多項式計画問題とその緩和

東京工業大学　情報理工学研究科
数理・計算科学専攻
小島政和

第３２回 制御理論シンポジウム

カリアック（静岡県浜松市村櫛町4597浜名湖頭脳公園内）

２００３年１１月５日ー７日

目標＝“凸性を持たない問題の大域的最適化”

内容

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と SOS (Sums of Squares of Polynomials)
3. 制約条件の付かない多項式最適化問題とその SOS 緩和
4. SOS 緩和の SDP (半正定値計画問題) への帰着
5. 不等式条件付き多項式最適化問題とその Lagrange 双対問題
6. 一般化 Lagrange 双対問題
7. 一般化 Lagrange 双対問題の SDP への帰着

$\mathbb{R}^n$: n-次元 Euclid 空間，n-次元ベクトルの空間.

$x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$: ベクトル変数.

$f_j(x)$: $x \in \mathbb{R}^n$ に関する n 変数多項式 $(j = 0, 1, \dots, m)$.

多項式最適化問題: min $f_0(x)$ sub.to $f_j(x) \geq 0$ $(j = 1, \dots, m)$.

例. $n = 3$

$$
\begin{array}{rl}
\text{min} & f_0(x) \equiv x_1^3 - 2x_1x_2^2 + x_1^2x_2x_3 - 4x_3^2 \\
\text{sub.to} & f_1(x) \equiv -x_1^2 + 5x_2x_3 + 1 \geq 0, \\
& f_2(x) \equiv x_1^2 - 3x_1x_2x_3 + 2x_3 + 2 \geq 0, \\
& f_3(x) \equiv -x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 + 1 \geq 0, \\
& x_1(x_1 - 1) = 0 \ (\text{0-1 整数条件}), \\
& x_2 \geq 0,\ x_3 \geq 0,\ x_2x_3 = 0 \ (\text{相補性条件}).
\end{array}
$$

- 多項式最適化問題の記述力は高い.
- 非線形最適化+組合せ最適化分野での大域的最適化の数理モデル.

半正定値計画緩和に対する２種類のアプローチ [1], [2]

$$\textbf{POP:}\quad \min\ f_0(x)\quad \text{sub.to}\quad f_i(x) \geq 0\ (i = 1, \ldots, m),$$

POP	$\Rightarrow$	**一般化 Lagrange 双対問題(緩和)**
$\Updownarrow$ **LMI 妥当不等式の追加**	**双対**	$\Downarrow$
POP SDP		$\Downarrow$ **SOS 緩和**
$\Downarrow$ **線形化**	**双対**	$\Downarrow$
SDP(緩和) [3]	$\Leftrightarrow$	**SDP(緩和) [4]**

[1] **S.Kim, M.Kojima and H.Waki, "Generalized Lagrangian duals and sums of squares relaxations of sparse POPs", B395, Sep. 2003.**

[2] **M.Kojima, S.Kim and H.Waki, "A general framework for convex relaxation of polynomial optimization problems over cones", *J. of OR Society of Japan*, 46 (2003) 125-144.**

[3] **J.B.Lasserre, "Global optimization with polynomials and the problems of moments", *SIAM J. on Optimization*, 11 (2001) 796–817.**

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

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と SOS (Sums of Squares of Polynomials)
3. 制約条件の付かない多項式最適化問題とその SOS 緩和
4. SOS 緩和の SDP (半正定値計画問題) への帰着
5. 不等式条件付き多項式最適化問題とその Lagrange 双対問題
6. 一般化 Lagrange 双対問題
7. 一般化 Lagrange 双対問題の SDP への帰着

$$f(x)\ :\ n\text{ 変数非負多項式} \quad \Leftrightarrow \quad f(x) \geq 0\ (\forall x \in \mathbb{R}^n).$$

$\mathcal{N}$: n 変数非負多項式の集合.

n 変数多項式 $f(x)$: SOS (Sum of Squares of Polynomials)

$$\Updownarrow$$

$f(x)$: (複数個の) n 変数多項式の 2 乗和，すなわち

$$\exists\text{ 有限本の } n \text{ 変数多項式 } g_1(x),\ldots,g_k(x);\ f(x) = \sum_{i=1}^{k} g_i(x)^2.$$

Σ : n 変数 SOS の集合. $\Sigma_{2r} \subset \Sigma$: 高々 r 次の n 変数多項式の 2 乗和.

例. $n = 2$. $f(x_1, x_2) = (x_1^2 - 2x_2 + 1)^2 + (3x_1x_2 + x_2 - 4)^2 \in \Sigma_4$.

