Title	最適化理論と実代数幾何
Sub Title	Optimization theory and real algebraic geometry
Author	関口, 良行(Sekiguchi, Yoshiyuki)
Publisher	慶應義塾経済学会
Publication year	2015
Jtitle	三田学会雑誌 (Mita journal of economics). Vol.108, No.3 (2015. 10) ,p.505(29)- 519(43)
JaLC DOI	10.14991/001.20151001-0029
Abstract	近年, 代数幾何が最適化問題へ応用され, 目覚ましい成果を上げると同時に, 逆に最適化問題も代数幾何へ新たな問題を提供している。本論文では, 代数幾何が最適化理論の枠組みの中にどのように現れるかを解説し, 応用として多項式最適化問題の大域最適値を求めるアルゴリズムを具体例を用いて説明する。 Recently, real algebraic geometry has been applied to investigate optimization problems and has met with great success both in theory and in application. On the other hand, various optimization problems in the real world provide new challenges to algebraic geometry. In this paper, we explain how algebraic geometry appears in optimization theory, and as an application, we discuss algorithms for finding global optimals of polynomial optimization problems, together with concrete examples.
Notes	特集 : 経済の数理解析 : 数理経済学の新展開
Genre	Journal Article
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=AN00234610-20151001-0029

「三田学会雑誌」108 巻 3 号（2015 年 10 月）

最適化理論と実代数幾何

関口良行*

Optimization Theory and Real Algebraic Geometry

Yoshiyuki Sekiguchi*

Abstract: Recently, real algebraic geometry has been applied to investigate optimization problems and has met with great success both in theory and in application. On the other hand, various optimization problems in the real world provide new challenges to algebraic geometry. In this paper, we explain how algebraic geometry appears in optimization theory, and as an application, we discuss algorithms for finding global optimals of polynomial optimization problems, together with concrete examples.

1　導入

問題　n 変数多項式 $f(x)$ が多項式の 2 乗和で書ける。

$$f = f_1^2 + \cdots + f_2^2$$

のとき，$f(x) \geq 0,\ \forall x \in \mathbb{R}^n$ である。では逆は成り立つか？　つまり，$f(x) \geq 0,\ \forall x \in \mathbb{R}^n$ であるとき，f は多項式の 2 乗和で書けるか？

例えば，$f(x, y) = 1 - 3x^2y^2 + x^2y^4 + x^4y^2$ を考えると，$f(x, y) \geq 0,\ \forall (x, y) \in \mathbb{R}^2$ であるが，f は多項式の 2 乗和では書けない。よって，逆は成り立たない。しかし，多くの非負多項式が 2 乗和多項式である。

*　東京海洋大学海洋工学部
Faculty of Marine Technology, Tokyo University of Marine Science and Technology

多項式の最小化

この問題は，実は意外な形で最適化と関係する。実数係数の n 変数多項式の集合を $\mathbb{R}[x]$ と書く。次の最適化問題を考えよう。

$$\inf \quad f(x),\ x \in \mathbb{R}^n$$

ここで，$f(x) \in \mathbb{R}[x]$ である。するとこの問題は

$$\sup \quad r \text{ s.t. } f(x) - r \geq 0,\ \forall x \in \mathbb{R}^n$$

と明らかに同値になる。一般に，与えられた多項式が非負多項式であるか判定する問題は難しいので，この変形にはあまり意味がないように思われる。しかし，多項式が「非負多項式」であるという条件を，「2 乗和多項式」であるという条件と置き換えると，問題はずいぶん簡単になることが分かる。

いま $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$ に対して，$x^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$，$|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i$ とする。

命題 1.1　f を次数 $2d$ を持つ多項式とする。すると, f が 2 乗和多項式である $\Longleftrightarrow \exists X$: 半正定値行列, $f = u^T X u$，ここで，$u = (x^\alpha)_{|\alpha| \leq d}$ である。

解説　$f = f_1^2 + \cdots + f_n^2,\ 2d = \deg f,\ u = (x^\alpha)_{|\alpha| \leq d}$ とする。$f_k = \sum_{i=1}^n f_{k,\alpha} x^\alpha$ に対して，横ベクトル $(f_{k,\alpha})_\alpha$ を第 k 行に持つ行列を M とすると，

$$f = \begin{bmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum_\alpha f_{1,\alpha} x^\alpha \\ \sum_\alpha f_{2,\alpha} x^\alpha \\ \vdots \\ \sum_\alpha f_{n,\alpha} x^\alpha \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_n \end{bmatrix} Mu = u^T M^T M u$$

