

半正定値計画緩和による大域的最適化

小島政和
東京工業大学

2011年10月13日(木) 14日(金)

ワークショップ「最適化理論の産業・諸科学への応用

九州大学伊都キャンパス

この講演の目的 —

多項式最適化問題に対する半正定値計画緩和の紹介

目次

1. 大域的最適化
2. 多項式最適化問題
3. 半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ
 - 3-1. 主問題の緩和 (主な道具 = 確率測度とそのモーメント)
 - 3-2. 双対問題の緩和 (主な道具 = 2 乗多項式)
4. 疎性の活用について
5. 数値計算例
6. 終わりに

目次

1. 大域的最適化
2. 多項式最適化問題
3. 半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ
 - 3-1. 主問題の緩和 (主な道具 = 確率測度とそのモーメント)
 - 3-2. 双対問題の緩和 (主な道具 = 2 乗多項式)
4. 疎性の活用について
5. 数値計算例
6. 終わりに

OP : n 次元 Euclid 空間 \mathbb{R}^n 上での最適化問題

$\min. f(x)$ sub.to $x \in S \subseteq \mathbb{R}^n$, ただし, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

大域的最適解 x^* ;

$$x^* \in S \text{ and } f(x^*) \leq f(x) \text{ for } \forall x \in S$$

を (近似) 計算したい. しかし, 一般には不可能. 仮定が必要.

種々の仮定

- 連続, 微分可能, 有界閉 ...
- 凸 \Rightarrow 局所最適解 \equiv 大域的最適解
 \Rightarrow 局所探索を繰り返すことで大域的最適解に到達
- 凸最適化の強力な手法 \ni LPs, **SDPs**, ...

OP : n 次元 Euclid 空間 \mathbb{R}^n 上での最適化問題

$\min. f(x)$ sub.to $x \in S \subseteq \mathbb{R}^n$, ただし, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

大域的最適解 x^* ;

$$x^* \in S \text{ and } f(x^*) \leq f(x) \text{ for } \forall x \in S$$

を (近似) 計算したい. しかし, 一般には不可能. 仮定が必要.

種々の仮定

- 連続, 微分可能, 有界閉 ...
- 凸 \Rightarrow 局所最適解 \equiv 大域的最適解
 \Rightarrow 局所探索を繰り返すことで大域的最適解に到達
- 凸最適化の強力な手法 \ni LPs, SDPs, ...

凸性を超えて? 適切なモデルと仮定が必要

- 多項式最適化問題 (POPs)
- 主な道具 = 半正定値計画緩和
理論的には非常に強力. 計算コストは高い.
- 疎性の活用 \implies 規模の大きな問題への適用

目次

1. 大域的最適化
2. 多項式最適化問題
3. 半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ
 - 3-1. 主問題の緩和 (主な道具 = 確率測度とそのモーメント)
 - 3-2. 双対問題の緩和 (主な道具 = 2 乗多項式)
4. 疎性の活用について
5. 数値計算例
6. 終わりに

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

$f_j(\boldsymbol{x})$: x_1, \dots, x_n の実多項式 ($j = 0, 1, \dots, m$)

POP: $\min f_0(\boldsymbol{x})$ sub.to $f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0$ or $= 0$ ($j = 1, \dots, m$)

例. $n = 3$, $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$: 変数ベクトル

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

- さまざまな問題 (0-1 整数計画を含む) \Rightarrow POP
- POP — 非線形および組合せ最適化問題を含む大域的最適化の統一的なモデルの役割を果たす.

目次

1. 大域的最適化
2. 多項式最適化問題
3. 半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ
 - 3-1. 主問題の緩和 (主な道具 = 確率測度とそのモーメント)
 - 3-2. 双対問題の緩和 (主な道具 = 2 乗多項式)
4. 疎性の活用について
5. 数値計算例
6. 終わりに

半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ [1], [2]

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

POP (主問題の緩和)

⇒

一般化 Lagrange 双対 (緩和)

⇓

双対

⇓

⇓

⇓ SOS 緩和の“無限列”

⇓

双対

⇓

SDP(緩和)の“無限列” [1]

⇔

SDP(緩和)の“無限列” [2]

[1] Lasserre, “Global optimization with polynomials and the problems of moments”, *SIAM J. on Optim.* (2001).

[2] Parrilo, “Semidefinite programming relaxations for semialgebraic problems”, *Math. Prog.* (2003).

(a) POP の最小値の下界.

(b) 理論的には下界は POP の真の最小値に収束.

(c) 緩和問題は SDP として解ける. そのサイズは, (高精度を要求するほど)“無限列”に沿って急速に増加.