例. $n = 2$. $f(x_1, x_2) = (x_1x_2 - 1)^2 + x_1^2 \in \Sigma_4$.

$$\inf\{f(x_1, x_2) : (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2\} = 0; 0 < x_1 \to 0,\ x_2 = 1/x_1,$$

$\not\exists$ 最小点

$$f(x) \; : \; n \text{ 変数非負多項式} \quad \Leftrightarrow \quad f(x) \geq 0 \; (\forall x \in \mathbb{R}^n).$$

$\mathcal{N}$: n 変数非負多項式の集合.

n 変数多項式 $f(x)$: SOS (Sum of Squares of Polynomials)

$$\Updownarrow$$

$f(x)$: (複数個の) n 変数多項式の２乗和，すなわち

$$\exists \text{ 有限本の } n \text{ 変数多項式 } g_1(x), \ldots, g_k(x);\; f(x) = \sum_{i=1}^{k} g_i(x)^2.$$

Σ : n 変数 SOS の集合. $\Sigma_{2r} \subset \Sigma$: 高々 r 次の n 変数多項式の２乗和.

- 理論的には，$\Sigma \subset \mathcal{N}$，$\Sigma \neq \mathcal{N}$.
- ただし，$f(x) \notin \Sigma$ なる $f(x) \in \mathcal{N}$ は稀少.
- 実用的上これを同一視する $\Longrightarrow$ Sums of Squares Optimization, Relaxation.
- $n = 1$ のときは，$\Sigma = \mathcal{N}$. $\forall n \geq 1$ で，２次 n 変数非負多項式の集合 $= \Sigma_2$.

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と SOS (Sums of Squares of Polynomials)
3. 制約条件の付かない多項式最適化問題とその SOS 緩和
4. SOS 緩和の SDP (半正定値計画問題) への帰着
5. 不等式条件付き多項式最適化問題とその Lagrange 双対問題
6. 一般化 Lagrange 双対問題
7. 一般化 Lagrange 双対問題の SDP への帰着

$$\mathcal{P}\text{:}\quad \min_{x \in \mathbb{R}^n} \ f(x)$$ (ただし $f(x)$ は $x \in \mathbb{R}^n$ に関する $2r$ 次 n 変数多項式)

$$\Updownarrow$$

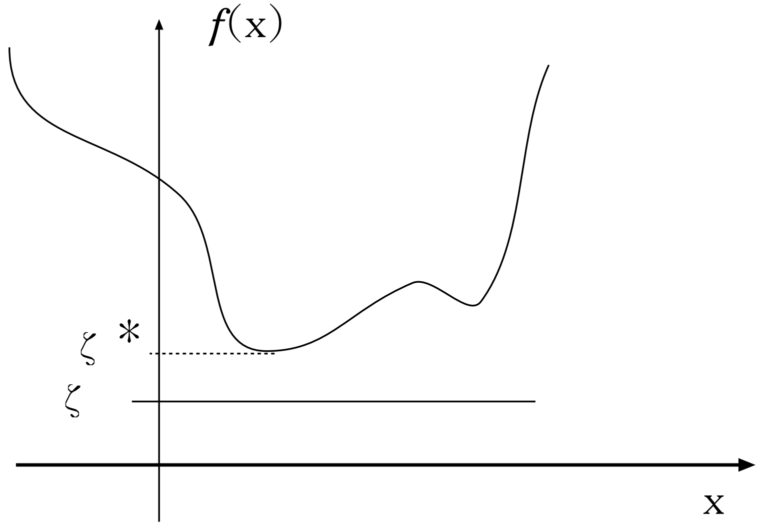
半無限計画

$$\mathcal{P}\text{':}\quad \max\ \zeta \quad \text{sub.to} \quad f(x) - \zeta \geq 0 \ (\forall x \in \mathbb{R}^n)$$

$$\Updownarrow$$

$$f(x) - \zeta \in \mathcal{N}$$ (n 変数非負多項式の集合)

ここで，x は変数ではない！ 無限個の不等式を記述するインデックス．



$\mathcal{P}$: $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ (ただし $f(x)$ は $x \in \mathbb{R}^n$ に関する $2r$ 次 n 変数多項式)

$$\Updownarrow$$

半無限計画

$\mathcal{P}$': $\max\ \zeta$ sub.to $f(x) - \zeta \geq 0$ $(\forall x \in \mathbb{R}^n)$

$$\Updownarrow$$

$f(x) - \zeta \in \mathcal{N}$ (n 変数非負多項式の集合)