となる。$X = M^T M$ とおくと，X は半正定値行列なので，必要性が得られる。十分性は自明である。 □

この命題より，上の多項式最適化問題に対して，以下のように近似解を求めることができる。ここで $f(x) = \sum_\alpha x^\alpha$ に対して，係数 f_α を並べたベクトルを $\boldsymbol{f}$，$u = (x^\alpha)_{|\alpha| \leq \deg f}$ とし，$f(x) = \boldsymbol{f}^T u$ と書く。

$$\begin{aligned} \inf \quad f(x),\ x \in \mathbb{R}^n &= \sup \quad r \quad \text{s.t. } f(x) - r > 0,\ r \in \mathbb{R} \\ &\geq \sup \quad r \quad \text{s.t. } f(x) - r \text{ は 2 乗和多項式} \\ &= \sup \quad r \quad \text{s.t. } \boldsymbol{f}^T u - r = u^T X u,\ X \text{ は半正定値} \end{aligned}$$

最後の問題は，u に関して線形と二次形式の制約式からなる最適化問題である。このような問題は，**半正定値計画問題**と呼ばれ，高速に解くことが可能である。

2　二者択一の定理

それでは，制約つきの問題についてはどうだろうか？　制約つきの最適化問題を解く際に重要な役割を果たすのが，ファルカスの補題などの二者択一の定理である。

2.1　線形系に対する二者択一の定理

まず，連立 1 次方程式 $Ax = b$ に対して，

$$Ax = b \text{ が解を持たない} \iff \operatorname{rank} A < \operatorname{rank}[A\ b]$$

が成り立つ。これを次のように書き換える。まず，A の i 行をベクトル $a_i \in \mathbb{R}^n$，$b = (b_1, \ldots, b_m) \in \mathbb{R}^m$ とし，

$$\begin{aligned} &\mathbb{R}\langle (a_1, b_1), \ldots, (a_m, b_m) \rangle \\ &= \{ r_1(a_1, b_1) + \cdots + r_m(a_m, b_m) \mid r_i \in \mathbb{R} \} \subset \mathbb{R}^{n+1} \end{aligned}$$

とおく。すると，$Ax = b$ が解を持たないということは，行基本変形（ガウスの消去法）により，

$$\begin{bmatrix} A & b \end{bmatrix} \longrightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \\ & & & & \end{array}\right]$$

という階段行列が得られるということなので，

$$Ax = b \text{ が解を持たない} \iff (0, \ldots, 0, 1) \in \mathbb{R}\langle (a_1, b_1), \ldots, (a_m, b_m) \rangle$$

と言い換えられる。

2.1.1　線形不等式系

連立 1 次不等式に関しては以下の補題が有名である。

補題 2.1（ファルカスの補題の亜種）　行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$，$b \in \mathbb{R}^m$ に対して，

$$Ax \leq b \text{ が解を持たない} \iff \exists y \in \mathbb{R}^n_+ \text{ s.t. } A^T y = 0,\ b^T y < 0$$

こちらも同様の形式に書き換える。一般に，（適切な演算が定義された）集合 K, R と，$f_1, \ldots, f_m \in R$ に対して，

$$K\langle f_1, \ldots, f_m\rangle := \{k_1 f_1 + \cdots + k_m f_m \mid k_i \in K\}$$

と定義する[(1)]。すると，フーリエ－モツキンの消去法[(2)]を用いて，

$$Ax \leq b \text{ が解を持たない} \iff (0, \ldots, 0, -1) \in \mathbb{R}_+\langle (a_1, b_1), \ldots, (a_m, b_m)\rangle$$

と言い換えられる。ここで，$\mathbb{R}_+ = [0, \infty)$ である。制約つきの最適化問題の最適性条件である KKT 条件は，問題を線形化した後，この補題を用いて双対を求めることで得ることができる。

このような書き換えにより，二者択一の定理を代数におけるイデアルの考え方と結びつけることができる。

2.2　多項式系に対する二者択一の定理

複素数 $\mathbb{C}$ を係数とする多項式の集合を $\mathbb{C}[x]$ とする。いま一変数多項式の系

$$\begin{cases} f_1(x) = 0 \\ f_2(x) = 0 \end{cases}$$

が，$\mathbb{C}$ に解を持つかどうか調べよう。上の系が解を持たないとすると，$f_1(x)$ と $f_2(x)$ は共通因子を持たない。よって，ユークリッドの互除法[(3)]より，ある多項式 $a_1(x), a_2(x) \in \mathbb{C}[x]$ が存在して，

$$a_1(x)f_1(x) + a_2(x)f_2(x) = 1$$

が成り立つ。したがって，$1 \in \mathbb{C}[x]\langle f_1, f_2\rangle := \{a_1 f_1 + a_2 f_2 \mid a_1, a_2 \in \mathbb{C}[x]\}$ が成り立つ。一般に n 変数多項式 $f_1(x), \ldots, f_m(x) \in \mathbb{C}[x]$ に対しては，

$$f_1(x) = 0, \ldots, f_m(x) = 0 \text{ が } \mathbb{C} \text{ で解を持たない}$$
$$\iff 1 \in \mathbb{C}[x]\langle f_1(x), \ldots, f_m(x)\rangle$$

