

1 はじめに

本稿では (不定値) 2 次計画の複雑性について述べる。
一般の 2 次計画とは以下のような問題である。

$$\begin{aligned} \text{P1} \quad & \text{minimize } (1/2)\mathbf{x}^T Q \mathbf{x} + \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ & \text{subject to } A \mathbf{x} \geq \mathbf{b} \end{aligned}$$

ただし Q は $n \times n$ の対称行列、 \mathbf{c} は n -ベクトル、 A は $m \times n$ 行列、 \mathbf{b} は m -ベクトルである。

行列 Q が非負定値であるとき、問題 P1 は凸 2 次計画と呼ばれ、これを解く多項式時間の算法が存在することが知られている。しかし行列 Q が不定値行列のときは、問題 P1 は様々な意味で解くことが (一般には) 困難である。本稿では、計算の複雑さの理論から見た時の問題 P1 の難しさについて現在まで知られている結果の一部をまとめる。

2 一般の不定値 2 次計画問題の複雑性について

本節では 2 次計画問題の複雑性について記す。

Theorem 1 (箱型の許容解領域を持つ) 不定値 2 次計画問題は \mathcal{NP} - 困難である。

証明 次の \mathcal{NP} - 完全問題を帰着させる。

ナップサック問題

入力: n 個の正整数 $S = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ と正整数 K 。

質問: S の部分集合 S' で, $\sum_{a_i \in S'} a_i = K$ を満たすものが存在するか?

ナップサック問題の問題例が与えられたとして、これから以下の問題を作る。

$$\begin{aligned} \text{PKP} \quad & \text{minimize } \sum_{i=1}^n x_i(1-x_i) + \left(\sum_{i=1}^n a_i x_i - K\right)^2 \\ & \text{subject to } 0 \leq x_i \leq 1 \quad (i = 1, 2, \dots, n+1) \end{aligned}$$

上記の問題の最適値が 0 であることが、ナップサック問題の答が YES であることの必要十分条件である。□

問題 PKP は、箱型の許容解領域を持つ特殊な問題である。さらに特殊な問題として、許容解領域が単体であるような問題も \mathcal{NP} - 困難であることが知られている。

Theorem 2 許容解領域が単体である不定値 2 次計画問題は \mathcal{NP} - 困難である。

証明 次の \mathcal{NP} - 困難問題を帰着させる。

最大クリーク問題

入力：頂点集合 V と枝集合 E からなる無向グラフ $G = (V, E)$.

出力：グラフ G の最大クリークの大きさ.

グラフ G の隣接行列 (頂点 - 頂点行列) を A_G とする (A_G の対角成分はすべて 0 である)。グラフ G から、以下の (最大化) 問題を作る。

$$\begin{aligned} \text{PMC}(G) \quad & \text{maximize} \quad (1/2)\mathbf{x}^T A_G \mathbf{x} \\ & \text{subject to} \quad \sum_{i=1}^n x_i = 1, x_i \geq 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n). \end{aligned}$$

許容解領域が有界閉であり、目的関数が連続であることから、上記の問題は常に最適解を持つ。以下では、問題 $\text{PMC}(G)$ の最適値が α^* ならば、グラフ G の最大クリークの大きさは $1/(1 - 2\alpha^*)$ であることを示す。

もしグラフ G が大きさ k の最大クリーク $C \subseteq V$ を持つとし、値 α を $k = 1/(1 - 2\alpha)$ と定める。(このとき $\alpha = (1/2)(1 - 1/k)$ がなり立つ。)

C 中の頂点には $1/k$ の値を割り当て、 C 以外の頂点には 0 の値を割り当てたベクトルは、問題 $\text{PMC}(G)$ の許容解であり、目的関数値は α となる。ゆえに、問題 $\text{PMC}(G)$ の最適値は α 以上であることが分かる。

以下では問題 $\text{PMC}(G)$ の目的関数値が α 以下であることを、頂点の個数の帰納法で示す。問題 $\text{PCM}(G)$ の最適解 (の 1 つを) を \mathbf{x}^* とする。

