

非凸二次計画問題に対する強双対性を用いた二次分数計画問題の解法

京都大学・情報学研究科 安田 浩平 (Kohei Yasuda), 林 俊介 (Shunsuke Hayashi)
Graduate School of Informatics,
Kyoto University

摘要 分数計画問題とは、二つの関数の比率を制約条件下で最小化する問題であり、情報理論やグラフ理論、クラスター分析など多くの応用が知られている。本書では、特に、目的関数が二つの非凸二次関数の比として与えられ、制約条件が二つの非凸二次関数によって特徴づけられるような分数計画問題に焦点を絞る。分数計画問題を解くための手法としてもっともよく知られているのが、Dinkelbach のパラメトリックアプローチである。この手法では、元の問題を一変数関数に対する非線形方程式として等価に変換し、その方程式を二分法や一般化ニュートン法などの反復法によって解くことを考える。ただし、各反復でその一変数関数を評価するために、非線形最適化問題の大域的最適解を求める必要がある。

本書で対象としている問題は二次分数計画問題であるため、各反復で解くべき非線形最適化問題は凸でない二次計画問題となる。このような非凸二次計画問題に対して、双対問題が半正定値計画問題として定式化できることが知られているが、Beck and Elder はその主問題と双対問題に対して強双対性が成り立つための十分条件を示した。この条件が成り立つ場合、半正定値計画問題を主双対内点法などを用いて解くことにより、非凸二次計画問題の大域的最適解を求めることができる。

本書では、二次分数計画問題を解くため、Dinkelbach のパラメトリックアプローチと Beck and Elder の非凸二次計画問題に対する強双対性条件とを組み合わせた手法を提案する。この手法では、各反復で解くべき非凸二次計画問題に対して大域的最適解が得られることが重要である。そこで、数値実験では、様々なテスト問題をランダムに生成し、強双対性条件がどれくらいの頻度で満たされるかを確かめる。さらに、既存の非線形計画問題に対する汎用ソルバーとの比較実験を行い、提案手法の有用性を確認する。

1 序論

ある適当な制約条件の下で二つの関数の比率を最小化する問題を分数計画問題 (Fractional Programming Problem) といい、次のように定式化される。

$$\begin{aligned} & \underset{x \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} && \frac{\theta_1(x)}{\theta_2(x)} \\ & \text{subject to} && x \in \Omega \end{aligned} \tag{1.1}$$

ここで、 $\theta_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ($i = 1, 2$) は連続な関数であり、 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ は実行可能領域を表す集合である。

分数計画問題は情報理論やグラフ理論、クラスター分析など多くの実用的な問題に応用できることから、これまで盛んに研究がなされてきた [1]。分数計画問題に対するもっとも初期の研究の一つとして、Von Neumann が提案した経済均衡モデル [6] が挙げられる。このモデルでは、二つのアフィン関数の比率を最小化する問題を考えている。しかし、分数計画問題に対する体系的な研究が始まったのは、1960 年代になってからである。1962 年に、Charnes and Cooper は、目的関数の分母、分子がい

ずれもアフィン関数で与えられるような分数計画問題に対する理論をまとめた [7]. また, 1966 年に, Jagannathan はパラメトリックな問題に対する解法を凸計画問題に適用する手法を考え, その手法が分母, 分子が非線形な場合の分数計画問題に適用できることを示した [15]. 1967 年に, Jagannathan の手法をベースにして, Dinkelbach は分数計画問題のパラメトリックアプローチを考案した [8]. その後, 今日までに分数計画問題は多くの研究者によって研究されている [9, 10, 11, 12, 13].

本書では, 目的関数が二つの非凸二次関数の比として表わされ, 実行可能領域が二つの非凸二次関数によって特徴付けられる次の問題を対象とする.

$$\begin{aligned} & \underset{x \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} && \frac{f_1(x)}{f_2(x)} \\ & \text{subject to} && x \in S := \{x \mid g_1(x) \leq 0, g_2(x) \leq 0\} \end{aligned} \quad (1.2)$$

ただし, 関数 $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ($i = 1, 2$) および $g_j : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ($j = 1, 2$) は対称行列 $A_1, A_2, M_1, M_2 \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ベクトル $b_1, b_2, p_1, p_2 \in \mathbb{R}^n$, および実数 $c_1, c_2, q_1, q_2 \in \mathbb{R}$ を用いて

$$\begin{aligned} f_i(x) &:= x^T A_i x + 2b_i^T x + c_i \quad (i = 1, 2) \\ g_j(x) &:= x^T M_j x + 2p_j^T x + q_j \quad (j = 1, 2) \end{aligned}$$

で与えられているものとする. このような問題に対して Dinkelbach のパラメトリックアプローチを適用すると, 各反復において, 次のような $\alpha \in \mathbb{R}$ をパラメータとして含むような問題を部分問題として解く必要がある.

$$\begin{aligned} & \underset{x \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} && f_1(x) - \alpha f_2(x) \\ & \text{subject to} && x \in S \end{aligned} \quad (1.3)$$

関数 $f_1 - \alpha f_2, g_1, g_2$ が凸である場合は問題 (1.3) は凸計画問題であり, 内点法や逐次二次計画法 (SQP 法) といった一般的な解法を用いることにより大域的最適解を得ることが期待できる. しかし, $f_1 - \alpha f_2, g_1, g_2$ のいずれか一つが凸でない場合はそれらの手法で大域的最適解を得られる保証が無い. また, 問題 (1.3) の目的関数はパラメータ α に依存するため, たとえある α で $f_1 - \alpha f_2$ が凸になったとしても, 別の $\alpha' \neq \alpha$ で凸になるとは限らない.