が成り立つ。$\mathbb{C}[x]\langle f_1(x), \ldots, f_m(x)\rangle$ は $\mathbb{C}[x]$ の**イデアル**と呼ばれる。

2.2.1　実零点定理

ここで，実数係数の連立 1 次方程式と不等式の解は，$\mathbb{R}^n$ のベクトルであることが自然に決まるが，多項式の場合は，係数が実数であっても，複素数解しか持たない場合がある。

（1）　代数における加群と近いものである。
（2）　フーリエ－モツキンの消去法については，［8, 5.5.3 節］を見て欲しい。
（3）　拡張されたユークリッドの互除法と呼ばれることが多い。

一般の代数幾何では，実係数の多項式に対しても複素数解を主に考える。しかし，多項式の実数解に関する研究は，最適化問題をはじめ，応用上は非常に重要である。そのような研究は，**実代数幾何**と呼ばれ，代数幾何の中でも独自の発展を遂げている。

実係数多項式 $f_1(x), \dots, f_m(x) \in \mathbb{R}[x]$ の $\mathbb{R}^n$ における可解性は，以下のように，$\mathbb{C}^n$ の場合と大きく異なる：

$$\begin{aligned} & f_1(x) = 0, \dots, f_m(x) = 0 \text{ が } \mathbb{R} \text{ で解を持たない} \\ \Longleftrightarrow & -1 \in \sum \mathbb{R}[x]^2 + \mathbb{R}[x]\langle f_1(x), \dots, f_m(x) \rangle \end{aligned}$$

ここで，

$$\sum \mathbb{R}[x]^2 := \left\{ \sum_i g_i^2 \mid g_i \in \mathbb{R}[x] \right\}$$

である。ただし，右辺の $\sum$ は有限和を表す。

実際，$x^2 + 1 = 0$ は $\mathbb{C}$ 上では解を持つが，$\mathbb{R}$ では解を持たない。よって，$I = \mathbb{R}[x]\langle x^2 + 1 \rangle$ を考えると，$1 \notin I$ だが，

$$-1 = x^2 + (-1)(x^2 + 1) \in \sum \mathbb{R}[x]^2 + \mathbb{R}[x]\langle x^2 + 1 \rangle$$

となる。

2.3　不等式系の解の存在定理

最適化問題への応用を考えるにあたっては，不等式系の解（実数解）の存在定理が必要になる。まず不等式系に関して，非常に一般的な以下の定理を紹介する。

定理 2.2（Real Nullstellensatz [1], [4]）　$f_k(x), h_i(x), g_j(x) \in \mathbb{R}[x]$ に対して，以下は同値である。

1. 以下の不等式系が実数解を持たない。

$$\begin{cases} f_k(x) > 0, k = 1, \dots, r, \\ g_i(x) \geq 0, i = 1, \dots, t, \\ h_j(x) = 0, j = 1, \dots, s \end{cases}$$

2. ある $u_k \in \mathrm{N}, a_i \in \mathbb{R}[x], \sigma_e, \tau_e \in \sum \mathbb{R}[x]^2$ が存在して，

$$\prod_k f_k^{2u_k} + \sum_{e \in \{0,1\}^r} \sigma_e f^e + \sum_{e \in \{0,1\}^t} \tau_e g^e + \sum_j a_j h_j = 0,$$

where $f^e = f_1^{e_1} \cdots f_r^{e_r}$

成り立つ。

複雑で分かりづらいので，式を少なくした以下の系を挙げる。

系 2.3　$f(x), h_j(x) \in \mathbb{R}[x]$ $(j = 1, \ldots, m)$ に対して，以下は同値である。

1. $\nexists x \in \mathbb{R}^n,\ f(x) > 0,\ h_j(x) = 0,\ j = 1, \ldots, m$
2. $\exists \ell \in \mathbb{N},\ a_j(x) \in \mathbb{R}[x],\ \sigma_0(x), \sigma_1(x) \in \sum \mathbb{R}[x]^2,$

$$f(x)^{2\ell} + \sigma_0(x) + \sigma_1(x) f(x) + \sum_j a_j(x) h_j(x) = 0$$

例 2.4

$$f(x, y) = -x - 1 > 0,\ h(x, y) = x^2 + y^2 - 1 = 0$$

を考えると，この等式・不等式系は $\mathbb{R}$ に解を持たない。実際，$\ell = 2,\ a = -1,\ \sigma_0 = y^2,\ \sigma_1 = 2$ とすると，

$$\begin{aligned} & f^2 + y^2 + 2f - h \\ & = (-x-1)^2 + y^2 + 2(-x-1) + (-1)(x^2 + y^2 - 1) = 0 \end{aligned}$$