(d) 実用上大規模問題に適用不可能 ⇒ 多項式の疎性の活用

目次

1. 大域的最適化
2. 多項式最適化問題
3. 半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ
 - 3-1. 主問題の緩和 (主な道具 = 確率測度とそのモーメント)
 - 3-2. 双対問題の緩和 (主な道具 = 2 乗多項式)
4. 疎性の活用について
5. 数値計算例
6. 終わりに

$\mu : \mathbb{R}^n$ 上の確率測度 . ここでは $n = 2$ と仮定. $\forall r = 0, 1, 2, \dots$,

$\mathbf{u}_r(\mathbf{x}) \equiv (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1x_2, x_2^2, x_1^3, \dots, x_2^r)$: 横ベクトル
(次数 $\leq r$ 以下の全ての単項式)

$\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \equiv \int_{\mathbb{R}^2} \mathbf{u}_r(\mathbf{x})^T \mathbf{u}_r(\mathbf{x}) d\mu$ (モーメント行列, 対称,
半正定値)

$y_{\alpha\beta} \equiv \int_{\mathbb{R}^2} x_1^\alpha x_2^\beta d\mu = (\alpha, \beta)$ -要素 (μ に依存), $y_{00} \equiv 1$

$\mu : \mathbb{R}^n$ 上の確率測度 . ここでは $n = 2$ と仮定. $\forall r = 0, 1, 2, \dots$,

$\mathbf{u}_r(\mathbf{x}) \equiv (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1x_2, x_2^2, x_1^3, \dots, x_2^r)$: 横ベクトル
(次数 $\leq r$ 以下の全ての単項式)

$$\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \equiv \int_{\mathbb{R}^2} \mathbf{u}_r(\mathbf{x})^T \mathbf{u}_r(\mathbf{x}) d\mu \quad \left(\begin{array}{l} \text{モーメント行列, 対称,} \\ \text{半正定値} \end{array} \right)$$

$$y_{\alpha\beta} \equiv \int_{\mathbb{R}^2} x_1^\alpha x_2^\beta d\mu = (\alpha, \beta)\text{-要素} (\mu \text{ に依存}), y_{00} \equiv 1$$

$r = 2$ の例:

$$\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) = \begin{pmatrix} y_{00} & y_{10} & y_{01} & y_{20} & y_{11} & y_{02} \\ y_{10} & y_{20} & y_{11} & y_{30} & y_{21} & y_{12} \\ y_{01} & y_{11} & y_{02} & y_{21} & y_{12} & y_{03} \\ y_{20} & y_{30} & y_{21} & y_{40} & y_{31} & y_{22} \\ y_{11} & y_{21} & y_{12} & y_{31} & y_{22} & y_{13} \\ y_{02} & y_{12} & y_{03} & y_{22} & y_{13} & y_{04} \end{pmatrix}, y_{00} = 1$$

$y_{21} = \int_{\mathbb{R}^2} x_1^2 x_2 d\mu$

$\mu : \mathbb{R}^n$ 上の確率測度 . **ここでは $n = 2$ と仮定.** $\forall r = 0, 1, 2, \dots,$

$\mathbf{u}_r(\mathbf{x}) \equiv (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1x_2, x_2^2, x_1^3, \dots, x_2^r) : \text{横ベクトル}$
(次数 $\leq r$ 以下の全ての単項式)

$\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \equiv \int_{\mathbb{R}^2} \mathbf{u}_r(\mathbf{x})^T \mathbf{u}_r(\mathbf{x}) d\mu$ (モーメント行列, 対称,
半正定値)

$y_{\alpha\beta} \equiv \int_{\mathbb{R}^2} x_1^\alpha x_2^\beta d\mu = (\alpha, \beta)\text{-要素} (\mu \text{ に依存}), y_{00} \equiv 1$

$\mu : \mathbb{R}^n$ 上の確率測度 . ここでは $n = 2$ と仮定. $\forall r = 0, 1, 2, \dots$,

$\mathbf{u}_r(\mathbf{x}) \equiv (1, x_1, x_2, x_1^2, x_1x_2, x_2^2, x_1^3, \dots, x_2^r)$: 横ベクトル
(次数 $\leq r$ 以下の全ての単項式)

$$\mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \equiv \int_{\mathbb{R}^2} \mathbf{u}_r(\mathbf{x})^T \mathbf{u}_r(\mathbf{x}) d\mu \quad \left(\begin{array}{l} \text{モーメント行列, 対称,} \\ \text{半正定値} \end{array} \right)$$

$$y_{\alpha\beta} \equiv \int_{\mathbb{R}^2} x_1^\alpha x_2^\beta d\mu = (\alpha, \beta)\text{-要素} (\mu \text{ に依存}), y_{00} \equiv 1$$

任意の正整数 r を 1 つ選んで固定. $\mu : \mathbb{R}^2$ 上の確率測度 \Rightarrow
 $y_{00} = 1, \mathbf{M}_r(\mathbf{y}) \succeq \mathbf{O}$ (半正定値)

- μ が \mathbb{R}^2 上の確率測度であるためのこの必要条件を POP の半正定値計画緩和に使う \Rightarrow 次のスライド.