Zhang and Hayashi[4] は, 問題 (1.2) において集合 S が Celis-Dennid-Tapia (CDT) 制約を用いて表わされる場合, すなわち, 与えられた $P \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $q \in \mathbb{R}^m$, $\Delta, \xi, \in \mathbb{R}$ を用いて

$$S := \{x \mid \|x\|_2 \leq \Delta, \|P^T x + q\|_2 \leq \xi\} \quad (1.4)$$

と表わされるような二次分数計画問題に対して, Yuan[5] の最適性条件を用いた効率的な解法を提案した. また, 行列 M_1 および M_2 の両方が半正定値で, いずれか少なくとも一方が正定値の場合でも, 適当なアフィン変換を施すことにより集合 S を式 (1.4) の形で表すことができるため, Zhang and Hayashi の手法をそのまま適用することができる.

一方, 本書で取り扱う問題は M_1, M_2 のいずれに対しても半正定値性を仮定しない¹ため, 各反復で解くべき部分問題 (1.3) において, $f_1 - \alpha f_2, g_1, g_2$ のいずれも凸性が保証されない. そこで, 本書では, 問題 (1.3) の大域的最適解を, その双対問題から導出する手法を用いる. 問題 (1.3) の双対問題は半正定値計画問題として表わされるため (3 節を参照), 既存の主双対内点法を用いたソルバーを適用することにより, 大域的最適解を得ることができる. また, 非凸二次計画問題において強双対性が成り立つかどうかを調べるのは一般には困難であるが, 制約条件が二つの二次制約を用いて表わされる場合は強双対性が成り立つための十分条件が Beck and Elder によって示されている [3].

¹ただし, 行列 M_1, M_2 はある $\lambda_1, \lambda_2 \geq 0$ に対して $\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2 \succ 0$ を満たすものとする. 詳しくは 3, 5 節にて述べる.

本書の構成を述べる。2節では、分数計画問題の基礎解法である Dinkelbach のパラメトリックアプローチについて述べ、その際に出てくる一変数関数の性質について簡単な解析を行う。3節では、非凸二次計画問題に対する双対問題を半正定値計画問題として定式化し、その強双対性に関して Beck and Elder の十分条件を紹介する。4節では、2節、3節の内容を組み合わせることにより、非凸二次分数計画問題 (1.2) を解くアルゴリズムを提案する。さらに、5節では提案したアルゴリズムの有用性を確かめるため、いくつかのテスト問題に対して数値実験を行う。また、6節では結論を述べる。

本書で用いる用語や表記法の定義は次の通りである。拡張関数 $f \rightarrow [-\infty, \infty]$ に対して、そのハイボグラフを $\text{hyp}f := \{(x, \beta) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \beta \leq f(x)\}$ とする。ハイボグラフが凸集合であるような関数を凹関数といい、凹関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow [-\infty, \infty]$ が、(a) すべての x に対して $f(x) < \infty$ 、(b) ある x において $f(x) > -\infty$ 、の二つの条件を満たすとき、 f を真凹関数という。行列 A に対して、その核を $\text{Ker } A := \{x \mid Ax = 0\}$ とする。最適化問題 (P) に対してその最適値を $\text{val}(P)$ で表す。凹関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow [-\infty, \infty]$ に対して、集合 $\text{dom } f := \{x \in \mathbb{R} \mid f(x) > -\infty\}$ を f の実行定義域と呼ぶ。

2 分数計画問題に対するパラメトリックアプローチ

本節では、分数計画問題に対する既存の手法の一つである Dinkelbach のパラメトリックアプローチを紹介する。まず 2.1 節では、分数計画問題 (1.2) とある種のパラメトリック最適化問題との関係を示す。この関係を用いることにより、分数計画問題 (1.2) を解くことと、ある一変数関数に対する非線形方程式を解くことが同値になる。その一変数関数の性質について 2.2 節で簡単な解析を行う。なお、本節で行う解析では、関数 f_1, f_2, g_1, g_2 が二次であることを利用していないので、問題 (1.1) に対しても同様の結果が得られることに注意する。

本書を通して、問題 (1.2) の分母に表れる関数 f_2 について以下の仮定が成り立つものとする。

仮定 2.1. 問題 (1.2) の任意の実行可能解 $x \in S$ において、 $f_2(x) > 0$ となる。

この仮定は、ある $x \in S$ において $f_2(x) = 0$ とならないことを想定したものである。なお、すべての $x \in S$ において $f_2(x) < 0$ となる場合は、 $f_1(x) := -f_1(x)$ 、 $f_2(x) := -f_2(x)$ と置きなおすことにより、上の仮定を満たす。

2.1 パラメトリックアプローチ

問題 (1.2) に対して、 $\alpha \in \mathbb{R}$ をパラメータとしてもつような次の問題を考える。

$$\begin{aligned} & \underset{x \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} && f_1(x) - \alpha f_2(x) \\ & \text{subject to} && x \in S \end{aligned} \tag{2.1}$$