(1) \mathbf{x}^* の要素中に 0 のものがあるとき。

一般性を失うことなく、 x_1^* と仮定することができる。グラフ G から頂点 1 とそれに接続する枝を除去したグラフを G' とする。問題 $\text{PCM}(G)$ と問題 $\text{PCM}(G')$ の最適値を、それぞれ $\alpha(G)$, $\alpha(G')$ とする。問題 $\text{PCM}(G)$ と問題 $\text{PCM}(G')$ の最適値は明らかに一致する。しかしグラフ G' 中の最大クリークの大きさ k' は、グラフ G の大きさ以下である。また帰納法の仮定より $k' = 1/(1 - 2\alpha(G'))$ である。以上より

$$\alpha(G) = \alpha(G') = (1/2)(1 - 1/k') \leq (1/2)(1 - 1/k) = \alpha$$

が成立する。

(2) \mathbf{x}^* の要素が全て正のとき

(2-1) グラフ G が完全グラフでない時

G 中の隣接しない頂点对を 1, 2 とする。 $|V|$ -次元ベクトル \mathbf{d} を、要素 1 が 1 で要素 2 が -1 で他は 0 であるようなものとする。頂点对 1, 2 が隣接しないことから、任意の ε において解 $\mathbf{x}^* + \varepsilon \mathbf{d}$ の目的関数値は、 $\text{PMC}(G) + \varepsilon(\sum_{v \in A(1)} x_v^* - \sum_{v \in A(2)} x_v^*)$ と書くことができる、ただし $A(v)$ は頂点 v に隣接する頂点の集合とする。 \mathbf{x}^* のすべての要素が正の値を持つことから、十分小さな正の数 ε に対し $\mathbf{x}^* + \varepsilon \mathbf{d}$ と $\mathbf{x}^* - \varepsilon \mathbf{d}$ は両方許容解である。ゆえに $\sum_{v \in A(1)} x_v^* - \sum_{v \in A(2)} x_v^* = 0$ がなり立つ。以上より、 $\varepsilon = x_2^*$ とした解 $\mathbf{x}' = \mathbf{x}^* + x_2^* \mathbf{d}$ は、 $\text{PMC}(G)$ と同じ目的関数値を持ち、要素 2 の値は 0 となる。すなわち、 $\text{PMC}(G)$ の最適解で要素に 0 を含むものが存在する。これは (1) のケースに帰着される。

(2-2) グラフ G が完全グラフのとき。

このときグラフ G の最大クリークのサイズは $k = |V|$ となっている。隣接行列は、対角要素が 0 で非対角要素がすべて 1 の行列である。ゆえに $\text{PMC}(G)$ の目的関数は

$$\text{maximize} (1/2) \left(\left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 - \sum_{i=1}^n x_i^2 \right)$$

と書くことができる。第 1 項の値は定数であることから、問題 $\text{PMC}(G)$ の目的関数は、

$$\text{minimize} \sum_{i=1}^n x_i^2$$

と置き換えることができる。この問題は凸2次計画であり、最適解はすべての頂点に $1/|V|$ の値を与えたベクトルとなる。ゆえに問題 $\text{PMC}(G)$ の最適値は $(1/2)(1^2 - |V|(1/|V|)^2) = (1/2)(1 - 1/k) = \alpha$ となり、題意は満たされる。□

上記の定理より、ある不定値2次計画を解く算法として、「許容解領域を有限個の単体に分割して、各単体毎に解いた答のなかで最適なものを選ぶ」といった分割統治法は、計算量の観点からは良くない解法であることが分かる。

上記の証明より、最大クリークの大きさを算定する指標を得ることができる。問題 $\text{PMC}(G)$ は最大化問題であることから、適当な許容解を用いることによって、最大クリークサイズの下界を求めることができる。

Corollary 3 グラフ $G = (V, E)$ の最大クリークは、 $\frac{|V|}{|V| - (|V| - 1)\theta}$ 以上である。ただし θ はグラフの枝密度、すなわち $\theta = 2|E|/(n(n-1))$ である。

証明 問題 $\text{PMC}(G)$ においてすべての変数に $1/|V|$ を割り当てれば、目的関数値は $|E|/n^2$ となり、題意は満たされる。□

また、隣接行列の性質から上界を求めることも可能である。

Corollary 4 グラフ $G = (V, E)$ の隣接行列が s 個の正の固有値を持つならば、最大クリークは、 $|V| - s + 1$ 以下である。

証明 隣接行列が s 個の正の固有値を持つことから、問題 $\text{PMC}(G)$ の任意の局所最適解において最低 $s - 1$ 本の不等式制約が等号でなりたっている。グラフ G の最大クリークの大きさを k とすれば、最適解として $|V| - k$ 個の変数が0となっているものが存在する。ゆえに $|V| - k \geq s - 1$ が成り立ち、 $k \leq |V| - s + 1$ が得られる。□

3 KKT 条件について

与えられた2次計画問題が凸2次計画の時は、KKT条件が最適解である必要十分条件となっている。凸2次計画でない時は、KKT条件は局所最適解であることの必要条件である。本節では、KKT条件を満たす解を見つける問題について議論する。

