ann. Oper. Res.*, 25(1):75–100, 1990.

[5] M. Kojima, S. Kim, and H. Waki. Sparsity in sums of squares of polynomials. *Math. Program., Ser. A*, 103:45–62, 2005.

[6] T. Larsson, A. Migdalas, and M. Ronnqvist. A Lagrangean heuristic for the capacitated concave minimum cost network flow problem. *Eur. J. Oper. Res.*, 78(1):116–129, 1994.

[7] J.B. Lasserre. Global optimization with polynomials and the problem of moments. *SIAM J. Optim.*, 11(3):796–817, 2001.

[8] M. Laurent. Sums of squares, moment matrices and optimization over polynomials. In M. Putinar and S. Sullivant, editors, *Emerging Applications of Algebraic Geometry*, volume 149 of *IMA Volumes in Mathematics and its Applications*, pages 157–270. Springer, 2009.

[9] T. Mizutani and M. Yamashita. Correlative sparsity structures and semidefinite relaxations for concave cost transportation problems with change of variables. *J. Global. Optim.*, Online First, 2012.

[10] P.A. Parrilo. Semidefinite programming relaxations for semialgebraic problems. *Math. Program., Ser. B*, 96:293–320, 2003.

[11] H. Waki, S. Kim, M. Kojima, and M. Muramatsu. Sums of squares and semidefinite programming relaxations for polynomial optimization problems with structured sparsity. *SIAM J. Optim.*, 17(1):218–242, 2006.