Dinkelbach [8] は、問題 (1.2) と問題 (2.1) に次の関係があることを示した。

定理 2.1. 以下の二つの条件は同値である²。

- (a) $\min_{x \in S} \frac{f_1(x)}{f_2(x)} = \alpha$
- (b) $\min_{x \in S} \{f_1(x) - \alpha f_2(x)\} = 0$

問題 (2.1) は、問題 (1.2) に比べてより単純な構造をしているため、大域的最適解を得ることがより容易であることが期待される。また、定理 2.1 より、問題 (2.1) の最適値が 0 であるような α が見つかれば、問題 (2.1) の最適解は問題 (1.2) の最適解になることが分かる。

²この定理は、 $\min$ の代わりに $\inf$ を用いると成り立たないことがある。例えば問題 (2.1) において $n = 1, S = [1, \infty], f_1(x) = 1, f_2(x) = x^2$ であるとき、 $\inf_{x \in S} f_1(x)/f_2(x) = 0$ であるが、 $\alpha = 0$ に対して $\inf_{x \in S} \{f_1(x) - \alpha f_2(x)\} = 1$ となる。

2.2 パラメトリックアプローチにおける一変数関数の性質

2.1 節において、問題 (2.1) の最適値が 0 になるようなパラメータ α を求めることができれば、その問題の大域的最適解が問題 (1.2) の大域的最適解にもなっていることを示した。したがって、 α を変数とした一変数関数 $F: \mathbb{R} \rightarrow [-\infty, \infty)$ を

$$F(\alpha) := \inf_{x \in S} \{f_1(x) - \alpha f_2(x)\} \quad (2.2)$$

で定義すれば、問題 (1.2) を解くことと、 $F(\alpha) = 0$ となる α を求めることが等価となる。そこで、本節では関数 F がどのような構造をもっているかについて簡単な解析を行う。

実際、関数 F は以下のような好ましい性質をもっている。

定理 2.2. $F: \mathbb{R} \rightarrow [-\infty, \infty)$ を式 (2.2) で定義される関数とする。このとき、 F は以下の性質をもつ。

- (a) F は凹関数である。
- (b) F は $\text{dom } F$ 上で連続である。
- (c) F は $\text{dom } F$ 上で単調非増加である。さらに、 $\inf_{x \in S} f_2(x) > 0$ ならば、それは狭義単調減少である。
- (d) 問題 (1.2) が解を持つとき、 $F(\alpha) = 0$ は唯一の解をもつ。

方程式 $F(\alpha) = 0$ を解くためにはニュートン法などが考えられるが、そのためには関数 F の勾配の情報が必要である。しかし、 F は $\inf$ を用いて定義しているので、一般に微分可能とは限らない。そこで、勾配の代わりに劣勾配を考える必要がある。

定義 2.1. 関数 $h: \mathbb{R}^n \rightarrow [-\infty, \infty)$ を真凹関数とする。また x を $\text{dom } F$ 上の任意の点とする。このとき、

$$h(y) \leq h(x) + d^T(y - x) \quad (\forall y \in \mathbb{R}^n)$$

を満たすベクトル d を関数 h の x における劣勾配と呼ぶ。

式 (2.2) において、 $F(\alpha) = f_1(x) - \alpha f_2(x)$ となるような x が存在するならば、関数 F の劣勾配は陽に得られる。

定理 2.3. $\alpha \in \mathbb{R}$ を $\text{argmin}_{x \in S} \{f_1(x) - \alpha f_2(x)\} \neq \emptyset$ であるような任意の実数とし、 $x_\alpha := \text{argmin}_{x \in S} \{f_1(x) - \alpha f_2(x)\}$ とする。このとき、 $-f_2(x_\alpha)$ は F の α における劣勾配となる。

この劣勾配を用いて一般化ニュートン法を適用することにより $F(\alpha) = 0$ となる α を求めることができる。

3 非凸二次計画問題

2 節では、パラメトリックアプローチを紹介し、その際に用いる関数 F の定義を行ったが、関数 F の値を評価するためには、各 α に対して、問題 (2.1) を解かなければならない。問題 (2.1) は、凸でない二次制約を二つもつような二次計画問題であり、一般的な手法ではその大域的最適解を得られる保証がない。そこで本書では、その双対問題の解を用いて問題 (2.1) の大域的最適解を求める Beck and Elder の手法 [3] を適用する。問題 (2.1) の双対問題は半正定値計画問題となるため、主双対内点法などを用いることにより、大域的最適解を求めることができる。しかし、双対問題の最適解を用いて問題 (2.1) の大域的最適性を保証するためには、強双対性が成り立つ必要がある。凸でない二次制約を

二つもつような二次計画問題は、一般的な制約想定を仮定しても強双対性が成り立つ保証が得られないが、変数のとりうる範囲を複素数まで許した問題を考えると、実行可能内点が存在するという仮定の下で強双対性が成立することが知られている。そこで3.1節では、行列、ベクトル、定数および変数が複素数を取りうるような問題を考え、実行可能内点が存在するという仮定の下でその問題が強双対性をもつことを示す。3.2節では、3.1節の内容を実変数の問題に適用することにより、Beck and Elder によって示された実変数の問題において強双対性が成り立つための十分条件を紹介する。