本節では以下の問題を扱う。

$$\begin{aligned} \text{P2} \quad & \text{minimize } (1/2)\mathbf{x}^T Q \mathbf{x} + \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ & \text{subject to } \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{aligned}$$

問題 P2 の KKT 条件は以下のようなものである。

$$\begin{aligned} \text{LCP}(Q, \mathbf{c}) \quad & Q \mathbf{x} + \mathbf{c} \geq \mathbf{0}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \\ & \mathbf{x}^T (Q \mathbf{x} + \mathbf{c}) = 0 \end{aligned}$$

Theorem 5 KKT条件 $\text{LCP}(Q, \mathbf{c})$ を満たす解の存在を判定する問題は \mathcal{NP} -困難である。

証明 この問題も、上記のナップサック問題を帰着させる。

ナップサック問題の問題例が与えられたとして、これから以下のような $(n+3) \times (n+3)$ の行列 Q と $(n+3)$ -ベクトル \mathbf{c} を作る。

$$\begin{bmatrix} -I_n & e_n & -e_n & \mathbf{0}_n \\ e_n^T & -1 & -1 & -1 \\ -e_n^T & -1 & -1 & -1 \\ \mathbf{0}_n^T & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c} = (a_1, a_2, \dots, a_n, -K, K, 0).$$

ある 0-1 ベクトル \mathbf{x}' がナップサック問題の解を表すベクトルならば、ベクトル $\mathbf{x}'' = (a_1 x'_1, a_2 x'_2, \dots, a_n x'_n, 0, 0, 0)^T$ は KKT 条件 $\text{LCP}(Q, \mathbf{c})$ を満たしていることは明らかである。

では逆が成り立つことを示そう。KKT 条件 $\text{LCP}(Q, \mathbf{c})$ を満たすベクトル $\mathbf{x}'' \in R^{n+3}$ が存在したとする。 $\mathbf{x}'' \geq \mathbf{0}$ より明らかに $x''_{n+1} = x''_{n+2} = x''_{n+3} = 0$ が成り立つ。さらにこれより、 $\sum_{i=1}^n x''_i = K$ と $0 \leq x''_i \leq a_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$) が成り立つ。そして、もし $x''_i < a_i$ ならば、相補条件より $x''_i = 0$ が成立する。□

許容領域が有界ならば、KKT 条件を満たす解は必ず存在する。では許容領域が有界の問題において KKT 条件を満たす解を見つける問題は \mathcal{NP} - 困難なのだろうか？

4 局所最適解

本節では局所最適解に関する問題について扱う。問題 P1 のある解 \mathbf{x} が、広義の局所最適解であるとは、以下の性質を満たすことを言う：

$$\begin{aligned} \text{LOPT} \quad & \exists \varepsilon > 0, \forall \mathbf{x}' \in \{\mathbf{x}'' \in R^n \mid A\mathbf{x}'' \geq \mathbf{b}, \|\mathbf{x} - \mathbf{x}''\| \leq \varepsilon\}, \\ & (1/2)\mathbf{x}^T Q \mathbf{x} + \mathbf{c}^T \mathbf{x} \leq (1/2)\mathbf{x}'^T Q \mathbf{x}' + \mathbf{c}^T \mathbf{x}' \end{aligned}$$

また上記の条件において、最後の条件式が厳密な不等号で満たされるとき、 \mathbf{x} は狭義の局所最適解であるという。

Theorem 6 与えられた広義の局所最適解が、狭義の局所最適解であることを判定する問題は \mathcal{NP} - 困難である。

証明 次の \mathcal{NP} - 完全問題を帰着させる。

3 集合分割問題

入力： $m \times n$ の 0-1 行列 M , ただし M の各行はちょうど 3 つの 1 を含んでいる。

質問： 等式 $Mz = \mathbf{1}$ を満たす 0-1 ベクトル z は存在するか？

3 集合分割問題の問題例が与えられたとして、これから以下の問題を作る。

$$\begin{aligned} \text{PLOPT} \quad & \text{minimize} \quad -\sum_{i=1}^n (x_i - (1/2 - x_0))(x_i - (1/2 + x_0)) = -\sum_{i=1}^n (x_i - 1/2)^2 + nx_0^2 \\ & \text{subject to} \quad M(x_1, \dots, x_n)^T + \mathbf{1}x_0 = (3/2)\mathbf{1} \\ & \quad 1/2 - x_0 \leq x_i \leq 1/2 + x_0 \quad (i = 1, 2, \dots, n) \\ & \quad x_i \geq 0 \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n) \end{aligned}$$

任意の許容解に対し目的関数値は非負であることから、解 $\mathbf{x}^* = (0, 1/2, 1/2, \dots, 1/2)$ は最適解（すなわち局所最適解）であることが分かる。以下では、この解 \mathbf{x}^* が狭義の局所最適解であることを判定する問題について議論しよう。

