情報基礎数理学特選
有限距離空間の離散幾何学とアルゴリズム
(2) 最適化理論速習

岡本 吉央

北陸先端科学技術大学院大学

2011 年 1 月 11 日

"最終更新：2011/01/11 21:11"

このコマの目標

- 最適化理論
  - 線形計画問題
  - 半正定値計画問題
- 最適化理論における重要概念
  - 双対性
  - 緩和

1. 最適化問題
2. 線形計画問題
3. 双対性
4. 半正定値計画問題
5. 緩和

最適化問題

設定

- n : 自然数
- $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$
- $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$

定義：最適化問題

次の値を計算する問題を**最適化問題** (optimization problem) と呼ぶ

$$\inf\{f(x) \mid x \in \Omega\}$$

この値を上記最適化問題の**最適値** (optimal value) と呼ぶ

用語

上記最適化問題の

- f : **目的関数** (objective function)
- Ω : **許容領域** (feasible region)
- $x \in \Omega$: **許容解** (feasible solution)

最適化問題の分類

定義：最適解

$x^* \in \mathbb{R}^n$ が上記最適化問題の**最適解** (optimal solution) であるとは,

$$x^* \in \Omega \quad \text{かつ} \quad f(x^*) = \inf\{f(x) \mid x \in \Omega\}$$

事実

任意の最適化問題は以下のいずれか 1 つだけを満たす

<table>
<tr><td>(1)</td><td>$\Omega = \emptyset$</td><td colspan="2">最適値 $= +\infty$ (非許容)</td></tr>
<tr><td>(2)</td><td rowspan="3">$\Omega \neq \emptyset$</td><td colspan="2">最適値 $= -\infty$ (非有界)</td></tr>
<tr><td>(3)</td><td rowspan="2">最適値 $\in \mathbb{R}$</td><td>最適解が非存在</td></tr>
<tr><td>(4)</td><td>最適解が存在</td></tr>
</table>

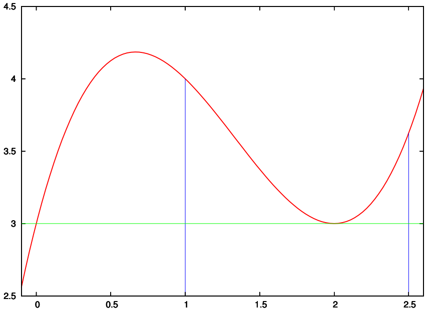
再定義：最適化問題

最適化問題は, (1)–(4) のいずれであるかを判定し, (3) の場合には最適値を, (4) の場合には最適値と最適解を計算する問題である

最適化問題の例 (4)

例：最適解が存在

$$\inf\{x^3 - 4x^2 + 4x + 3 \mid 1 \le x \le 5/2\}$$

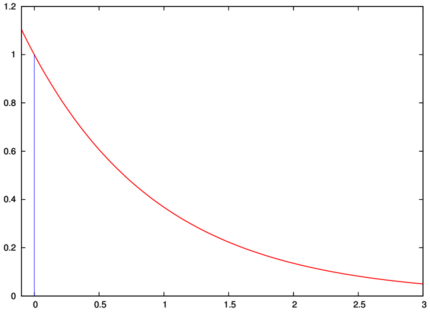


$x = 2$ は最適解で，最適値は 3

最適化問題の例 (3)

例：最適解は非存在，最適値は存在

$$\inf\{e^{-x} \mid x \geq 0\}$$

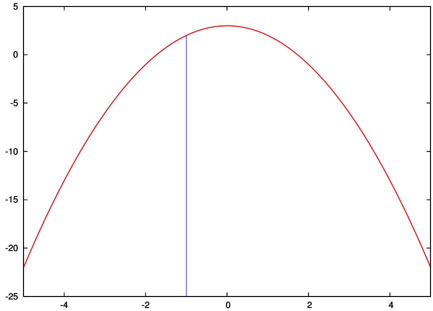


最適値は 0 だが，最適解は存在しない

最適化問題の例 (2)

例：非有界

$$\inf\{-x^2 + 3 \mid x \geq -1\}$$

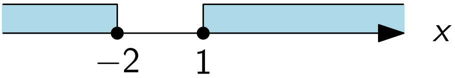


最適値は $-\infty$

最適化問題の例 (1)