3.1 複素非凸二次計画問題に対する強双対性

本節では、まず次のような複素非凸二次計画問題を考える。

$$\begin{aligned} & \underset{z \in \mathbb{C}^n}{\text{minimize}} && g_0(z) := z^* M_0 z + 2\Re(p_0^* z) + q_0 \\ & \text{subject to} && g_j(z) := z^* M_j z + 2\Re(p_j^* z) + q_j \leq 0 \quad (j = 1, 2) \end{aligned} \quad (3.1)$$

ただし、 $M_j = M_j^* \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $p_j \in \mathbb{C}^n$, $q_j \in \mathbb{R}$ ($j = 0, 1, 2$) は与えられたエルミート行列、ベクトルおよび定数である。問題 (3.1) に対して Lagrange 関数を考えることにより、その双対問題は

$$\begin{aligned} & \underset{\lambda_1, \lambda_2, \mu}{\text{maximize}} && \mu \\ & \text{subject to} && \begin{pmatrix} M_0 & p_0 \\ p_0^* & q_0 - \mu \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} M_1 & p_1 \\ p_1^* & q_1 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} M_2 & p_2 \\ p_2^* & q_2 \end{pmatrix} \succeq 0 \\ & && \lambda_1 \geq 0, \lambda_2 \geq 0 \end{aligned} \quad (3.2)$$

と記述できる。

問題 (3.1) と (3.2) がともに狭義実行可能であれば、強双対性が成り立つ。

定理 3.1. 問題 (3.1) および (3.2) はいずれも狭義実行可能であるとする。このとき、両者の間に強双対性が成り立つ。

次に、問題 (3.1) の解を双対問題 (3.2) の解から求める方法を考える。強双対性が成り立っていることから、最適性条件に関する以下の定理が有用である。

定理 3.2. 問題 (3.1) および (3.2) はいずれも狭義実行可能であるものとする。また、 $(\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \bar{\mu})$ を (3.2) の任意の大域的最適解とする。このとき、 $\bar{z}$ が (3.1) の大域的最適解であるための必要十分条件は

$$\begin{aligned} (M_0 + \bar{\lambda}_1 M_1 + \bar{\lambda}_2 M_2) \bar{z} + p_0 + \bar{\lambda}_1 p_1 + \bar{\lambda}_2 p_2 &= 0 \\ g_1(\bar{z}) &\leq 0, \quad g_2(\bar{z}) \leq 0 \\ \bar{\lambda}_1 g_1(\bar{z}) &= \bar{\lambda}_2 g_2(\bar{z}) = 0 \end{aligned}$$

が成り立つことである。

定理 3.2 をさらに発展させると、以下の定理が得られる。

定理 3.3. 問題 (3.1) および (3.2) はいずれも狭義実行可能であるものとする。このとき、 $\bar{z}$ が (3.1) の大域的最適解であるための必要十分条件は

- (i) $(M_0 + \lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2) \bar{z} + p_0 + \lambda_1 p_1 + \lambda_2 p_2 = 0$
- (ii) $g_1(\bar{z}) \leq 0, g_2(\bar{z}) \leq 0$
- (iii) $\lambda_1 g_1(\bar{z}) = \lambda_2 g_2(\bar{z}) = 0$

$$(iv) \quad M_0 + \lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2 \succeq 0$$

を満たす $\lambda_1, \lambda_2 \geq 0$ が存在することである。

定理 3.2 において, $M_0 + \bar{\lambda}_1 M_1 + \bar{\lambda}_2 M_2$ が正定値行列である場合は, 問題 (3.1) の大域的最適解 $\bar{z}$ を $\bar{z} = -(M_0 + \lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2)^{-1}(p_0 + \lambda_1 p_1 + \lambda_2 p_2)$ と陽に求めることができる. 一方, $M_0 + \lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2$ が半正定値行列であるが正定値行列ではない場合は, 部分空間 $\text{Ker}(M_0 + \lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2)$ の基底を用いて問題 (3.1) の大域的最適解を求めることができることが Beck and Elder [3, Theorem 2.5] によって示されている.

3.2 実数問題への適用

本節では, 前節で議論した複素非凸二次計画問題に対する強双対性の結果を用いて, 次のような実変数に対する非凸二次計画問題の強双対性を考える.

$$(QP_{\mathbb{R}}) \quad \begin{array}{ll} \underset{x \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} & x^T M_0 x + 2p_0^T x + q_0 \\ \text{subject to} & x^T M_j x + 2p_j^T x + q_j \leq 0 \quad (j = 1, 2) \end{array} \quad (3.3)$$

ただし, $M_j = M_j^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $p_j \in \mathbb{R}^n$, $q_j \in \mathbb{R}$ ($j = 0, 1, 2$) を与えられた対称行列, ベクトルおよび定数とする. $(QP_{\mathbb{R}})$ に対して Lagrange 関数を導入することにより, その双対問題は次のような半正定値計画問題として定式化することができる.

$$(D) \quad \begin{array}{ll} \underset{\lambda_1, \lambda_2, \mu}{\text{maximize}} & \mu \\ \text{subject to} & \begin{pmatrix} M_0 & p_0 \\ p_0^T & q_0 - \mu \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} M_1 & p_1 \\ p_1^T & q_1 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} M_2 & p_2 \\ p_2^T & q_2 \end{pmatrix} \succeq 0 \\ & \lambda_1 \geq 0, \lambda_2 \geq 0 \end{array} \quad (3.4)$$