許容解 x' において目的関数値が 0 である必要十分条件は、任意の $i = 1, 2, \dots, n$ において $x_i = 1/2 - x_0$ または $x_i = 1/2 + x_0$ がなり立つことである。

ここで解 x^* が狭義の局所最適解でないとは仮定しよう。すると x^* と異なる解 x' が存在して、その目的関数値は 0 である。 $x^* \neq x'$ より、 $x'_0 > 0$ がなり立つ。ここで新たな解 x'' を以下のように定義する。

$$x''_i = \begin{cases} 1/2 & \text{if } i = 0 \\ 1 & \text{if } i \neq 0 \text{ and } x'_i = 1/2 + x'_0 \\ 0 & \text{if } i \neq 0 \text{ and } x'_i = 1/2 - x'_0 \end{cases}$$

すると明らかに、 (x''_1, \dots, x''_n) は等式 $Mz = 1$ を満たす 0-1 ベクトルである。

逆に等式 $Mz = 1$ を満たす 0-1 ベクトル z が存在するならば、任意の数 $0 \leq \varepsilon \leq 1/2$ において、ベクトル x^0 :

$$x^0_i = \begin{cases} \varepsilon & \text{if } i = 0 \\ 1/2 - \varepsilon & \text{if } i \neq 0 \text{ and } z_i = 0 \\ 1/2 + \varepsilon & \text{if } i \neq 0 \text{ and } z_i = 1 \end{cases}$$

は目的関数値が 0 となっている。すなわち、 x^* は狭義の局所最適解ではない。 □

広義の局所最適解を見つけることは簡単なのだろうか？これについては以下の性質が知られている。

Theorem 7 与えられた許容解が、広義の局所最適解であるかを判定する問題は \mathcal{NP} - 困難。

証明 先の問題 PLOPT の目的関数を、次の目的関数で置き換えた問題を定義する。

$$-\sum_{i=1}^n (x_i - (1/2 - x_0))(x_i - (1/2 + x_0)) - (1/2n) \sum_{i=1}^n (x_i - 1/2)^2$$

以下では、解 $x^* = (0, 1/2, 1/2, \dots, 1/2)$ が、上記の目的関数と PLOPT の制約式を持つ問題の広義の局所最適解であるかを判定する問題について議論しよう。

3 集合分割問題に 0-1 解 z が存在するならば、 $0 < \varepsilon \leq 1/2$ において、ベクトル x^0 :

$$x^0_i = \begin{cases} \varepsilon & \text{if } i = 0 \\ 1/2 - \varepsilon & \text{if } i \neq 0 \text{ and } z_i = 0 \\ 1/2 + \varepsilon & \text{if } i \neq 0 \text{ and } z_i = 1 \end{cases}$$

は許容解であり、目的関数値が $-\varepsilon^2/2 < 0$ となるため x^* は広義の局所最適解ではない。

次に x^* が広義の局所最適解ではない場合について考える。このときは、目的関数が負となる許容解 x' が存在する。制約式 $Mx + x_0 \mathbf{1} = (3/2)\mathbf{1}$ 中の任意の等式を

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_0 = 3/2$$

とする。このとき x'_1, x'_2, x'_3 のうち値が $1/2$ より大きなものが丁度 1 つ存在することを示す。もしこれがなり立つならば、値が $(1/2)$ より大きなものをすべて 1 に固定し、 $1/2$ より小さなものをすべて 0 に固定したものが 3 集合分割問題の解となり、3 集合分割問題の答は YES となる。

(1) 値が $1/2$ より大きなものは最大 1 つであることの証明。

$x'_1, x'_2 > (1/2)$ と仮定して矛盾を導く。制約式より $(3/2) = x'_1 + x'_2 + x'_3 + x'_0 > 1 + x'_3 + x'_0$, すなわち $(1/2) - x'_0 > x'_3$ がなり立つ。これは、制約式 $(1/2) - x'_0 \leq x'_3$ と矛盾。

(2) 値が $1/2$ より大きなものは 1 つは存在することの証明。

$x'_1, x'_2, x'_3 \leq (1/2)$ と仮定して矛盾を導く。 $(3/2) = x'_1 + x'_2 + x'_3 + x'_0$ より x'_1, x'_2, x'_3 のうちひとつは $(1/3)(3/2 - x'_0)$ 以上である。一般性を失うことなく、 $x'_1 \geq 1/2 - x'_0/3$ と仮定することができる。すると目的関数の第1項の値 f_1 について以下の性質が成り立つ：

$$\begin{aligned} f_1 &\geq -(x'_1 - (1/2 + x'_0))(x'_1 - (1/2 - x'_0)) = (x'_0 - (x'_1 - 1/2))(x'_1 - (1/2 - x'_0)) \\ &\geq x'_0(x'_1 - (1/2 - x'_0)) \geq x'_0(1/2 - x'_0/3 - 1/2 + x'_0) = 2/3x_0'^2. \end{aligned}$$