例：非許容

$$\inf\{x/2 \mid x \leq -2, 1 \leq x\}$$



許容領域が空 ($\inf \emptyset = +\infty$)

余談：記法について

最適化問題

$$\inf\{f(x) \mid x \in \Omega\}$$

を

$$\min\{f(x) \mid x \in \Omega\}$$

と書くことも多いが，min が存在しないこともあるので，厳密には正しくない．しかし，簡便のため，両者を意図的に混同して使うことも多い．

1. 最適化問題
2. 線形計画問題
3. 双対性
4. 半正定値計画問題
5. 緩和

線形計画問題

定義：線形計画問題

次のように記述できる最適化問題を線形計画問題 (linear program, LP) と呼ぶ

$$\inf \left\{ c^\top x \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i^\top x = b_i, i \in \{1, \ldots, m\}, \\ x \geq 0 \end{array} \right\}$$

ただし,

- m, n : 自然数
- $a_1, \ldots, a_m, c \in \mathbb{R}^n$: 実ベクトル
- $b_1, \ldots, b_m \in \mathbb{R}$: 実数

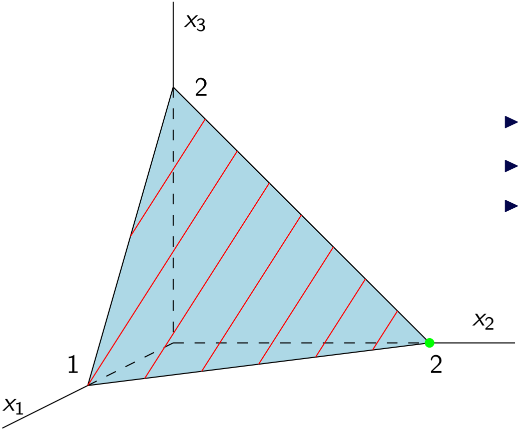
であり，不等号は成分ごとに適用される

線形計画問題の変数は $x \in \mathbb{R}^n$

線形計画問題の例

線形計画問題の例

$$\inf \left\{ 3x_1 + 2x_3 \;\middle|\; \begin{array}{l} 2x_1 + x_2 + x_3 = 2, \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0 \end{array} \right\}$$



- 最適解は $(0,2,0)^\top$
- 最適値は 0
- 先ほどの記法では
  - $n = 3, \quad m = 1$
  - $a_1 = (2,1,1)^\top, \quad b_1 = 2$
  - $c = (3,0,2)^\top$

これも線形計画問題 (1)

- 次のような問題を考える

$$[\mathrm{P}] \qquad \inf \left\{ c^\top x \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i^\top x \geq b_i, i \in \{1, \ldots, m\}, \\ x \geq 0 \end{array} \right\}$$

ただし,
  - m, n : 自然数
  - $a_1, \ldots, a_m, c \in \mathbb{R}^n$: 実ベクトル
  - $b_1, \ldots, b_m \in \mathbb{R}$: 実数

であり, 不等号は成分ごとに適用される
- これも線形計画問題である (なぜか？)

これも線形計画問題 (2)

- 各 i に対して，$s_i = a_i^\top x_i - b_i$ と置く　(スラック変数と呼ばれる)
- x が P の許容解 $\Rightarrow s_i \geq 0$

よって，次を考えるとよさそう $(s = (s_1, \ldots, s_m)^\top \in \mathbb{R}^m)$

$$[\mathrm{P'}] \qquad \inf \left\{ c^\top x \,\middle|\, \begin{array}{l} a_i^\top x - s_i = b_i, i \in \{1, \ldots, m\}, \\ x \geq 0, s \geq 0 \end{array} \right\}$$

今からやること

- P' が線形計画問題であることを示す
- P と P' に同じ目的関数値の許容解があることを示す

これも線形計画問題 (3)

$$[\text{P'}] \qquad \inf\left\{ c^\top x \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i^\top x - s_i = b_i, i \in \{1,\ldots,m\}, \\ x \geq 0, s \geq 0 \end{array} \right\}$$

次のように設定

- $c'^\top = (c^\top, 0) \in \mathbb{R}^{n+m}$
- $a_i'^\top = (a_i^\top, -e_i^\top) \in \mathbb{R}^{n+m}$ (ただし，e_i は第 i 標準基底ベクトル)
- $b_i' = b_i$
- $x'^\top = (x^\top, s^\top) \in \mathbb{R}^{n+m}$