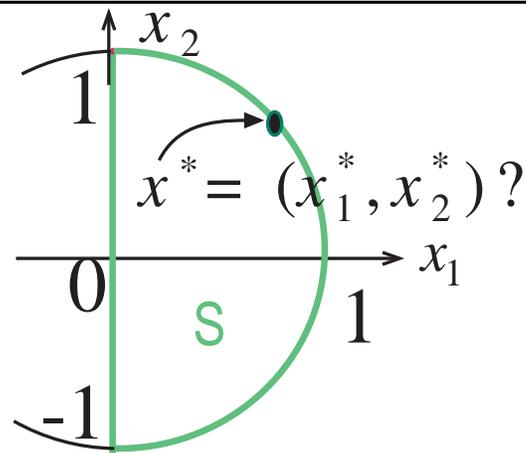
例

$$\begin{array}{ll} \text{POP: min} & f_0(\mathbf{x}) = x_1^4 - 2x_1x_2 \\ \text{sub. to} & \mathbf{x} \in S \equiv \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : \begin{array}{l} f_1(\mathbf{x}) = 1 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0 \\ f_2(\mathbf{x}) = x_1 \geq 0 \end{array} \right\}. \end{array} \quad \zeta^* : \text{未知最小値}$$

\Updownarrow

$$\begin{array}{ll} \text{min} & \int f_0(\mathbf{x}) d\mu \\ \text{sub. to} & \mu : S \text{ 上の確率速度.} \end{array}$$

$$\Downarrow \text{正整数 } r \text{ を固定, } y_{\alpha\beta} = \int_{\mathbb{R}^2} x_1^\alpha x_2^\beta d\mu$$

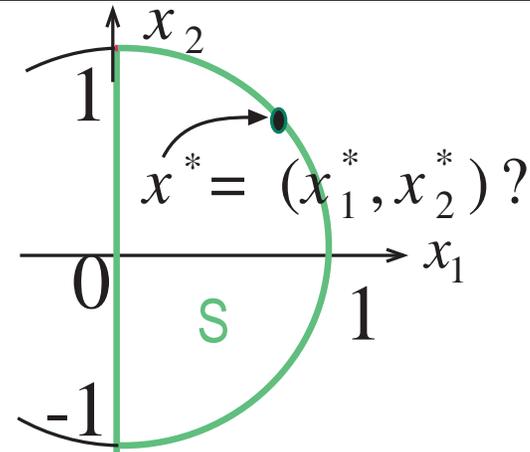


例

$$\begin{aligned} \text{POP: min} \quad & f_0(\mathbf{x}) = x_1^4 - 2x_1x_2 & \zeta^* : \text{未知最小値} \\ \text{sub. to} \quad & \mathbf{x} \in S \equiv \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 : \begin{aligned} f_1(\mathbf{x}) = 1 - x_1^2 - x_2^2 &\geq 0 \\ f_2(\mathbf{x}) = x_1 &\geq 0 \end{aligned} \right\}. \end{aligned}$$

⇕

$$\begin{aligned} \text{min} \quad & \int f_0(\mathbf{x}) d\mu \\ \text{sub. to} \quad & \mu : S \text{ 上の確率速度.} \end{aligned}$$



⇓ 正整数 r を固定, $y_{\alpha\beta} = \int_{\mathbb{R}^2} x_1^\alpha x_2^\beta d\mu$

$$\begin{aligned} \text{min} \quad & y_{40} - 2y_{11} \quad \Rightarrow \text{SDP}_r = \text{SDP 緩和, 最小値 } \zeta_r \leq \zeta^* \\ \text{sub. to} \quad & \text{“}\mu \text{ が } S \text{ 上の確率測度の必要条件”} \\ & \Rightarrow \text{次のスライド} \end{aligned}$$

- $\zeta_r \leq \zeta_{r+1} \leq \zeta^*$
- S が有界を保証するある条件のもとで $\zeta_r \rightarrow \zeta^*$.

$r = 2$, SDP_2

$\min y_{40} - 2y_{11}$ s.t.

$$\int \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T x_1 d\mu \succeq \mathbf{O}, \Leftrightarrow x_1 \geq 0$$

$1 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0 \Rightarrow$

$$\int \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T (1 - x_1^2 - x_2^2) d\mu \succeq \mathbf{O},$$

(モーメント行列)

$$\int \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}^T d\mu \succeq \mathbf{O}.$$

$$\Downarrow y_{\alpha\beta} = \int_{\mathbb{R}^2} x_1^\alpha x_2^\beta d\mu$$

$r = 2$, SDP_2

$$\min y_{40} - 2y_{11} \text{ s.t. } \begin{pmatrix} y_{10} & y_{20} & y_{11} \\ y_{20} & y_{30} & y_{21} \\ y_{11} & y_{21} & y_{12} \end{pmatrix} \succeq \mathbf{O},$$

$$\begin{pmatrix} 1 - y_{20} - y_{02} & y_{10} - y_{30} - y_{12} & y_{01} - y_{21} - y_{03} \\ y_{10} - y_{30} - y_{12} & y_{20} - y_{40} - y_{22} & y_{11} - y_{31} - y_{13} \\ y_{01} - y_{21} - y_{03} & y_{11} - y_{31} - y_{13} & y_{02} - y_{22} - y_{04} \end{pmatrix} \succeq \mathbf{O},$$