また目的関数の第2項 f_2 については、

$$f_2 = -1/2n \sum_{i=1}^n (x'_i - 1/2)^2 \leq -n/(2n)x_0'^2 = -1/2x_0'^2$$

がなり立つ。ゆえに目的関数値 f は、 $f = f_1 + f_2 \geq 2/3x_0'^2 - 1/2x_0'^2 = 1/6x_0'^2$ がなり立つ。 $x^* \neq x'$ より $x'_0 > 0$ がなり立つことから $f > 0$ となり矛盾。 □

局所最適解を（なんでもいいから）1つ見つけなさいという問題は、多項式時間で解けるのだろうか？

5 線形乗法計画

本節では以下の問題がすべて \mathcal{NP} - 困難であることを示す。

$$\begin{array}{ll} \text{(P1)} & \text{minimize } x_1x_2 \\ & \text{subject to } A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}, \end{array} \quad \begin{array}{ll} \text{(P2)} & \text{minimize } x_1 - 1/x_2 \\ & \text{subject to } A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}, \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{(P3)} & \text{maximize } 1/x_1 + 1/x_2 \\ & \text{subject to } A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}, \end{array} \quad \begin{array}{ll} \text{(P4)} & \text{minimize } x_1 - x_2^2 \\ & \text{subject to } A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}. \end{array}$$

ただし $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ は d -次元ベクトル変数であり、許容解領域 $\Omega = \{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^d \mid A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}\}$ では、条件 $\forall \mathbf{x}' \in \Omega, x'_1, x'_2 > 0$ が成り立つものとする。問題 P1 は線形乗法計画と呼ばれる問題である。

以下では、まず最初に数を自乗する操作について考察する。0-1ベクトル $\mathbf{x} \in [0, 1]^n$ と正整数 p が与えられた時、値 $px_1 + p^2x_2 + p^3x_3 + \dots + p^nx_n$ を $[\mathbf{x}]_p$ と表す。任意の0-1ベクトル $\mathbf{x} \in [0, 1]^n$ に対し、 $[\mathbf{x}]_p$ の自乗は以下の式

$$([\mathbf{x}]_p)^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} x_i x_j$$

で計算することができる。この自乗を計算する式を線形不等式系で近似することを考えよう。もし $i \neq j$ ならば、 $x_i x_j$ の項を以下の制約を満たす変数 y_{ij} で置き換える：

$$0 \leq y_{ij} \leq 1, y_{ij} \leq x_i, y_{ij} \leq x_j, y_{ij} \geq x_i + x_j - 1. \quad (5.1)$$

各 i について、項 $x_i x_i$ は以下の制約を満たす変数 y_{ii} で置き換える：

$$y_{ii} = x_i. \quad (5.2)$$

変数 y を用いると $[\mathbf{x}]_p$ の自乗は以下の式で表される：

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y_{ij}.$$

線形不等式系 (5.1) より、もし x_i が x_j が 0-1 値をとっていたならば、 $y_{ij} = x_i x_j$ がなり立つ。また等式 (5.2) より、 $x_i \in [0, 1]$ が 0-1 値をとる必要十分条件は $y_{ii} = x_i x_i$ がなり立つことである。ゆえに、任意の 0-1 ベクトル \mathbf{x} に対し、等式 $([\mathbf{x}]_p)^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y_{ij}$ がなり立つ。しかしながら、ベクトル $\mathbf{x} \in [0, 1]^n$ が 0-1 値を取らないときは、上記の等式がなり立つとは限らない。しかし一般に次の性質がなり立つ。

Lemma 8 ベクトル $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n$ と $\mathbf{y} \in \mathcal{R}^{n \times n}$ は以下の性質を満たすとする：

$$\begin{aligned} 0 \leq x_i \leq 1 & \quad (\text{for all } i), \\ 0 \leq y_{ij} \leq 1 & \quad (\text{for all } i, j), \\ y_{ij} \leq x_i, y_{ij} \leq x_j, y_{ij} \geq x_i + x_j - 1 & \quad (\text{for all } i, j \text{ such that } i \neq j), \\ y_{ii} = x_i & \quad (\text{for all } i). \end{aligned} \tag{5.3}$$

p を正整数とし、 \mathbf{x} は次の性質を満たすとする。ある正の数 $0 < \varepsilon < 1/2$ が存在して、 \mathbf{x} の各要素 x_i は $x_i = 0, 1$ または $\varepsilon < x_i < 1 - \varepsilon$ を満たす。