このとき，P' は次のように書き換えられる

$$[\text{P'}] \qquad \inf\left\{ c'^\top x' \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i'^\top x' = b_i', i \in \{1,\ldots,m\}, \\ x' \geq 0 \end{array} \right\}$$

よって，P' は線形計画問題

これも線形計画問題 (4)

$$[\mathrm{P}] \qquad \inf\left\{ c^\top x \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i^\top x \geq b_i, i \in \{1,\ldots,m\}, \\ x \geq 0 \end{array} \right\}$$

$$[\mathrm{P'}] \qquad \inf\left\{ c^\top x \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i^\top x - s_i = b_i, i \in \{1,\ldots,m\}, \\ x \geq 0, s \geq 0 \end{array} \right\}$$

- P の許容解 x に対して, $s_i = a_i^\top x - b_i$ とすれば, (x, s) は P' の許容解で, 目的関数値は同じ
- P' の許容解 (x, s) に対して, x は P の許容解で, 目的関数値は同じ

線形計画問題の分類

事実

任意の線形計画問題は以下のいずれか 1 つだけを満たす

(1)	$\Omega = \emptyset$	最適値 $= +\infty$	(非許容)
(2)	$\Omega \neq \emptyset$	最適値 $= -\infty$	(非有界)
(4)		最適値 $\in \mathbb{R}$	最適解が存在

つまり，有界ならば必ず最適解が存在する

線形計画問題のアルゴリズム的側面

事実

線形計画問題は多項式時間で解くことができる

多くのソフトウェアにアルゴリズムが実装されている：

- Excel (Solver)，Matlab (Optimization Toolbox)，Mathematica
- CPLEX, gurobi, XPRESS-MP, LINDO, NUOPT
- GNU glpk, GNU Octave (v3.0)
- NEOS Server http://www.neos-server.org/neos/

1. 最適化問題
2. 線形計画問題
3. 双対性
4. 半正定値計画問題
5. 緩和

どのように最適性を保証するのか？

最適解を持つ線形計画問題

$$\inf \left\{ c^\top x \,\middle|\, \begin{array}{l} a_i^\top x = b_i, i \in \{1, \dots, m\}, \\ x \geq 0 \end{array} \right\}$$

の許容解 $x \in \mathbb{R}^n$ があるとき，これが最適解であるかどうかをどのように判定すればよいだろうか？

線形計画問題の双対問題

線形計画問題

$$\inf \left\{ c^\top x \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i^\top x = b_i, i \in \{1, \ldots, m\}, \\ x \geq 0 \end{array} \right\}$$

の双対問題 (dual problem) とは

$$\sup \left\{ \sum_{i=1}^m b_i y_i \;\middle|\; \begin{array}{l} \sum_{i=1}^m y_i a_i + s = c, \\ s \geq 0 \end{array} \right\}$$

のこと

- ただし，双対問題の変数は $y_1, \ldots, y_m \in \mathbb{R}$ と $s \in \mathbb{R}^n$
- このとき，元の問題を主問題 (primal problem) と言うことが多い

弱双対定理 (weak duality theorem)

線形計画問題に対する弱双対定理

$x \in \mathbb{R}^n$: 主問題の許容解

$y_1, \dots, y_m \in \mathbb{R}, s \in \mathbb{R}^n$: 双対問題の許容解

このとき,

$$c^\top x - \sum_{i=1}^{m} b_i y_i = x^\top s \geq 0$$

つまり,

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{主問題の}\\\text{目的関数値}\end{array}} - \boxed{\begin{array}{c}\text{双対問題の}\\\text{目的関数値}\end{array}} = \boxed{\begin{array}{c}\text{主問題と双対問題の}\\\text{非負変数の内積}\end{array}} \geq 0$$

弱双対定理 (weak duality theorem)

線形計画問題に対する弱双対定理

$x \in \mathbb{R}^n$: 主問題の許容解

$y_1, \ldots, y_m \in \mathbb{R}, s \in \mathbb{R}^n$: 双対問題の許容解

このとき，

$$c^\top x - \sum_{i=1}^{m} b_i y_i = x^\top s \geq 0$$

つまり，

$$\boxed{\text{主問題の目的関数値}} - \boxed{\text{双対問題の目的関数値}} = \boxed{\text{主問題と双対問題の非負変数の内積}} \geq 0$$