(モーメント行列)

$$\begin{pmatrix} 1 & y_{10} & y_{01} & y_{20} & y_{11} & y_{02} \\ y_{10} & y_{20} & y_{11} & y_{30} & y_{21} & y_{12} \\ y_{01} & y_{11} & y_{02} & y_{21} & y_{12} & y_{03} \\ y_{20} & y_{30} & y_{21} & y_{40} & y_{31} & y_{22} \\ y_{11} & y_{21} & y_{12} & y_{31} & y_{22} & y_{13} \\ y_{02} & y_{12} & y_{03} & y_{22} & y_{13} & y_{04} \end{pmatrix} \succeq \mathbf{O}.$$

- n 変数の一般の POP に適用可能.
- 理論的には強力, しかし, 計算コストは高い.
 \Rightarrow 実用には, 疎性の活用が重要.

目次

1. 大域的最適化
2. 多項式最適化問題
3. 半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ
 - 3-1. 主問題の緩和 (主な道具 = 確率測度とそのモーメント)
 - 3-2. 双対問題の緩和 (主な道具 = 2 乗多項式)
4. 疎性の活用について
5. 数値計算例
6. 終わりに

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

$\mathcal{N} : n$ 変数非負多項式の集合.

n 変数多項式 $f(\mathbf{x}) : \text{SOS (Sum of Squares of Polynomials)}$



$f(\mathbf{x}) : (\text{複数個の}) n$ 変数多項式の 2 乗和, すなわち

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

$\Sigma : n$ 変数 SOS の集合. $\Sigma_{2r} \subset \Sigma : \underline{\text{高々 } r \text{ 次の } n \text{ 変数 SOS.}}$

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. $n = 3$. $f(x_1, x_2, x_3) = (x_1x_2x_3 - 1)^2 + x_1^2 \in \Sigma_6$.

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

$\mathcal{N} : n$ 変数非負多項式の集合.

n 変数多項式 $f(\mathbf{x}) : \text{SOS (Sum of Squares of Polynomials)}$



$f(\mathbf{x}) : (\text{複数個の}) n$ 変数多項式の 2 乗和, すなわち

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

$\Sigma : n$ 変数 SOS の集合. $\Sigma_{2r} \subset \Sigma : \underline{\text{高々 } r \text{ 次の } n \text{ 変数 SOS}}$.

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

$\mathcal{N} : n$ 変数非負多項式の集合.

n 変数多項式 $f(\mathbf{x}) : \text{SOS (Sum of Squares of Polynomials)}$



$f(\mathbf{x}) : (\text{複数個の}) n$ 変数多項式の 2 乗和 , すなわち

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

$\Sigma : n$ 変数 SOS の集合. $\Sigma_{2r} \subset \Sigma : \underline{\text{高々 } r \text{ 次の } n \text{ 変数 SOS}}$.

- 理論的には , $\Sigma \subset \mathcal{N}$, $\Sigma \neq \mathcal{N}$.
- ただし , $f(\mathbf{x}) \notin \Sigma$ なる $f(\mathbf{x}) \in \mathcal{N}$ は稀少.
- 実用的上これを同一視する \Rightarrow SOS 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 = Σ_2 .

SOS の表現

$$\mathbf{SOS}_r \equiv \left\{ \sum_{j=1}^q g_j(\mathbf{x})^2 : q \geq 1, g_j(\mathbf{x}): \text{次数 } r \text{ 以下の多項式} \right\} \subset \mathbf{SOS}_*.$$

\forall 次数 r 以下の多項式 $g(\mathbf{x})$, $\exists \mathbf{a} \in \mathbb{R}^{d(r)}$; $g(\mathbf{x}) = \mathbf{a}^T \mathbf{u}_r(\mathbf{x})$,

$$\mathbf{u}_r(\mathbf{x}) = (1, x_1, \dots, x_n, x_1^2, x_1x_2, x_1x_3, \dots, x_n^2, \dots, x_1^r, \dots, x_n^r)^T$$

次数 $\leq r$ 以下の多項式の線形空間の基底からなる列ベクトル

$$d(r) = \binom{n+r}{r} : \mathbf{u}_r(\mathbf{x}) \text{ の次元.}$$

⇓

$$\begin{aligned} \mathbf{SOS}_r &= \left\{ \sum_{j=1}^q (\mathbf{a}_j^T \mathbf{u}_r(\mathbf{x}))^2 : q \geq 1, \mathbf{a}_j \in \mathbb{R}^{d(r)} \right\} \\ &= \left\{ \mathbf{u}_r(\mathbf{x})^T \left(\sum_{j=1}^q \mathbf{a}_j \mathbf{a}_j^T \right) \mathbf{u}_r(\mathbf{x}) : q \geq 1, \mathbf{a}_j \in \mathbb{R}^{d(r)} \right\} \\ &= \left\{ \mathbf{u}_r(\mathbf{x})^T \mathbf{V} \mathbf{u}_r(\mathbf{x}) : \mathbf{V} \succeq \mathbf{O} \right\}. \end{aligned}$$