すると不等式 $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y_{ij} - ([\mathbf{x}]_p)^2 > p^2 \varepsilon / 2 - pn^2$ がなり立つ。

証明. k を $0 < x_k < 1$ を満たす最大のインデックスとする。 k より大きな任意のインデックス i では、 x_i は 0-1 値をとっており $y_{ij} = x_i x_j, \forall j$ がなり立っている。以上より次の式が導かれる。

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y_{ij} - ([\mathbf{x}]_p)^2 \\ &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k p^{i+j} y_{ij} + \sum_{i=k+1}^n \sum_{j=1}^k p^{i+j} y_{ij} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=k+1}^n p^{i+j} y_{ij} + \sum_{i=k+1}^n \sum_{j=k+1}^n p^{i+j} y_{ij} - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} x_i x_j \\ &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k p^{i+j} y_{ij} + \sum_{i=k+1}^n \sum_{j=1}^k p^{i+j} x_i x_j + \sum_{i=1}^k \sum_{j=k+1}^n p^{i+j} x_i x_j + \sum_{i=k+1}^n \sum_{j=k+1}^n p^{i+j} x_i x_j - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} x_i x_j \\ &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k p^{i+j} y_{ij} - \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k p^{i+j} x_i x_j \geq p^{2k} y_{kk} - (p^{2k} (x_k)^2 + p^{2k-1} (k^2 - 1)) \\ &= p^{2k} (x_k - (x_k)^2) - p^{2k-1} (k^2 - 1) > p^2 (x_k - (x_k)^2) - pn^2 \geq p^2 \varepsilon / 2 - pn^2 \end{aligned}$$

□

上記の定理より、 p が十分大きな数であれば、ベクトル $\mathbf{x} \in [0, 1]^n$ が 0-1 ベクトルである必要十分条件は、 $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y_{ij} - ([\mathbf{x}]_p)^2$ が非正となる事となる。この結果より問題 P4 の \mathcal{NP} -困難を導くことができる。ここでは \mathcal{NP} -困難を導くのに 3 集合分割問題を使う。

与えられた 3 集合分割問題に対し、以下の問題を定義する：

$$\begin{aligned} (\text{P4}(M)) \quad & \text{minimize} \quad \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y_{ij} - (\sum_{i=1}^n p^i x_i)^2 \\ & \text{subject to} \quad (5.3) \text{ and } M\mathbf{x} = \mathbf{1}, \end{aligned}$$

ただし M は $m \times n$ 0-1 行列であり、 $n > m$ がなり立つものとする。明らかに、等式系 $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持つならば、上記の問題の最適値は非正である。以下では $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持たない時について議論しよう。以下では問題 P4(M) の許容解領域を $\Omega(M)$ 書く。この許容解領域は有界多面体である。問題 P4(M) の制約式は $n + n^2 + 4(n^2 - n) + n + m$ 本であり $n \geq 5$ であれば n^3 より少ないことが分かる。ここで $(\mathbf{x}', \mathbf{y}')$ を多面体 $\Omega(M)$ の端点としよう。制約式の係数はすべて $-1, 0$ または 1 であることから、Cramer の規則を用いることによって、 $(\mathbf{x}', \mathbf{y}')$ の各要素は 0-1 値を持つか、あるいは区間 $[1/(n^3)^{n^3}, 1 - 1/(n^3)^{n^3}]$ に含まれることが分かる。以上より次の性質が導かれる。

Theorem 9 M を $m \times n$ の 0-1 行列とする、ただし $n > m$ かつ $n \geq 5$ である。また $p = n^{n^4}$ とする。等式系 $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持つ必要十分条件は、問題 $P_4(M)$ の最適値が非正となることである。さらに $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持たないときは、問題 $P_4(M)$ の最適値は p より大きい。

証明. もし $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持つならば、問題 $P_4(M)$ の最適値は非正である。以下では $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持たない時について議論する。多面体 $\Omega(M)$ の任意の頂点 $(\mathbf{x}', \mathbf{y}')$ において、 $(\mathbf{x}', \mathbf{y}')$ の各要素は 0-1 値をとるか区間 $[1/(n^3)^{n^3}, 1 - 1/(n^3)^{n^3}]$ に含まれている。等式系 $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ は 0-1 解を持たないことから、 \mathbf{x}' は 0-1 ベクトルではない。このとき補題 8 より以下の式がなり立つ：