が成り立つ。

Real Nullstellensatz の証明は，代数における体の拡大と，数理論理学的な定理を用いるもので，興味深い。以下に証明の概要を述べよう。まず，恒等式を満たす多項式が存在しないと仮定する。そして，実数より大きな体を構成して不等式系の解の存在を，その大きな体で言う。仮定より，実際にはその大きな体を実閉体と呼ばれるものとすることができる。すると，タルスキ – ザイデンベルグの定理より，多項式の等式・不等式系が実閉体で解を持つならば，実数においても解を持つことが言える。したがって，元の実数で不等式系が解を持つことが示される。逆は自明である。詳細は [4, 2.2.1] を見て欲しい。

3　多項式最適化

3.1　非負多項式の表現定理

さて，系 2.3 は強い定理ではあるが，最適化には応用しにくい。さらに仮定を強くすると，以下のような最適化へ応用可能な定理を得ることができる。以後，多項式は実数係数のもののみを扱うので，$f_i \in \mathbb{R}[x]$ に対して，イデアルを単に

$$I = \langle f_1, \ldots, f_m \rangle := \mathbb{R}[x]\langle f_1, \ldots, f_m \rangle$$

$$= \left\{ \sum_{i}^{m} a_i f_i \mid a_i \in \mathbb{R}[x] \right\}$$

と書く。I の根基 $\sqrt{I}$ を

$$\sqrt{I} := \{p \in \mathbb{R}[x] \mid \exists m \in \mathbb{N}, p^m \in I\}$$

と定義する。

3.1.1　有限集合上の非負多項式の表現

定理 3.1（Parrilo [5]）　$f(x), h_j(x) \in \mathbb{R}[x]$ $(j = 1, \ldots, m)$ に対して，$\langle h_j \rangle = \sqrt{\langle h_j \rangle}$ かつ，

$$\mathcal{V}_{\mathbb{C}}(\langle h_1, \ldots, h_m \rangle) := \{x \in \mathbb{C}^n \mid h_1(x) = 0, \ldots, h_m(x) = 0\}$$

が空でなく有限集合であるとき，以下は同値である：

1. $\nexists x \in \mathbb{R}^n,\ f(x) < 0,\ h_j(x) = 0$
2. $a_j(x),\ d_k(x) \in \mathbb{R}[x]$,
$$f(x) = \sum_k d_k(x)^2 + \sum_j a_j(x) h_j(x)$$

言い換えると，この定理の条件下では，$f(x)$ が $h_j(x)$ の零点上で非負多項式：

$$f(x) \geq 0,\ \forall x \in \{x \in \mathbb{R}^n \mid h_1(x) = 0, \ldots, h_m(x) = 0\}$$

ならば，$f(x) = \sum_k d_k(x)^2 + \sum_j a_j(x) h_j(x)$ と表現できる，ということを保証している。

よって，定理の条件を満たす（実行可能領域が有限集合）最適化問題に対して，

$$\begin{aligned}
&\inf\ \ f(x) \text{ s.t. } h_j(x) = 0 \\
&= \sup\ \ r \text{ s.t. } f(x) - r \geq 0,\ h_j(x) = 0 \\
&= \sup\ \ r \text{ s.t. } f(x) - r = \sum_k d_k(x)^2 + \sum_j a_j(x) h_j(x)
\end{aligned}$$