さて, $(QP_{\mathbb{R}})$ に対して変数の取り得る範囲を複素数まで拡張した問題

$$(QP_{\mathbb{C}}) \quad \begin{array}{ll} \underset{z \in \mathbb{C}^n}{\text{minimize}} & z^T M_0 z + 2\Re(p_0^T z) + q_0 \\ \text{subject to} & z^T M_j z + 2\Re(p_j^T z) + q_j \leq 0 \quad (j = 1, 2) \end{array} \quad (3.5)$$

を考えよう. このとき, $(QP_{\mathbb{C}})$ は問題 (3.1) と同じ形をしているので, 前節の議論をそのまま適用することができる. さらに, $(QP_{\mathbb{C}})$ において行列 M_j ($j = 0, 1, 2$) およびベクトル p_j ($j = 0, 1, 2$) の成分はすべて実数であるので, $(QP_{\mathbb{C}})$ の双対問題もまた (D) で表される. したがって, 前節で示した定理 3.1 を用いると, $(QP_{\mathbb{C}})$ と (D) がともに狭義実行可能であれば, 両者の間に強双対性が成り立つことが分かる. しかし, $(QP_{\mathbb{R}})$ は変数が実ベクトルに制限されているため, $(QP_{\mathbb{R}})$ と (D) がともに狭義実行可能であっても, 強双対性が成り立つとは限らない. そこで, $(QP_{\mathbb{C}})$ から実数解が得られるための条件を考える.

定理 3.4. $(QP_{\mathbb{R}})$ と (D) をともに狭義実行可能とする. また, $(\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \bar{\mu})$ を (D) の任意の大域的最適解とする. このとき

$$M_0 + \bar{\lambda}_1 M_1 + \bar{\lambda}_2 M_2 \succ 0$$

ならば $\text{val}(QP_{\mathbb{R}}) = \text{val}(D)$ が成り立ち $(QP_{\mathbb{R}})$ の大域的最適解 $\bar{x}$ は

$$\bar{x} = -(M_0 + \bar{\lambda}_1 M_1 + \bar{\lambda}_2 M_2)^{-1}(p_0 + \bar{\lambda}_1 p_1 + \bar{\lambda}_2 p_2)$$

となる.

定理 3.4 は、強双対性が成り立つための十分条件の一つを与えているものといえるが、それよりも緩い十分条件が Beck and Elder [3] によって提案されている。

定理 3.5. [3, Theorem 3.5] $(QP_{\mathbb{R}})$ と (D) のいずれも狭義実行可能であるとする。また、ある $\nu_1, \nu_2 \geq 0$ が存在して

$$\nu_1 M_1 + \nu_2 M_2 \succ 0 \quad (3.6)$$

が成り立つとする。このとき (D) の解 $(\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \bar{\mu})$ に対して

$$d = \dim(\text{Ker}(M_0 + \bar{\lambda}_1 M_1 + \bar{\lambda}_2 M_2)) \neq 1 \quad (3.7)$$

が成り立つならば、 $\text{val}(QP_{\mathbb{R}}) = \text{val}(D)$ となり、 $(QP_{\mathbb{C}})$ は実数解をもつ。

定理 3.5 において、 $d \geq 2$ となる場合、 $(QP_{\mathbb{R}})$ に強双対性が成り立つことは保証されるが、 $(QP_{\mathbb{R}})$ の解をその双対問題である (D) の解から求めることは一般には容易ではない。

最後に、(D) が狭義実行可能となるための十分条件を与える。

定理 3.6. ある $\nu_1, \nu_2 \geq 0$ に対して、 $\nu_1 M_1 + \nu_2 M_2 \succ 0$ が成り立つとする。このとき、問題 (D) は狭義実行可能である。

4 アルゴリズム

本説では、Dinkelbach のパラメトリックアプローチを用いて二次分数計画問題 (1.2) を解くための手法を考える。その際に、(2.2) 式で定義される関数 $F: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ に対して、 $F(\alpha) = 0$ という非線形方程式を解く必要があるが、本書では劣勾配を用いた一般化ニュートン法を適用するものとする。一般化ニュートン法における k 回目の反復点を α_k とする。このとき、 $x^k \in \arg\min_{x \in S} \{f_1(x) - \alpha_k f_2(x)\}$ とすると、定理 2.3 より、 $-f_2(x^k)$ は F の α_k における劣勾配である。したがって、 α を次のように更新していけばよい。

$$\begin{aligned} \alpha_{k+1} &:= \alpha_k - \frac{F(\alpha_k)}{-f_2(x^k)} \\ &= \alpha_k - \frac{f_1(x^k) - \alpha_k f_2(x^k)}{-f_2(x^k)} \\ &= \frac{f_1(x^k)}{f_2(x^k)} \end{aligned}$$

この α の更新方法を用いた一般化ニュートン法を用いたアルゴリズムは以下のようになる。

アルゴリズム 1 (一般化ニュートン法)

Step 0: 適当な初期点 $\alpha_1 \in \mathbb{R}$ と十分小さい正の数 ϵ を選ぶ。 $k := 1$ とする。

Step 1: 以下の部分問題を解き、その大域的最適解 x^k と最適値 $F(\alpha_k) = f_1(x^k) - \alpha_k f_2(x^k)$ を得る。

$$\begin{aligned} &\text{minimize} && f_1(x) - \alpha_k f_2(x) \\ &\text{subject to} && x \in S \end{aligned} \quad (4.1)$$

Step 2: $|F(\alpha_k)| \leq \epsilon$ ならば終了。そうでないならば、

$$\alpha_{k+1} := \frac{f_1(x^k)}{f_2(x^k)}$$

とする. $k := k + 1$ として, Step 1 に戻る.