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y'_{ij} - \left(\sum_{i=1}^n p^i x'_i \right)^2 > p^2 / (2(n^3)^{n^3}) - pn^2 > p(n^{n^4} / (2n^{n^3}) - n^2) > p.$$

問題 $P_4(M)$ の任意の許容解 (\mathbf{x}, \mathbf{y}) は、多面体 $\Omega(M)$ の端点の凸結合によって表される。問題 $P_4(M)$ の目的関数は凹関数であることから、任意の許容解 (\mathbf{x}, \mathbf{y}) は以下の不等式を満たす： $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y_{ij} - \left(\sum_{i=1}^n p^i x_i \right)^2 > p.$ □

以上より、問題 $P_4(M)$ を解くことによって 3 集合分割問題の答を得ることができる。問題 $P_4(M)$ 中に出現する係数の入力サイズの最大値は $\lceil \log(p^{2n}) \rceil + 1 = \lceil \log(n^{n^4})^{2n} \rceil + 1 = \lceil 2n^5 \log n \rceil + 1$ であり、問題 $P_4(M)$ の入力サイズは n の多項式サイズとなっている。以上より問題 P_4 は \mathcal{NP} - 困難である。

Theorem 10 問題 P_4 は \mathcal{NP} - 困難である。

上記の結果を、さらに一般的な問題へ拡張することができる。

Corollary 11 n を $n \geq 5$ を満たす正整数とし、 $p = n^{n^4}$ とする。関数 $g(x_0, y_0)$ は以下の性質を満たすものとする：

- (1) $\forall x_0 \in [0, np^n], \forall y_0 \in [0, n^2 p^{2n}], \text{ if } y_0 - x_0^2 \leq 0 \text{ then } g(x_0, y_0) \leq 0,$
- (2) $\forall x_0 \in [0, np^n], \forall y_0 \in [0, n^2 p^{2n}], \text{ if } y_0 - x_0^2 > p \text{ then } g(x_0, y_0) > 0.$

M は $m \times n$ の 0-1 行列とする、ただし $n > m$ かつ $n \geq 5$ である。このとき次のような問題を定義する。

$$\begin{aligned} (Pg(M)) \quad & \text{minimize} \quad g(x_0, y_0) \\ & \text{subject to} \quad (5.3) \text{ and } M\mathbf{x} = \mathbf{1}, \\ & \quad x_0 = \sum_{i=1}^n p^i x_i, \\ & \quad y_0 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y_{ij}. \end{aligned}$$

問題 $Pg(M)$ の最適値が非正である必要十分条件は、等式系 $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持たないことである。

次に問題 P_1 が \mathcal{NP} - 困難であることを示そう。
この証明では、次のような特殊な関数を用いる：

$$\begin{aligned} g_1(x_0, y_0) &= (y_0 - p + 2p^{4n})^2 - 4p^{4n} x_0^2 - 4p^{8n} \\ &= (y_0 - p + 2p^{4n} + 2p^{2n} x_0)(y_0 - p + 2p^{4n} - 2p^{2n} x_0) - 4p^{8n} \end{aligned}$$

ただし $p = n^{n^4}$ である。以下では、関数 $g_1(x_0, y_0)$ が Corollary 11 の条件を満たすことを示そう。

(1) もし (x_0, y_0) が $x_0 \in [0, np^n]$, $y_0 \geq 0$, $y_0 - x_0^2 \leq 0$, $p = n^{n^4}$ を満たすならば、

$$\begin{aligned} g_1(x_0, y_0) &\leq (y_0 - p)^2 + 2(y_0 - p)2p^{4n} + 4p^{8n} - 4p^{4n}y_0 - 4p^{8n} \leq (y_0 - p)^2 - 4p^{4n+1} \\ &\leq (y_0)^2 + p^2 - 4p^{4n+1} \leq (x_0)^4 + p^2 - 4p^{4n+1} \leq n^4 p^{4n} + p^2 - 4p^{4n+1} \leq 0 \end{aligned}$$

がなり立つ。

(2) もし (x_0, y_0) が $y_0 - x_0^2 > p$ と $y_0 \geq 0$ を満たすならば、

$$g_1(x_0, y_0) > (x_0^2 + 2p^{4n})^2 - 4p^{4n}x_0^2 - 4p^{8n} = x_0^4 \geq 0.$$

が成立する。

以上より次の問題が \mathcal{NP} -困難であることを導くことができる：

$$\begin{aligned} (\text{P1}(M)) \quad &\text{minimize} && z_1 z_2 \\ &\text{subject to} && (5.3) \text{ and } M\mathbf{x} = \mathbf{1}, \\ &&& x_0 = \sum_{i=1}^n p^i x_i, \\ &&& y_0 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p^{i+j} y_{ij}, \\ &&& z_1 = (y_0 - p + 2p^{4n} + 2p^{2n}x_0), \\ &&& z_2 = (y_0 - p + 2p^{4n} - 2p^{2n}x_0). \end{aligned}$$