が成り立ち（すべて等号），最後の問題は，現れる多項式の次数を制限すれば，半正定値計画問題で書くことができる。

3.1.2　半代数的集合上の正値多項式の表現

それでは，実行可能領域が有限でない場合はどうだろう。この場合でも，定理 3.1 のような非負多項式の表現ができれば，多項式最適化問題を半正定値計画問題で解くことができる。実行可能領域は有限とは限らない以下の問題を考える。

$$\inf \quad f(x) \text{ s.t. } x \in g_i(x) \geq 0,\ h_j(x) = 0$$

この問題の制約式から，以下を定義する。

$$
\begin{aligned}
M &= \Big\{\sigma_0 + \sum_i \sigma_i g_i + \sum_i a_j h_j \mid \sigma_i \in \sum \mathbb{R}[x]^2,\ a_j \in \mathbb{R}[x]\Big\} \\
M_k &= \{M \text{ の要素で各項の次数} \le 2k\} \\
&= \Big\{\sigma_0 + \sum_i \sigma_i g_i + \sum_j a_j h_j \mid \sigma_i \in \sum \mathbb{R}[x]^2,\ a_j \in \mathbb{R}[x], \\
&\qquad\qquad \deg(a_j h_j),\ \deg \sigma_0,\ \deg(\sigma_i g_i) \le 2k\Big\}
\end{aligned}
$$

ここで，M は**二次加群**（**quadratic module**），M_k は**打切り二次加群**（**truncated quadratic module**）と呼ばれる。すると，明らかに

$$
(*) \quad p(x) \in M \Longrightarrow p(x) \ge 0 \text{ on } S := \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \ge 0,\ h_j(x) = 0\}
$$

が成り立つ。よって，

$$
\begin{aligned}
f_{\min} :=\ & \inf && f(x) && \text{s.t.} && g_j(x) \ge 0,\ h_i(x) = 0 \\
=\ & \sup && r && \text{s.t.} && f(x) - r \ge 0 \text{ on } S \\
\ge\ & \sup && r && \text{s.t.} && f(x) - r \in M \\
\ge f_k :=\ & \sup && r && \text{s.t.} && f(x) - r \in M_k
\end{aligned}
$$

が成り立ち，最後の問題は半正定値計画問題である。このように多項式最適化問題を近似する問題を**二乗和緩和問題**と呼ぶ。それでは $(*)$ の逆は成り立つだろうか？

ここで，次の条件を必要とする。二次加群 M が，

$$
\forall p(x) \in \mathbb{R}[x],\ \exists N \in \mathbb{N} \text{ such that } N \pm p(x) \in M
$$

を満たすとき，M は**アルキメデス性**を持つという；[3]，[7]。これはそれほど制限的な条件にはならない。というのは，

$$
M \text{ がアルキメデス性を持つ} \Longleftrightarrow \exists N \in \mathbb{N} \text{ s.t. } N - \sum_{i=1}^n x_i^2 \in M
$$

が成り立つので，実行可能領域 S が有界であれば，制約式に，$N - \sum_{i=1}^n x_i^2$ を加えて，実行可能領域を不変のまま M にアルキメデス性を持たせることができる。

以下の定理では，上記の制約式によって定義された二次加群 M と実行可能領域 S を用いる。

定理 3.2（Putinar [6]）　M がアルキメデス性を持つとする。もし，$p(x) \in \mathbb{R}[x]$ が S 上で，$p(x) > 0$ ならば，$p(x) \in M$;

$$
\exists \sigma_i(x) \in \mathbb{R}[x]^2,\ a_j(x) \in \mathbb{R}[x],
$$

$$p(x) = \sigma_0(x) + \sum_i \sigma_i(x)g_i(x) + \sum_j a_j(x)h_j(x)$$

である。

Putinar の定理より，上記の $f_{\min}$ に続く式で，実際には一つ目の不等号が等号であることが分かる。さらに，以下が成り立つ。

定理 3.3（Lasserre [2]） もし M がアルキメデス性を持つならば，$f_k \to f_{\min}$，$(k \to \infty)$。

半正定値計画問題を解くことで f_k が求まる。k を大きくすると，問題が大きくなるが，f_k は極限では元問題の大域最適値に等しい。よって，二乗和緩和問題を用いて，多項式最適化問題の大域最適値を近似的に求めることができる

3.1.3 二乗和緩和問題の例

以下の最適化問題を考える。

$$\begin{aligned} f_{\min} &= \inf \quad f(x,y) \quad \text{s.t.} \quad g(x,y) \geq 0 \\ &= \inf \quad x+y \quad \text{s.t.} \quad 1-x^2-y^2 \geq 0 \end{aligned}$$

この問題に対して，$M = \{\sigma_0(x,y) + \sigma_1(x,y)(1-x^2-y^2) \mid \sigma_j(x,y) \in \sum \mathbb{R}[x,y]\}$ とおくと，M はアルキメデス性を持ち，

$$\begin{aligned} f_{\min} &= \sup \quad r \quad \text{s.t.} \quad f(x,y) - r \in M \\ &\geq f_1 = \sup \quad r \quad \text{s.t.} \quad f(x,y) - r \in M_1 \\ &= \sup \quad r \\ &\qquad \text{s.t.} \quad x+y-r = \begin{bmatrix} 1 & x & y \end{bmatrix} X_0 \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ y \end{bmatrix} + X_1(1-x^2-y^2), \\ &X_0 \succeq 0,\ X_1 \geq 0,\ X_0 \in \mathbb{S}^3,\ X_1 \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