初期点 α_1 の取り方には注意が必要である. 実際, 実行可能集合 S が有界でなければ, 問題 (4.1) の目的関数が S 上で下に有界でない可能性がある. そこで α_1 は, $\operatorname{argmin}_{x \in S} \{f_1(x) - \alpha_1 f_2(x)\} \neq \emptyset$ かつ $F(\alpha_1) < 0$ となるようにとるのが望ましい. すると, 部分問題 (4.1) で常に大域的最適解が得られていれば, 任意の k に対して

$$F(\alpha_1) \leq F(\alpha_k) \leq 0$$

となる. これは, F が単調非増加かつ連続な凹関数であることから分かる.

次に部分問題 (4.1) を解く手順を説明する. M_0, p_0, q_0 をそれぞれ

$$\begin{aligned} M_0^k &:= A_1 - \alpha_k A_2 \\ p_0^k &:= b_1 - \alpha_k b_2 \\ q_0^k &:= c_1 - \alpha_k c_2 \end{aligned}$$

とする. すると, 問題 (4.1) は次の形になる.

$$\begin{aligned} &\underset{x \in \mathbb{R}}{\text{minimize}} && x^T M_0^k x + (p_0^k)^T x + q_0^k \\ &\text{subject to} && x^T M_1 x + p_1^T x + q_1 \leq 0 \\ &&& x^T M_2 x + p_2^T x + q_2 \leq 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

問題 (4.2) は問題 (3.3) と同じ形をしているので, 定理 3.4 を用いて大域的最適解が得られることが期待できる.

以下に部分問題 (4.1) の解を得るための手順を示す.

手順 1 (部分問題の解法)

Step 0: 問題 (4.1) の双対問題

$$\begin{aligned} &\underset{\lambda_1, \lambda_2, \mu}{\text{maximize}} && \mu \\ &\text{subject to} && \begin{pmatrix} M_0^k & p_0^k \\ (p_0^k)^T & q_0^k - \mu \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} M_1 & p_1 \\ p_1^T & q_1 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} M_2 & p_2 \\ p_2^T & q_2 \end{pmatrix} \succeq 0 \\ &&& \lambda_1 \geq 0, \lambda_2 \geq 0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

を解き, その大域的最適解 $\lambda_1^k, \lambda_2^k, \mu^k$ を得る.

Step 1: λ_1^k, λ_2^k が

$$M_0^k + \lambda_1^k M_1 + \lambda_2^k M_2 \succ 0 \quad (4.4)$$

を満たすならば,

$$x^k = -(M_0^k + \lambda_1^k M_1 + \lambda_2^k M_2)^{-1} (p_0^k + \lambda_1^k p_1 + \lambda_2^k p_2)$$

を部分問題の大域的最適解として出力する. 式 (4.4) を満たさないならば, Step 2 に進む.

Step 2: 問題 (4.1) に汎用ソルバーを直接適用し, 得られた解を x^k とする.

手順 1 の Step 1 において, 式 (4.4) を満たさない場合は, 得られた解 x^k が大域的最適解である保証がないため, $F(\alpha_k)$ の値を正しく評価できていない可能性がある. しかし, アルゴリズム 1 の Step 1 において, すべての反復で大域的最適解が得られていなくても, 終了条件が満たされたときに部分問題 (4.1) の大域的最適解が得られていれば, 問題 (1.2) の大域的最適性が保証されることに注意する.

5 数値実験

本節では、二次分数計画問題 (1.2) に対して、4 節で提案したアルゴリズム 1 を適用した数値実験を行い、どれくらいの頻度で問題 (1.2) の大域的最適解が得られるかを検証する。双対問題 (D) の狭義実行可能性を保証するため、問題 (1.2) で用いる行列 M_1, M_2 は、次の条件を満たすように生成する。(定理 3.6 を参照。)

条件 5.1. ある $\nu_1, \nu_2 \geq 0$ に対して、 $\nu_1 M_1 + \nu_2 M_2 \succ 0$ が成り立つ。

本節では、この条件を満たす問題のみを対象とする。

手順 1 の Step 1 において問題 (4.3) を解く際には、半正定値計画問題に対する主双対内点法ソルバー SDPT3 [14] を用いた。手順 1 の Step 2 において用いる汎用ソルバーは SQP 法をベースにした MATLAB ソルバー (fmincon) とした。また、アルゴリズム 1 の Step 1 において部分問題 (4.1) を解く際に、手順 1 ではなく常に fmincon を適用したものと比較実験を行った。以下では、提案手法を手法 A、比較実験で用いた手法 (部分問題 (4.1) を常に fmincon で解く) を手法 B と呼ぶものとする。手法 A, B ともに外部反復 k の上限を 100 回とした。