Corollary 11 より、問題 $\text{P1}(M)$ の最適値が $4p^{8n}$ 以下であることが、 $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持つ必要十分条件である。ゆえに次の定理が導かれる。

Theorem 12 *Problem P1 is NP-hard.*

証明. 問題 $\text{P1}(M)$ を解くことにより、3 集合分割問題の答を得ることができる。問題 $\text{P1}(M)$ 中に出現する最大の係数は $2p^{4n} = 2(n^{n^4})^{4n} = 2n^{4n^5}$ であり、判定のための閾値は $4p^{8n} = 4(n^{n^4})^{8n} = 4n^{8n^5}$ である。ゆえに、問題 $\text{P1}(M)$ と閾値の入力サイズは n の多項式サイズである。明らかに問題 $\text{P1}(M)$ は問題 P1 の特殊ケースであることから、題意は示された。□

問題 $\text{P1}(M)$ の任意の許容解において $z_1 > 0$ と $z_2 > 0$ が成り立っている。なぜならば、 p が十分大きな数であることから $z_1 > 0$ は明らかであり、 z_2 については以下の式：

$$z_2 \geq -p + 2p^{4n} - 2p^{2n}np^n = -p + 2p^{4n} - 2np^{3n}$$

が成立し、仮定 $n \geq 5$ と $p = n^{n^4}$ より $z_2 > 0$ が成り立つ。

次に問題 P2 について議論しよう。3 つの正の数 z_1, z_2, a において、性質 $z_1 z_2 \leq a^2$ が成り立つ必要十分条件は $z_1 - a^2/z_2 \leq 0$ である。ゆえに 3 集合分割問題の答を以下の問題を解くことによって得ることができる：

$$\begin{aligned} (\text{P2}(M)) \quad &\text{minimize} && z_1 - 1/z_3 \\ &\text{subject to} && \text{constraints of Problem P1}(M), \\ &&& z_3 = z_2/(4p^{8n}). \end{aligned}$$

問題 $\text{P2}(M)$ の最適値は非正である必要十分条件は、等式系 $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持たないことである。ゆえに次の定理が得られる。

Theorem 13 *問題 P2 は NP-困難である。*

最後に問題 P3 について議論しよう. 3つの正の数字 z_1, z_2, a において、 $z_1 z_2 \leq a^2$ が成り立つ必要十分条件は、 $1/(z_1 + a) + 1/(z_2 + a) \geq 1/a$ が成り立つことである。ゆえに3集合分割問題の答を以下の問題を解くことによって得ることができる：

$$\begin{aligned}
 (\text{P3}(M)) \quad & \text{maximize} \quad 1/z_4 + 1/z_5 \\
 & \text{subject to} \quad \text{constraints of Problem P1}(M), \\
 & \quad \quad \quad z_4 = z_1 + 2p^{4n}, \\
 & \quad \quad \quad z_5 = z_2 + 2p^{4n}.
 \end{aligned}$$

問題 P3(M) の最適値が $1/2p^{4n}$ 以上である必要十分条件は、 $M\mathbf{x} = \mathbf{1}$ が 0-1 解を持つことである。ゆえに以下の性質が得られる。

Theorem 14 問題 P3 は \mathcal{NP} -困難である。

References

- [1] M. R. Garey and D. S. Johnson, “Computers and intractability: A guide to the theory of NP-completeness,” Freeman, 1979.
- [2] R. Horst and P.M. Pardalos, “Handbook of global optimization,” Kluwer Academic Publishers, 1995.
- [3] R. Horst, P.M. Pardalos and N.V. Thoai, “Introduction to Global Optimization,” Kluwer Academic Publishers, 1995.
- [4] R.M. Karp, Reducibility among combinatorial problems. in “Complexity of Computer Computations,” (R.E. Miller and J.W. Thatcher eds.) Plenum Press, 1972.
- [5] H. Konno, P.T. Thach and H. Tuy, “Global Optimization: Low Rank Nonconvex Structures,” Kluwer Academic Publishers (to appear).
- [6] Tomomi MATSUI, “NP-hardness of Linear Multiplicative Programming and Related Problems,” Journal of Global Optimization, 9, 113-119 (1996).
- [7] P.M. Pardalos and S.A. Vavasis, “Open questions in complexity theory for numerical optimization,” Mathematical Programming, 57, 337-339 (1992).