が成り立つ。ここで，$X_0 \succeq 0$ は X_0 が半正定値行列であることを表す。この問題が半正定値計画問題になることを，以下で示そう。対称行列の内積

$$\langle A, B \rangle = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ij}$$

を用いると，

$$f_1 = \sup \quad r$$

$$\text{s.t.}\quad x+y-r=\langle X_0,\begin{bmatrix}1 & x & y\\ x & x^2 & xy\\ y & xy & y^2\end{bmatrix}\rangle+X_1(1-x^2-y^2),$$

$$X_0\succeq 0,\ X_1\geq 0,\ X_0\in\mathbb{S}^3,\ X_1\in\mathbb{R}$$

を得る。現れた x,y を成分に持つ行列を以下のようにおき直す。

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix}1 & x & y\\ x & x^2 & xy\\ y & xy & y^2\end{bmatrix}&=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}+x\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{bmatrix}+y\begin{bmatrix}0&0&1\\0&0&0\\1&0&0\end{bmatrix}\\&\quad+xy\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}+x^2\begin{bmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{bmatrix}+y^2\begin{bmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}\\&=B_{00}+x\,B_{10}+y\,B_{01}+xy\,B_{11}+x^2\,B_{20}+xy\,B_{11}+y^2\,B_{02}\end{aligned}$$

ここで，B_{ij} は (i,j), (j,i) 成分が 1 で，それ以外の成分が 0 であるような対称行列である。

すると，係数比較により，

$$\begin{aligned}f_1=\sup\quad & r\\ \text{s.t.}\quad & \langle X_0,B_{00}\rangle+X_1=-r,\\ & \langle X_0,B_{10}\rangle=1,\ \langle X_0,B_{01}\rangle=1,\ \langle X_0,B_{11}\rangle=0,\\ & \langle X_0,B_{20}\rangle-X_1=0,\ \langle X_0,B_{02}\rangle-X_1=0,\\ & X_0\succeq 0,\ X_1\geq 0,\\ & X_0\in\mathbb{S}^3, X_1\in\mathbb{R}\\ =\sup\quad & r\\ \text{s.t.}\quad & \begin{bmatrix}-X_1-r & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & X_1 & 0\\ \frac{1}{2} & 0 & X_1\end{bmatrix}\succeq 0,\\ & X_1\geq 0\end{aligned}$$

を得る。よって，1 次式が目的関数であり，「1 次式を成分に持つ行列が半正定値である」，という制約を持つ最適化問題に変形でき，これは半正定値計画問題である。

3.2　モーメント問題と正値写像の表現定理

この問題の標準ラグランジュ双対は，

$$\begin{aligned} \inf \quad & \lambda_{01} + \lambda_{10} \\ \text{s.t.} \quad & 1 - \lambda_{20} - \lambda_{02} \geq 0, \\ & \begin{bmatrix} 1 & \lambda_{01} & \lambda_{10} \\ \lambda_{01} & \lambda_{20} & \lambda_{11} \\ \lambda_{10} & \lambda_{11} & \lambda_{02} \end{bmatrix} \succeq 0 \end{aligned}$$

となる。これは，モーメント問題と呼ばれる問題と関係する。

数列 $(\lambda_\alpha)_\alpha \subset \mathbb{R}$ と集合 S が与えられたとき，S 上の確率測度 μ を用いて，

$$\lambda_\alpha = \int x^\alpha \, d\mu$$

と書けるか？　このような問題を**モーメント問題**と呼び，このように書ける列 $(\lambda_\alpha)_\alpha$ を S–**モーメント列**と呼ぶ；[3]，[7]。

3.2.1　正値写像の表現

モーメント問題は次のように定式化すると，数学的に扱いやすい。

S 上の任意の確率測度 μ に対して，$p(x)$ が S 上で $p(x) \geq 0$ ならば，$\int p(x)\, d\mu \geq 0$ となる。よって，$(\lambda_\alpha)_\alpha$ に対して，線形写像 $L : \mathbb{R}[x] \to \mathbb{R}$ を $L(x^\alpha) = \lambda$ で定義すると，

$$(\lambda_\alpha)_\alpha \text{ が } S\text{–モーメント列} \Longrightarrow L(1) = 1,\ L(p) \geq 0,\ \forall p(x) \geq 0 \text{ on } S$$