本書では、二次分数計画問題 (1.2) の実行可能性を保証するため、対称行列 $A_1, A_2, M_1, M_2 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 、ベクトル $b_1, b_2, p_1, p_2 \in \mathbb{R}^n$ 、および実数 $c_1, c_2, q_1, q_2 \in \mathbb{R}$ を次のように生成する。 $\hat{A}_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を行列の各成分が $(-1, 1)$ の一様分布に従うように選び、 $A_1 := (\hat{A}_1 + \hat{A}_1^T)/2$ として、対称行列を生成する。 $\hat{A}_2 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を行列の各成分が $(-1, 1)$ の一様分布に従うように選び、 $A_2 := A_2 A_2^T$ として半正定値対称行列を生成する。各成分が $(-1, 1)$ の一様分布に従うような行列 $\hat{N} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を生成し、 $N = \hat{N} \hat{N}^T + 0.1I$ として、 N を正定値対称行列にする。ここで、 $I \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は単位行列である。次に、 $\hat{M}_1$ を行列の各成分が $(-1, 1)$ の一様分布に従うように選び、 $M_1 := (\hat{M}_1 + \hat{M}_1^T)/2$ として対称行列を生成する。その後、 $M_2 = N - M_1$ として M_2 を生成する。このようにすることにより、条件 5.1 が常に満たされる。ベクトル $b_1, p_1, p_2 \in \mathbb{R}^n$ は、各成分が $(-1, 1)$ の一様分布に従うように選ぶ。また、 $b_2 := 0$ とする。 $c_1 \in \mathbb{R}$ は $(-1, 1)$ の一様分布に従うように選ぶ。 $c_2 \in \mathbb{R}$ は $(0, 1)$ の一様分布に従うように選ぶ。 $q_1, q_2 \in \mathbb{R}$ は $(-1, 0)$ の一様分布に従うように選ぶ。このようにすることによって、仮定 2.1 が常に満たされる。また、原点が必ず実行可能となるため、部分問題 (4.1) をソルバーで解く際に必要な実行可能初期点を原点として選ぶことができる。しかしながら、このように問題を発生させたとしても、問題 (1.2) が必ずしも大域的最適解を持つとは限らない。なぜならば、目的関数 $[f_1(x)/f_2(x)]$ が下に有界とは限らないからである。そこで、手法 A と手法 B のいずれを用いても解が求まらない場合は、その問題を破棄するものとする。また、変数 x の次元 n として 5 から 100 までの 11 通りを考え、各 n に対してテスト問題を 100 題ずつ生成した。プログラムの終了条件は $|F(\alpha)| \leq 10^{-5}$ とした。なお、今回の実験では、CPU が Intel(R) Core(TM)2 Duo (2.26GHz) であり、メモリが 2GB であるような計算機上で行い、アルゴリズムは MATLAB 7.10.0 を用いて実装した。

得られた解が大域的最適解かどうかの判定は、次のようにして行った。手法 A の場合は、最後の反復において部分問題 (4.1) を手順 1 で解いたときに、大域的最適性の条件 (4.4) を満たすかどうかで判断した。手法 B の場合は、手法 A において大域的最適性の条件 (4.4) が満たされたときに目的関数の値が一致しているかどうかで判断した。また、 $\alpha_1 := f_1(0)/f_2(0)$ とした。

表 1 は、各 n に対する 100 回の試行 (すなわち、解いた 100 個のテスト問題) のうち、最終的にアルゴリズム 1 の終了条件が満たされた回数 (正常終了回数) と得られた解の大域的最適性が保証できた回数を表している。これより、手法 B では問題の大域的最適解が得られなかったが、手法 A によって大域的最適解が得られるような問題例があったことがわかる。また、終了条件が満たされた回数を比較しても手法 A のほうが優れている。表 2 は、手法 A と B が終了条件を満たすまでにかかった最大、最小、平均の計算時間である。平均時間を比べると、 n が小さい場合には手法 B の計算時間は短い、 n が大きくなるにつれて手法 A のほうが短くなることがわかる。これには次のような理由が考えられる。手法 A では部分問題 (4.1) を直接 fmincon で解く (手順 1 の Step 2 が実行される) ことは

ほとんどなく、しかも双対問題 (4.3) は線形な半正定値計画問題であるため、SDPT3 が効率的に働いているものと推測される。一方、手法 B では、部分問題 (4.1) を毎回 `fmincon` で直接解くので、行列 M_0^k, M_1, M_2 の性質によっては、非常に収束が遅くなるものと思われる。特に最大計算時間を比べると、その傾向が顕著に表れる。表 3 は、アルゴリズム 1 における終了時の外部反復回数 (部分問題を解いた回数) k の値の最大、最小、平均値である。 n が小さい場合は、部分問題を解く回数はほとんど変わらないが、 n が大きくなるにつれて手法 B を用いた場合の方がその回数が多くなっていることがわかる。理論的には、部分問題を解く際にいずれの手法でも常に大域的最適解が得られていれば、反復回数は同じはずである。しかし、特に n が大きい場合に、手法 A に比べて手法 B は反復回数が多くなっている。これは、部分問題 (4.1) を解く際に、手法 B のほうが手法 A に比べて大域的最適解が得られないことが多くあったためだと考えられる。実際、ある k において部分問題 (4.1) で大域的最適解が得られないと、関数 F を正しく評価できないため、 $|F(\alpha_k)| \geq |F(\alpha_{k+1})|$ が満たされない可能性がある。

表 1: 大域的最適性が保証された回数

n	正常終了回数		大域的最適性	
	手法 A	手法 B	手法 A	手法 B
5	100	84	94	78
10	100	93	91	84
20	99	100	93	93
30	100	99	98	97
40	97	98	91	89
50	100	99	91	90
60	100	96	98	94
70	100	100	97	97
80	100	99	98	97
90	100	100	99	99
100	100	100	97	97