例 $n = 1$, 次数 3 以下の SOS 多項式

$$\begin{aligned} \mathbf{SOS}_3 &\equiv \left\{ \sum_{j=1}^q g_j(\mathbf{x})^2 : q \geq 1, g_j(\mathbf{x}) : \text{次数 3 以下の多項式} \right\} \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}^T \mathbf{V} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} : \mathbf{V} \text{ は } 4 \times 4 \text{ 半正定値行列} \right\} \end{aligned}$$

例 $n = 2$, 次数 2 以下の SOS 多項式

$$\begin{aligned} \mathbf{SOS}_2 &\equiv \left\{ \sum_{j=1}^q g_j(\mathbf{x})^2 : q \geq 1, g_j(\mathbf{x}) \text{ 次数 } 2 \text{ 以下の多項式} \right\} \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}^T \mathbf{V} \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix} : \mathbf{V} \text{ は } 6 \times 6 \text{ 半正定値行列} \right\} \end{aligned}$$

制約条件の付かない最小化問題

$$\mathcal{P}: \min f(\mathbf{x}) = -x_1 + 2x_2 + 3x_1^2 - 5x_1^2x_2^2 + 7x_2^4$$

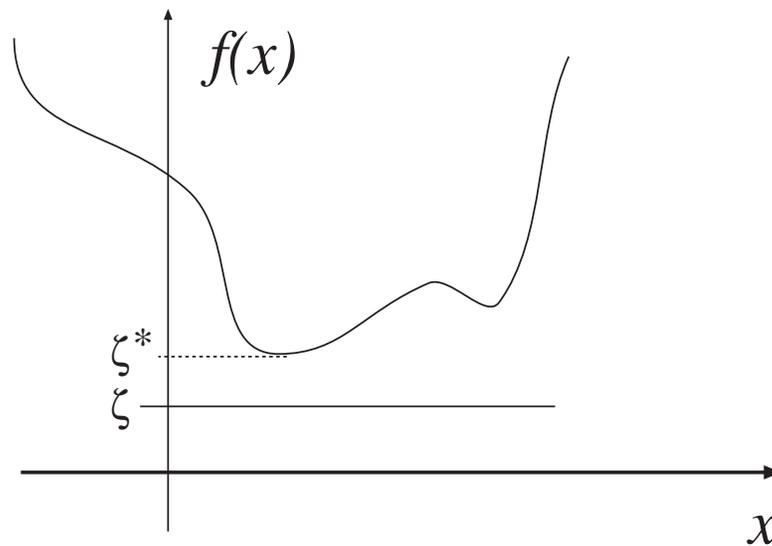
⇕ (ラグランジ双対問題の特別な場合)

$$\mathcal{P}': \max \zeta \quad \text{s.t.} \quad f(\mathbf{x}) - \zeta \geq 0 \quad (\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n)$$

⇕

$$f(\mathbf{x}) - \zeta \in \mathcal{N} \quad (\text{非負多項式})$$

ただし x は変数ではなく無限個の不等式を記述するパラメーター



制約条件の付かない最小化問題

$$\mathcal{P}: \min f(\boldsymbol{x}) = -x_1 + 2x_2 + 3x_1^2 - 5x_1^2x_2^2 + 7x_2^4$$

\Updownarrow (ラグランジ双対問題の特別な場合)

$$\mathcal{P}': \max \zeta \quad \text{s.t} \quad f(\boldsymbol{x}) - \zeta \geq 0 \quad (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n)$$

\Updownarrow

$$f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \mathcal{N} \quad (\text{非負多項式})$$

ただし x は変数ではなく無限個の不等式を記述するパラメター

制約条件の付かない最小化問題

$$\mathcal{P}: \min f(\mathbf{x}) = -x_1 + 2x_2 + 3x_1^2 - 5x_1^2x_2^2 + 7x_2^4$$

⇕ (ラグランジ双対問題の特別な場合)

$$\mathcal{P}': \max \zeta \text{ s.t. } f(\mathbf{x}) - \zeta \geq 0 \ (\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n)$$

⇕

$$f(\mathbf{x}) - \zeta \in \mathcal{N} \text{ (非負多項式)}$$

ただし x は変数ではなく無限個の不等式を記述するパラメター

⇓ \mathcal{P}' の部分問題 (したがって \mathcal{P} の (双対) 緩和問題)

$$\mathcal{P}'': \max \zeta \text{ sub.to } f(\mathbf{x}) - \zeta \in \mathbf{SOS}_2 \text{ (次数 2 以下の SOS 多項式)}$$

⇓

制約条件の付かない最小化問題

$$\mathcal{P}: \min f(\boldsymbol{x}) = -x_1 + 2x_2 + 3x_1^2 - 5x_1^2x_2^2 + 7x_2^4$$