という S–モーメント列の必要条件を得る。ここで，線形写像 $L : \mathbb{R}[x] \to \mathbb{R}$ に対して，$\mathbb{R}[x]$ の基底 x^α における値を $L(x^\alpha) = \lambda_\alpha$ と定めると，

$$(\lambda_\alpha)_\alpha \Longleftrightarrow L : \mathbb{R}[x] \to \mathbb{R}, \text{線形}$$

という一対一対応がある。したがって，モーメント問題は，上記の必要条件を用いて，

$$\begin{cases} L : \mathbb{R}[x] \to \mathbb{R},\ \text{linear}, \\ L(1) = 1, \\ L(p) \geq 0,\ \forall p \geq 0 \text{ on } S \end{cases} \overset{?}{\Longrightarrow} \exists \mu \in \mathcal{M}^1(S),\ L(f) = \int f(x)\, d\mu$$

が成り立つかどうか，という問題が解ければ良い。ここで，$\mathcal{M}^1(S)$ は S 上の確率測度全体を表す。

3.3　半代数的集合と正値写像

集合 S を

$$S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \geq 0,\ h_j(x) = 0\}$$

で定義する。このように多項式の等式と不等式で定義された集合を**半代数的集合**と呼ぶ。またその制約式から生成される二次加群を

$$M = \left\{\sigma_0 + \sum_i \sigma_i g_i + \sum_j a_j h_j \mid \sigma_i \in \sum \mathbb{R}[x]^2,\ a_j \in \mathbb{R}[x]\right\}$$

とする。このとき，$M \subset \{p \in \mathbb{R}[x] \mid p(x) \geq 0 \text{ on } S\}$ より，線形写像 $L : \mathbb{R}[x] \to \mathbb{R}$ に対して，

$$\begin{aligned} &L(1) = 1,\ L(p) \geq 0,\ \forall p \geq 0 \text{ on } S \\ &\Longrightarrow L(1) = 1,\ L(p) \geq 0,\ \forall p \in M \end{aligned}$$

が成り立つ。よって，

$$\begin{aligned} &f_{\min} := \inf f(x) \text{ s.t. } x \in S \\ &= \inf \int f\, d\mu \text{ s.t. } \mu \in \mathcal{M}^1(S) \\ &\geq \inf\ L(f) \text{ s.t. } L: \text{ linear},\ L(1) = 1,\ L(p) \geq 0, \forall p \geq 0 \text{ on } S \\ &\geq \inf\ L(f) \text{ s.t. } L: \text{ linear},\ L(1) = 1,\ L(p) \geq 0, \forall p \in M \\ &\geq d_k := \inf\ L(f) \text{ s.t. } L: \text{ linear},\ L(1) = 1,\ L(p) \geq 0, \forall p \in M_k \end{aligned}$$

を得る。このように多項式最適化問題を近似する問題を**モーメント緩和問題**と呼ぶ。逆の命題については，以下が成り立つ。

定理 3.4（Putinar [6]）　M がアルキメデス性を持つとする。このとき，線形写像 $L : \mathbb{R}[x] \to \mathbb{R}$ に対して，

$$\begin{aligned} &L(1) = 1,\ L(p) \geq 0,\ \forall p \in M \\ &\Longleftrightarrow \exists \mu \in \mathcal{M}^1(S),\ L(p) = \int p\, d\mu \end{aligned}$$

が成り立つ。

したがって，Putinar の定理より，以下を得る。

定理 3.5（Lasserre [2]）　M がアルキメデス性を持つならば，$d_k \to f_{\min}$，$(k \to \infty)$。

3.3.1 モーメント緩和問題の例

3.1.3 節の問題

$$\begin{aligned} &\inf \quad x+y \\ &\text{s.t.} \quad 1-x^2-y^2 \geq 0 \end{aligned}$$

に対して，モーメント緩和問題を作ろう。いま，$S = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 \mid 1-x^2-y^2 \geq 0\}$，$M = \{\sigma_0 + \sigma_1(1-x^2-y^2) \mid \sigma_0, \sigma_1 \in \sum \mathbb{R}[x,y]^2\}$ とする。前節の構成から，

$$\begin{aligned}
&\inf \quad x+y \quad \text{s.t.} \quad 1-x^2-y^2 \geq 0 \\
&= \inf \quad \int (x+y)\, d\mu \quad \text{s.t.} \quad \mu \in \mathcal{M}^1(S) \\
&\geq \inf \quad L(x+y) \\
&\quad \text{s.t.} \quad L: \text{ linear},\ L(1)=1,\ L(p) \geq 0, \forall p(x,y) \geq 0 \text{ on } S \\
&= \inf \quad L(x+y) \\
&\quad \text{s.t.} \quad L: \text{ linear},\ L(1)=1,\ L(p) \geq 0, \forall p \in M \\
&\geq \inf \quad L(x+y) \\
&\quad \text{s.t.} \quad L: \text{ linear},\ L(1)=1,\ L(p) \geq 0, \forall p \in M_k
\end{aligned}$$