$\Sigma_{2r} \subset \Sigma \subset \mathcal{N}$ $\Downarrow$ $\mathcal{P}'$ の部分問題 $= \mathcal{P}$ の緩和

$\mathcal{P}$": $\max\ \zeta$ sub.to $f(x) - \zeta \in \Sigma_{2r}$ (高々 r 次の n 変数多項式の２乗和)

$\mathcal{P}$ の最小値 $= \mathcal{P}'$ の最大値 $\geq \mathcal{P}$" の最大値

$\Downarrow$

SDP (半正定値計画問題に帰着)

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と SOS (Sums of Squares of Polynomials)
3. 制約条件の付かない多項式最適化問題とその SOS 緩和
4. SOS 緩和の SDP (半正定値計画問題) への帰着
5. 不等式条件付き多項式最適化問題とその Lagrange 双対問題
6. 一般化 Lagrange 双対問題
7. 一般化 Lagrange 双対問題の SDP への帰着

高々 r 次の n 変数多項式の２乗和の集合

$$\Sigma_{2r} \equiv \left\{ \sum_{i=1}^{k} g_i(x)^2 \;:\; k \geq 1,\; g_i(x) \text{ は高々 } r \text{ 次の } n \text{ 変数多項式} \right\}$$

の表現.

高々 r 次の n 変数多項式の基底をなす単項式よりなるベクトル

$$u_r(x)^T = (1, x_1, x_2, \ldots, x_n, x_1^2, x_1x_2, x_1x_3, \ldots, x_n^2, \ldots, x_1^r, \ldots, x_n^r)^T$$

とすると，任意の r 次の n 変数多項式 $g(x)$ は，

$$g(x) = a^T u_r(x) \text{ for } \exists a \in \mathbb{R}^{d(r)}$$

と表現できる．ただし，$d(r) \equiv \binom{n+r}{r}$ は $u_r(x)$ の次元.

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}\Sigma_{2r} &= \left\{ \sum_{i=1}^{k} \left(a_i^T u_r(x)\right)^2 \;:\; k \geq 1,\; a_i \in \mathbb{R}^{d(r)} \right\} \\ &= \left\{ u_r(x)^T V u_r(x) \;:\; V \text{ は } d(r) \times d(r) \text{ 半正定値行列} \right\}.\end{aligned}$$

例. $\underline{\text{高々 3 次の 1 変数多項式}}$の２乗和の集合

$$\Sigma_6 \equiv \left\{ \sum_{i=1}^{k} g_i(x)^2 \;:\; k \geq 1,\; g_i(x) \text{ は } \underline{\text{高々 3 次の 1 変数多項式}} \right\}$$

$$= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}^T V \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \;:\; V \text{ は } 4 \times 4 \text{ 半正定値行列} \right\}$$

例. $\underline{\text{高々 2 次の 2 変数多項式}}$の２乗和の集合

$$\Sigma_4 \equiv \left\{ \sum_{i=1}^{k} g_i(x)^2 \;:\; k \geq 1,\; g_i(x) \text{ は } \underline{\text{高々 2 次の 2 変数多項式}} \right\}$$

$$= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}^T V \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix} \;:\; V \text{ は } 6 \times 6 \text{ 半正定値行列} \right\}$$

SOS 最適化 $\Longrightarrow$ SDP，例：$f(x) = -x_1 + 2x_2 + 3x_1^2 - 5x_1^2x_2^2 + 7x_2^4$

$\max \zeta$ sub.to $f(x) - \zeta \in \Sigma_4$ (高々 2 次の 2 変数多項式の 2 乗和の集合)

$\Downarrow$

max $\quad \zeta$

Sum of Squares

$$\text{sub.to } f(x) - \zeta = \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} & V_{14} & V_{15} & V_{16} \\ V_{12} & V_{22} & V_{23} & V_{24} & V_{25} & V_{26} \\ V_{13} & V_{23} & V_{33} & V_{34} & V_{35} & V_{36} \\ V_{14} & V_{24} & V_{34} & V_{44} & V_{45} & V_{46} \\ V_{15} & V_{25} & V_{35} & V_{45} & V_{55} & V_{56} \\ V_{16} & V_{26} & V_{36} & V_{46} & V_{56} & V_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}$$

$6 \times 6 \; V \succeq O$

$\Updownarrow$ 等式の両辺での 1，x_1，x_2，x_1^2，x_1x_2, x_2^2 の係数が一致

SDP (半正定値計画問題)