制約条件の付かない最小化問題

$$\mathcal{P}: \min f(\mathbf{x}) = -x_1 + 2x_2 + 3x_1^2 - 5x_1^2x_2^2 + 7x_2^4$$

↓ (SOS 緩和)

$$\begin{array}{l}
 \max \zeta \\
 \text{s.t. } f(\mathbf{x}) - \zeta = \\
 \quad \text{SOS 多項式} \\
 \left(\begin{array}{c} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \end{array} \right)^T \left(\begin{array}{cccccc} V_{11} & V_{12} & V_{13} & V_{14} & V_{15} & V_{16} \\ V_{12} & V_{22} & V_{23} & V_{24} & V_{25} & V_{26} \\ V_{13} & V_{23} & V_{33} & V_{34} & V_{35} & V_{36} \\ V_{14} & V_{24} & V_{34} & V_{44} & V_{45} & V_{46} \\ V_{15} & V_{25} & V_{35} & V_{45} & V_{55} & V_{56} \\ V_{16} & V_{26} & V_{36} & V_{46} & V_{56} & V_{66} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1x_2 \\ x_2^2 \end{array} \right) \\
 (\forall (x_1, x_2)^T \in \mathbb{R}^n), \quad \mathbf{V} \succeq \mathbf{O}
 \end{array}$$

↑ = の両辺の $1, x_1, x_2, x_1^2, x_1x_2, x_2^2$ 係数を比較

SDP (半正定値計画問題)

$$\begin{aligned} \max \quad & \zeta \quad \text{s.t.} \quad -\zeta = V_{11}, \quad -1 = 2V_{12}, \quad 2 = 2V_{13}, \quad 3 = 2V_{14} + V_{22}, \\ & -5 = 2V_{46} + V_{55}, \quad 7 = V_{66}, \quad \text{その他 } 0 = \dots, \\ & V \succeq O \end{aligned}$$

一般に, 等式制約は ζ and V の線形等式制約となる.

不等式条件付き POP に対する SOS 緩和

$$\text{POP: } \min f_0(\boldsymbol{x}) \quad \text{sub.to } f_j(\boldsymbol{x}) \geq \mathbf{0} \quad (j = 1, \dots, m).$$

● POP に対する 2 乗多項式緩和の概略

“一般化 Lagrangian Dual”

+

“制約条件の付かない POP” に対する 2 乗多項式緩和

↓

POP に対する 2 乗多項式緩和

詳細は略

目次

1. 大域的最適化
2. 多項式最適化問題
3. 半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ
 - 3-1. 主問題の緩和 (主な道具 = 確率測度とそのモーメント)
 - 3-2. 双対問題の緩和 (主な道具 = 2 乗多項式)
4. 疎性の活用について
5. 数値計算例
6. 終わりに

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

$f_j(\boldsymbol{x})$: 次数 q 以下の多項式 ($j = 0, 1, \dots, m$)

POP: $\min f_0(\boldsymbol{x})$ sub.to $f_j(\boldsymbol{x}) \geq$ or $= 0$ ($j = 1, \dots, m$)

\mathcal{F}^* = 次数 q 以下の単項式の集合; $\#\mathcal{F}^* = \binom{n+q}{q}$
 $\mathcal{F}^* \supseteq \mathcal{F}_j = f_j$ に含まれている単項式の集合

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

$f_j(\mathbf{x})$: 次数 q 以下の多項式 ($j = 0, 1, \dots, m$)

POP: $\min f_0(\mathbf{x})$ sub.to $f_j(\mathbf{x}) \geq$ or $= 0$ ($j = 1, \dots, m$)

\mathcal{F}^* = 次数 q 以下の単項式の集合; $\#\mathcal{F}^* = \binom{n+q}{q}$
 $\mathcal{F}^* \supseteq \mathcal{F}_j = f_j$ に含まれている単項式の集合

$\min f_0 = -6.3x_5x_8 + 5.04x_2 + 0.35x_3 + x_4 + 3.36x_6$ sub.to

$f_1 = -0.820x_2 + x_5 - 0.820x_6 = 0$ $f_2 = -x_2x_9 + 10x_3 + x_6 = 0$

$f_3 = 0.98x_4 - x_7(0.01x_5x_{10} + x_4) = 0$, $\text{lbd}_i \leq x_i \leq \text{ubd}_i$