を得る。ここで，

$$M_k = \{\sigma_0 + \sigma_1(1-x^2-y^2) \mid \sigma_0, \sigma_1 \in \sum \mathbb{R}[x,y]^2,\ \deg \sigma_0,\ \deg \sigma_1 + 2 \leq 2k\}$$

である。任意の $X_0 \in \mathbb{S}^3_+$, $X_1 \geq 0$ に対して，

$$q = \langle X_0, \begin{bmatrix} 1 & x & y \\ x & x^2 & xy \\ y & xy & y^2 \end{bmatrix} \rangle + X_1(1-x^2-y^2) \in M_1$$

である。ここで，$L(x^\alpha) = \lambda_\alpha$ とすると，

$$L(q) = \langle X_0, \begin{bmatrix} 1 & \lambda_{01} & \lambda_{10} \\ \lambda_{01} & \lambda_{20} & \lambda_{11} \\ \lambda_{10} & \lambda_{11} & \lambda_{02} \end{bmatrix} \rangle + X_1(1-\lambda_{20}-\lambda_{02}) \geq 0, \quad \forall X_0 \succeq 0,\ X_1 \geq 0.$$

を得る。これより，

$$\begin{bmatrix} 1 & \lambda_{01} & \lambda_{10} \\ \lambda_{01} & \lambda_{20} & \lambda_{11} \\ \lambda_{10} & \lambda_{11} & \lambda_{02} \end{bmatrix} \succeq 0, \quad 1-\lambda_{20}-\lambda_{02} \geq 0$$

となる。よって，最後の問題は,

$$\begin{aligned} \inf \quad & \lambda_{10}+\lambda_{01} \\ \text{s.t.} \quad & 1-\lambda_{20}-\lambda_{02} \geq 0, \\ & \begin{bmatrix} 1 & \lambda_{01} & \lambda_{10} \\ \lambda_{01} & \lambda_{20} & \lambda_{11} \\ \lambda_{10} & \lambda_{11} & \lambda_{02} \end{bmatrix} \succeq 0 \end{aligned}$$

となる。これは二乗和緩和問題の双対問題と等しい。

まとめ

以上のように，実代数幾何は最適化問題の様々な場面で現れ，そして最適化問題の様々な概念を捉え直すことができる。また，単に抽象化するのみならず，多項式最適化問題の大域最適解を求めるアルゴリズムを構築する等，最適化理論にとって強力な道具となり得る。近年の計算代数の発展によって，今後の最適化理論の発展においても，特にアルゴリズムそのものの構成やアルゴリズム的な理論を構築する際に，重要な手法を提供することが予想される。

参 考 文 献

[1] J. Bochnak, M. Coste, M. F. Roy, *Real algebraic geometry*, Springer-Verlag, Berlin (1998).

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

[3] M. Laurent, Sums of squares, moments and polynomial optimization, *Emerging Applications of Algebraic Geometry*, IMA Volumes in Mathematics and its Applications, **149**, Springer-Verlag (2009) 157–270.

[4] M. Marshall, *Positive polynomials and sums of squares*, Mathematical Surveys and Monographs, **146**, American Mathematical Society, Providence, RI (2008).

[5] P. A. Parrilo, Semidefinite programming relaxations for semialgebraic problems, *Math. Program*, **96** (2003) 293–320.

[6] M. Putinar, Positive polynomials on compact semi-algebraic sets, *Indiana Univ. Math. J.*, **42**, (1993) 969–984.

[7] M. Schweighofer, Optimization of polynomials on compact semialgebraic sets, *SIAM J. Optim*, **15** (2005) 805–825.

[8] 関口良行，はじめての最適化，近代科学社，東京，2014。

要旨：近年，代数幾何が最適化問題へ応用され，目覚ましい成果を上げると同時に，逆に最適化問題も代数幾何へ新たな問題を提供している。本論文では，代数幾何が最適化理論の枠組みの中にどの

ように現れるかを解説し，応用として多項式最適化問題の大域最適値を求めるアルゴリズムを具体例を用いて説明する。

キーワード: 二者択一の定理，多項式最適化，非負多項式の表現定理，モーメント問題，正値写像の表現定理