$\max\ \zeta$ sub.to $-\zeta = V_{11}$，$-1 = 2V_{12}$，$2 = 2V_{13}$，$3 = 2V_{14} + V_{22}$，
$-5 = 2V_{46} + V_{55}$，$7 = V_{66}$，その他 $0 = \cdots$ ，$V \succeq O$

一般には，等式条件は ζ と V の要素に関する線形方程式系になる．

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と SOS (Sums of Squares of Polynomials)
3. 制約条件の付かない多項式最適化問題とその SOS 緩和
4. SOS 緩和の SDP (半正定値計画問題) への帰着
5. 不等式条件付き多項式最適化問題とその Lagrange 双対問題
6. 一般化 Lagrange 双対問題
7. 一般化 Lagrange 双対問題の SDP への帰着

$$\text{POP:}\ \min\ f_0(x)\ \text{sub.to}\ x \in S \equiv \{x \in \mathbb{R}^n : f_j(x) \geq 0\ (j = 1,\ldots,m)\}$$

Lagrange 関数: $L(x,w) = f_0(x) - w_1 f_1(x)\ \cdots\ - w_m f_m(x)$.
ただし，$w \in \mathbb{R}^m_+ \equiv \{w = (w_1,\ldots,w_m) \in \mathbb{R}^m : w_j \geq 0\}$.

Lagrange 関数の性質： $\forall w \in \mathbb{R}^m_+$ に対して，
$x \in S \Rightarrow f_j(x) \geq 0\ (\forall j) \Rightarrow$

$$L(x,w) = f_0(x) - w_1 f_1(x)\ \cdots\ - w_m f_m(x) \leq f_0(x)$$

Lagrange 緩和問題： $\forall w \in \mathbb{R}^m_+$ を固定して， $\displaystyle\min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x,w)$

したがって， $\displaystyle\min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x,w) \leq \min_{x \in S} f_0(x)\ (\forall w \in \mathbb{R}^m_+)$

Lagrange 双対問題： $\displaystyle\max_{w \in \mathbb{R}^m_+}\ \min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x,w)$

$w_j \geq 0$ を $\varphi_j(x) \in \Sigma$ に置き換える $\Longrightarrow$ 一般化 Lagrange 緩和, 双対問題

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と SOS (Sums of Squares of Polynomials)
3. 制約条件の付かない多項式最適化問題とその SOS 緩和
4. SOS 緩和の SDP (半正定値計画問題) への帰着
5. 不等式条件付き多項式最適化問題とその Lagrange 双対問題
6. 一般化 Lagrange 双対問題
7. 一般化 Lagrange 双対問題の SDP への帰着

$$\text{POP: } \min\ f_0(x) \text{ sub.to } x \in S \equiv \{x \in \mathbb{R}^n : f_j(x) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m)\}$$

一般化 Lagrange 関数: $L(x, \varphi) = f_0(x) - \varphi_1(x) f_1(x)\ \cdots\ - \varphi_m(x) f_m(x)$.

ただし，$\varphi(x) \in \Sigma^m \equiv \{\varphi(x) = (\varphi_1(x), \ldots, \varphi_m(x)) : \varphi_j \in \Sigma\}$.

一般化 Lagrange 緩和問題： $\forall \varphi(x) \in \Sigma^m$ を固定して， $\displaystyle\min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \varphi)$

一般化 Lagrange 関数の性質： $\forall \varphi(x) \in \Sigma^m$ に対して，

$$x \in S \Rightarrow f_j(x) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m) \Rightarrow L(x, \varphi) \leq f_0(x)$$

したがって， $\displaystyle\min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \varphi) \leq \min_{x \in S} f_0(x)\ (\forall \varphi(x) \in \Sigma^m)$

一般化 Lagrange 双対問題： $\displaystyle\max_{\varphi(x) \in \Sigma^m}\ \min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \varphi)$

- 適当な条件のもとで， $\displaystyle\max_{\varphi(x) \in \Sigma^m}\ \min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \varphi) = \min_{x \in S} f_0(x)$
- $\displaystyle\max_{\varphi(x) \in \Sigma^m}\ \min_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \varphi)$ の近似 $\Rightarrow$ SDP.

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と SOS (Sums of Squares of Polynomials)
3. 制約条件の付かない多項式最適化問題とその SOS 緩和
4. SOS 緩和の SDP (半正定値計画問題) への帰着
5. 不等式条件付き多項式最適化問題とその Lagrange 双対問題
6. 一般化 Lagrange 双対問題
7. **一般化 Lagrange 双対問題の SDP への帰着**

$$\text{POP:}\ \min\ f_0(x)\ \text{sub.to}\ x \in S \equiv \{x \in \mathbb{R}^n : f_j(x) \geq 0\ (j = 1,\ldots,m)\}$$

一般化 Lagrange 関数: $L(x,\varphi) = f_0(x) - \varphi_1(x) f_1(x)\ \cdots\ - \varphi_m(x) f_m(x)$.