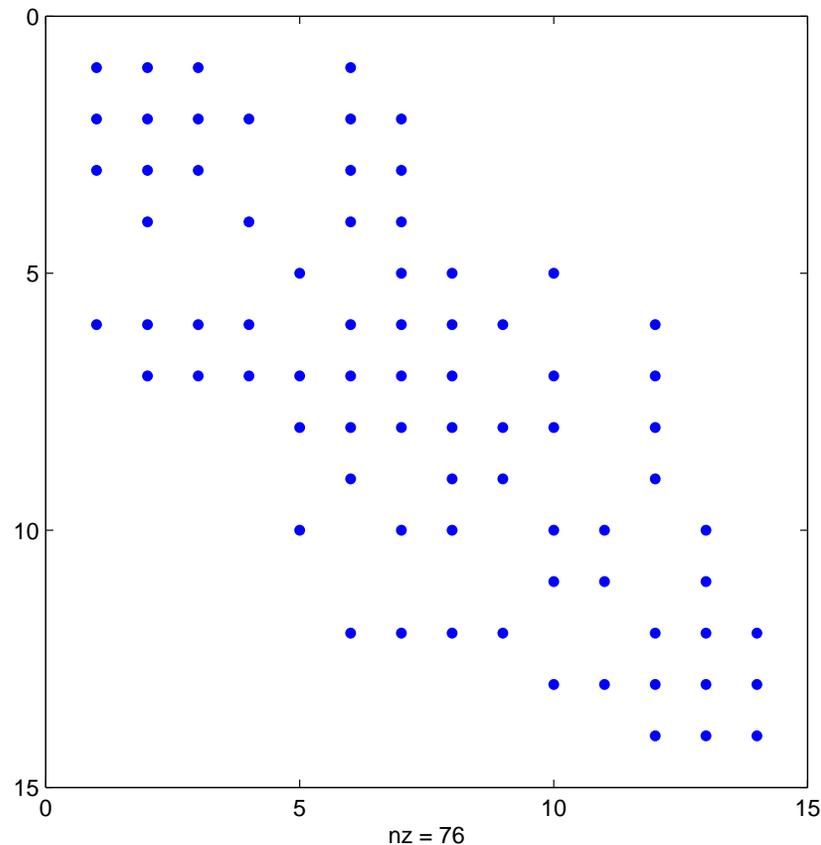
$f_4 = x_5x_{12} - x_2(1.12 + 0.132x_9 - 0.0067x_9^2) = 0$

$f_5 = x_8x_{13} - 0.01x_9(1.098 - 0.038x_9) - 0.325x_7 - 0.574 = 0$

$f_6 = x_{10}x_{14} + 22.2x_{11} - 35.82 = 0$ $f_7 = x_1x_{11} - 3x_8 - 1.33 = 0$

- $n = 14$ 変数. 次数 3 以下; $\#\mathcal{F}^* = 680$
- $\forall f_j$ は高々 6 個の単項式しか含まない + 構造的疎性
- $Hf_0 + DF^T DF$ の疎性パターン. ただし, $Hf_0(\mathbf{x})$: ヘッセ行列 $F(\mathbf{x}) = (f_1, \dots, f_7)^T$, $DF(\mathbf{x})$: 7×14 ヤコビ行列

対称行列に対す Reverse Cuthill-McKee Ordering 後の $Hf_0 + DF^TDF$ の疎性パターン



SDP 緩和の計算効率を高めるのに利用出来る構造的疎性

- 疎な (symbolic) Cholesky 分解
- あるいは, chordal グラフ構造
- 無制約の場合は Hf_0 の疎性パターン

目次

1. 大域的最適化
2. 多項式最適化問題
3. 半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ
 - 3-1. 主問題の緩和 (主な道具 = 確率測度とそのモーメント)
 - 3-2. 双対問題の緩和 (主な道具 = 2 乗多項式)
4. 疎性の活用について
5. 数値計算例 (大規模な問題に対しては疎性の活用重要)
 - 5-1. 一般の多項式最適化問題用ソフトウェア SparsePOP (Waki-K-Muramatsu-Sugimoto-Yamashita, 2008)
 - 5-2. センサネットワークの位置推定問題用ソフトウェア SFSDP (Kim-K-Waki-Yamashita, 2008) — 予告編
6. 終わりに

問題 1 : alkyl.gms — globallib からのベンチマーク問題

$$\min \quad -6.3x_5x_8 + 5.04x_2 + 0.35x_3 + x_4 + 3.36x_6$$

$$\text{sub.to} \quad -0.820x_2 + x_5 - 0.820x_6 = 0,$$

$$0.98x_4 - x_7(0.01x_5x_{10} + x_4) = 0,$$

$$-x_2x_9 + 10x_3 + x_6 = 0,$$

$$x_5x_{12} - x_2(1.12 + 0.132x_9 - 0.0067x_9^2) = 0,$$

$$x_8x_{13} - 0.01x_9(1.098 - 0.038x_9) - 0.325x_7 = 0.574,$$

$$x_{10}x_{14} + 22.2x_{11} = 35.82,$$

$$x_1x_{11} - 3x_8 = -1.33, \text{ lbd}_i \leq x_i \leq \text{ubd}_i \quad (i = 1, 2, \dots, 14).$$