6 結論

本書では、凸でない二次制約を二つもつような非凸二次分数計画問題に対して、Dinkelbach のパラメトリックアプローチと Beck and Elder の強双対性条件とを組み合わせた手法を提案した。また、数値実験でいくつかのテスト問題に対して提案手法を適用し、その有効性を確認した。今後の課題としては、二次制約が三つ以上あったり、目的関数が分数の和で表されるような、より複雑な分数計画問題に対して効率的なアルゴリズムを開発することなどが挙げられる。

参考文献

- [1] I. M. Stancu-Minasian, *Fractional Programming Theory, Methods and Applications*, Kluwer Academic Publishers, 1997.
- [2] A. Ben-Tal and A. Nemirovski, *Lectures on Modern Convex Optimization: Analysis, Algorithms, and Engineering, Applications*, MPS-SIAM Series on Optimization, SIAM, Philadelphia, 2001.

表 2: 計算時間

n	平均時間		最大時間		最小時間	
	手法 A	手法 B	手法 A	手法 B	手法 A	手法 B
5	0.93	0.18	1.64	0.59	0.55	0.06
10	1.27	0.43	2.15	0.87	0.55	0.11
20	3.58	1.30	6.61	3.60	1.76	0.36
30	4.73	3.82	14.2	10.91	1.93	1.08
40	6.55	7.28	31.15	37.53	2.29	1.64
50	7.14	14.74	21.36	127.08	2.87	2.04
60	9.16	28.45	54.98	217.84	2.93	3.09
70	10.59	37.03	112.79	203.07	3.88	3.85
80	13.40	61.94	91.78	394.36	4.37	4.87
90	17.50	61.16	224.60	434.07	4.38	6.02
100	20.07	91.05	299.71	437.02	5.21	7.25

表 3: 部分問題を解いた回数

n	平均回数		最大回数		最小回数	
	手法 A	手法 B	手法 A	手法 B	手法 A	手法 B
5	5.89	5.71	9	9	4	3
10	7.40	7.15	11	11	4	4
20	8.33	8.12	12	12	4	4
30	8.74	8.40	13	15	4	4
40	9.84	9.73	19	29	4	4
50	9.22	11.40	18	54	4	4
60	9.93	14.38	30	72	4	4
70	9.59	14.90	41	59	4	4
80	10.21	19.61	44	96	4	4
90	10.82	16.39	67	86	4	4
100	10.19	17.72	58	67	4	4

- [3] A. Beck and Y. C. Elder, *Strong duality in nonconvex quadratic optimization with two quadratic constraints*, SIAM Journal on Optimization, Vol. 17, 2006, pp. 844–860.
- [4] A. Zhang and S. Hayashi, *Celis-Dennis-Tapia based approach to quadratic fractional programming problems with two quadratic constraints*, Numerical Algebra, Control and Optimization, to appear.
- [5] Y. Yuan, *On a subproblem of trust region algorithms for constrained optimization*, Mathematical Programming, Vol. 47, 1990, pp. 53–63.
- [6] J. Von Neumann, *A Model of General Economic Equilibrium*, The Review of Economic Studies, Vol. 13, No. 1, 1945–1946, pp. 1–9.
- [7] A. Charnes and W. W. Cooper, *Programming with linear fractional functionals*, Naval Research Logistics Quarterly, Vol. 9, 1962, pp. 181–186.
- [8] W. Dinkelbach, *On nonlinear fractional programming*, Management Science, Vol. 13, 1967, pp. 492–498.
- [9] H. P. Benson, *Fractional programming with convex quadratic forms and functions*, European Journal of Operational Research, Vol. 173, 2006, pp. 351–369.
- [10] G. R. Bitran and T. L. Magnanti, *Duality and sensitivity analysis for fractional programs*, Operations Research, Vol. 24, 1976, pp. 675–699.
- [11] J. P. Crouzeix and J. A. Ferland, *Algorithms for generalized fractional programming*, Mathematical Programming, Vol. 52, 1991, pp. 191–207.
- [12] J. Gotoh and H. Konno, *Maximization of the ratio of two convex quadratic functions over a polytope*, Computational Optimization and Applications, Vol. 20, 2001, pp. 43–60.
- [13] T. Ibaraki, *Parametric approaches to fractional programs*, Mathematical Programming, Vol. 26, 1983, pp. 345–362.
- [14] K. C. Toh, R. H. Tütüncü, and M. J. Todd, *SDPT3 version 4.0 – a matlab software for semidefinite-quadratic-linear programming*, <http://www.math.nus.edu.sg/~mattohc/sdpt3.html>, 2006.
- [15] R. Jagannathan, *On some properties of programming problems in parametric form pertaining to fractional programming*, Management Science, Vol. 12, 1966, pp. 609–615.
- [16] M. S. Bazaraa, H. D. Sherali, and C. M. Shetty, *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*, John Wiley and Sons, Inc., second edition, 1993.
- [17] S. Boyd and L. Vandenberghe, *Convex Optimization*, Cambridge University Press, 2004.
- [18] A. L. Fradkov and V. A. Yakubovich, *The S-procedure and the duality relation in convex quadratic programming problems*, Vestnik Leningrad University, 1973, pp. 81–87