ただし，$\varphi(x) \in \Sigma^m \equiv \{\varphi(x) = (\varphi_1(x),\ldots,\varphi_m(x)) : \varphi_j(x) \in \Sigma\}$.

一般化 Lagrange 双対問題： $\displaystyle\max_{\varphi(x) \in \Sigma^m}\ \min_{x \in \mathbb{R}^n}\ L(x,\varphi)$

部分問題： $\displaystyle\max_{\varphi(x) \in \Sigma^m_{2r}}\ \min_{x \in \mathbb{R}^n}\ L(x,\varphi)$

ただし，$\Sigma^m_{2r} = \{\varphi(x) = (\varphi_1(x),\ldots,\varphi_m(x)) : \varphi_j(x) \in \Sigma_{2r}\}$.

SOS 緩和：$\max \zeta$ sub.to $L(x,\varphi) - \zeta = \psi(x) \in \Sigma_{2s},\ \varphi(x) \in \Sigma^m_{2r}$.

さらに，$\varphi_j(x) = u_r(x)^T V^j u_r(x),\ V^j \succeq O,$

$\psi(x) = u_s(x)^T V^{m+1} u_s(x),\ V^{m+1} \succeq O$ を代入$\Rightarrow$ SDP.

ただし，$2s$ は $L(x,\varphi)$ の次数.

まとめ — 1

$$\boxed{\textbf{POP:}\quad \min\ f_0(x)\quad \text{sub.to}\quad f_i(x) \geq 0\ (i = 1, \ldots, m),}$$

$$\text{Lagrange 関数}\ :\ L(x, w) = f_0(x) - w_1 f_1(x) \cdots - w_m f_{(}x)$$

$$w_j \geq 0\ \text{を}\ \varphi_j \in \Sigma_{2r}\ \text{で置き換え}$$

$$\text{一般化 Lagrange 関数}\ :\ L(x, \varphi) = f_0(x) - \varphi_1(x) f_1(x) \cdots - \varphi_m(x) f_{(}x)$$

POP	$\Rightarrow$	一般化 Lagrange 双対問題(緩和)
$\Updownarrow$ LMI 妥当不等式の追加	双対	$\Downarrow$
POP SDP(等価)		$\Downarrow$ SOS 緩和
$\Downarrow$ 線形化	双対	$\Downarrow$
SDP(緩和) Lasserre [3]	$\Leftrightarrow$	SDP(緩和) Parrilo [4]

まとめ — 2

$$\textbf{POP:}\quad \min\ f_0(x)\quad \text{sub.to}\quad f_i(x) \geq 0\ (i = 1, \ldots, m),$$

- 現時点で，大きい問題に適用するのは困難; $m,\ n \leq 10$.
- 実用化へ向けて

(a) POP のデータの疎性の有効利用

(b) より大規模な SDP 問題を高速に解くソフトウエア

(c) 並列計算

(d) 従来の方法（分枝限定法等）との併用

[1] **S.Kim, M.Kojima and H.Waki, "Generalized Lagrangian duals and sums of squares relaxations of sparse polynomial optimization problems", B395, Math. & Comp. Sciences, Tokyo Inst. Tech., Sep. 2003.**

[2] **M.Kojima, S.Kim and H.Waki, "A general framework for convex relaxation of polynomial optimization problems over cones", *J. of OR Society of Japan*, 46 (2003) 125-144.**

[3] **J.B.Lasserre, "Global optimization with polynomials and the problems of moments", *SIAM J. on Optimization*, 11 (2001) 796–817.**

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

[5] **S. Prajna, A. Papachristodoulou and P. A. Parrilo, "SOSTOOLS: Sum of Squares Optimization Toolbox for MATLAB – User's Guide", Control & Dynamical Systems, California Inst. Tech, 2002.**

[6] **M.Putinar, "Positive polynomials on compact semi-algebraic sets", *Indiana University Mathematics Journal*, 42 (1993) 969–984.**

[7] **V.Powers and T.Wörmann, "An algorithm for sums of squares of real polynomials", *J. of Pure and Applied Algebra*, 127 (1998) 99-104.**

[8] **B.Reznick, "Extremal psd forms with few terms", *Duke Mathematical Journal*, 45 (1978) 363-374.**