Sparse			Dense (Lasserre)		
ϵ_{obj}	ϵ_{feas}	cpu	ϵ_{obj}	ϵ_{feas}	cpu
1.8e-9	9.6e-9	4.1	out of	memory	

$$\epsilon_{\text{obj}} = \frac{|\text{最小値の下界} - \text{近似最小解}|}{\max\{1, |\text{最小値の下界}|\}}.$$

$$\epsilon_{\text{feas}} = \text{等式制約の誤差}, \text{ cpu} : \text{計算時間 (秒)}$$

無制約最小化のベンチマーク問題

Generalized Rosenbrock function — 次数 4 の多項式

$$f_R(\mathbf{x}) = 1 + \sum_{i=2}^n (100(x_i - x_{i-1}^2)^2 + (1 - x_i^2)^2)$$

Chained singular function — 次数 4 の多項式

$$f_C(\mathbf{x}) = \sum_{i \in J} ((x_i + 10x_{i+1})^2 + 5(x_{i+2} - x_{i+3})^2 \\ + (x_{i+1} - 2x_{i+2})^4 + 10(x_i - 10x_{i+3})^4)$$

ただし, $J = \{1, 3, 5, \dots, n-3\}$, n は 4 の倍数.

Broyden banded function — 次数 6 の多項式

$$f_B(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \left(x_i(2 + 5x_i^2) + 1 - \sum_{j \in J_i} (1 + x_j)x_j \right)^2$$

ただし, $J_i = \{j : j \neq i, \max\{1, i-5\} \leq j \leq \min\{n, i\}\}$.

問題 2 : $\min f_R(\mathbf{x}) + f_C(\mathbf{x})$ 問題 3 : $\min f_R(\mathbf{x}) + f_B(\mathbf{x})$

問題 2 : $\min f_R(\boldsymbol{x}) + f_C(\boldsymbol{x})$ — 4 次, 非常に疎, 未知最適値

	Sparse			Dense (Lasserre)		
n	ϵ_{obj}	$\# =$	cpu	ϵ_{obj}	$\# =$	cpu
12	6e-9	214	0.2	1e-9	1,819	64.1
16	5e-9	294	0.2	1e-9	4,844	1311.1
100	2e-9	1,974	1.2	out of	mem	
1000	7e-11	19,974	16.9			
2000	6e-12	39,974	45.1			
3000	out of	mem				

$$\epsilon_{\text{obj}} = \frac{|\text{最小値の下界} - \text{近似最小解}|}{\max\{1, |\text{最小値の下界}|\}}$$

$\# =$: SDP の等式条件数, cpu : 計算時間 (SeDuMi, 秒)

問題 3 : $\min f_R(\boldsymbol{x}) + f_B(\boldsymbol{x})$ — 6 次, 疎 as $n \uparrow$, 未知最適値

	Sparse			Dense (Lasserre)		
n	ϵ_{obj}	# =	cpu	ϵ_{obj}	# =	cpu
6	5e-11	923	8.8	5e-11	923	9.5
8	2e-10	2,507	78.3	2e-10	3,002	234.4
10	8e-12	4,091	132.4	out of	mem	
20	5e-11	12,011	414.2			
30	5e-11	19,931	717.8			
40	out of	mem				

$$\epsilon_{\text{obj}} = \frac{|\text{最小値の下界} - \text{近似最小解}|}{\max\{1, |\text{最小値の下界}|\}}$$

= : SDP の等式条件数, cpu : 計算時間 (SeDuMi, 秒)

目次

1. 大域的最適化
2. 多項式最適化問題
3. 半正定値計画緩和に対する 2 種類のアプローチ
 - 3-1. 主問題の緩和 (主な道具 = 確率測度とそのモーメント)
 - 3-2. 双対問題の緩和 (主な道具 = 2 乗多項式)
4. 疎性の活用について
5. 数値計算例
6. 終わりに

- 半正定値計画問題
 - 線形計画問題の対称行列の空間への拡張
 - 21世紀の最適化問題
- 多項式最適化問題 — 大域最適化の数理モデル

- 半正定値計画問題
 - 線形計画問題の対称行列の空間への拡張
 - 21世紀の最適化問題
- 多項式最適化問題 — 大域最適化の数理モデル
- 半正定値計画緩和 (Lasserre '01)
 - モーメント行列を用いた緩和
 - 2乗多項式緩和
- ソフトウェア **SparsePOP, SFSDP**
- 疎性の活用

- 半正定値計画問題
 - 線形計画問題の対称行列の空間への拡張
 - 21世紀の最適化問題
- 多項式最適化問題 — 大域最適化の数理モデル
- 半正定値計画緩和 (Lasserre '01)
 - モーメント行列を用いた緩和
 - 2乗多項式緩和
- ソフトウェア SparsePOP, SFSDP
- 疎性の活用

今後に向けて

- 半正定値計画問題
 - 線形計画問題の対称行列の空間への拡張
 - 21世紀の最適化問題
- 多項式最適化問題 — 大域最適化の数理モデル
- 半正定値計画緩和 (Lasserre '01)
 - モーメント行列を用いた緩和
 - 2乗多項式緩和
- ソフトウェア **SparsePOP, SFSDP**
- **疎性の活用**

今後に向けて

- 理工学をささえる最適化手法を！
- 良質な最適化ソフトウェアを！

ありがとうございました