特に

$$\boxed{\text{主問題の目的関数値}} \geq \boxed{\text{双対問題の目的関数値}}$$

線形計画問題に対する弱双対定理の証明

$$
\begin{aligned}
& c^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i \\
= & \left(\sum_{i=1}^m y_i a_i + s \right)^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i \qquad (y_1, \ldots, y_m \text{ の双対許容性より})
\end{aligned}
$$

線形計画問題に対する弱双対定理の証明

$$
\begin{aligned}
& c^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i \\
= & \left(\sum_{i=1}^m y_i a_i + s\right)^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i && (y_1, \ldots, y_m \text{ の双対許容性より}) \\
= & \sum_{i=1}^m y_i a_i^\top x + s^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i
\end{aligned}
$$

線形計画問題に対する弱双対定理の証明

$$
\begin{aligned}
& c^\top x - \sum_{i=1}^{m} b_i y_i \\
&= \left(\sum_{i=1}^{m} y_i a_i + s\right)^\top x - \sum_{i=1}^{m} b_i y_i && (y_1, \ldots, y_m \text{ の双対許容性より}) \\
&= \sum_{i=1}^{m} y_i a_i^\top x + s^\top x - \sum_{i=1}^{m} b_i y_i \\
&= \sum_{i=1}^{m} y_i (a_i^\top x - b_i) + s^\top x
\end{aligned}
$$

線形計画問題に対する弱双対定理の証明

$$
\begin{aligned}
c^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i
&= \left(\sum_{i=1}^m y_i a_i + s\right)^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i && (y_1, \ldots, y_m \text{ の双対許容性より})\\
&= \sum_{i=1}^m y_i a_i^\top x + s^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i \\
&= \sum_{i=1}^m y_i (a_i^\top x - b_i) + s^\top x \\
&= s^\top x && (x \text{ の主許容性より})
\end{aligned}
$$

線形計画問題に対する弱双対定理の証明

$$
\begin{aligned}
c^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i
&= \left(\sum_{i=1}^m y_i a_i + s\right)^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i && (y_1, \ldots, y_m \text{ の双対許容性より}) \\
&= \sum_{i=1}^m y_i a_i^\top x + s^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i \\
&= \sum_{i=1}^m y_i (a_i^\top x - b_i) + s^\top x \\
&= s^\top x && (x \text{ の主許容性より}) \\
&= x^\top s
\end{aligned}
$$

線形計画問題に対する弱双対定理の証明

$$
\begin{aligned}
c^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i
&= \left(\sum_{i=1}^m y_i a_i + s\right)^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i && (y_1, \ldots, y_m \text{ の双対許容性より}) \\
&= \sum_{i=1}^m y_i a_i^\top x + s^\top x - \sum_{i=1}^m b_i y_i \\
&= \sum_{i=1}^m y_i (a_i^\top x - b_i) + s^\top x \\
&= s^\top x && (x \text{ の主許容性より}) \\
&= x^\top s
\end{aligned}
$$

ここで，$x \geq 0$ (x の主許容性)，$s \geq 0$ (s の双対許容性) より $x^\top s \geq 0$ $\square$

弱双対定理の帰結

$$[\text{主問題 P}] \qquad \inf \left\{ c^\top x \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i^\top x = b_i, i \in \{1, \dots, m\}, \\ x \geq 0 \end{array} \right\}$$

$$[\text{双対問題 D}] \qquad \sup \left\{ \sum_{i=1}^m b_i y_i \;\middle|\; \begin{array}{l} \displaystyle\sum_{i=1}^m y_i a_i + s = c, \\ s \geq 0 \end{array} \right\}$$

- $\left\{ \begin{array}{l} x : \text{P の許容解} \\ y_1, \dots, y_m, s : \text{D の許容解} \\ x^\top s = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow$ それらは最適解

どのように最適性を保証するのか？ — 一回答

最適解を持つ線形計画問題

$$\inf \left\{ c^\top x \,\middle|\, \begin{array}{l} a_i^\top x = b_i, i \in \{1, \ldots, m\}, \\ x \geq 0 \end{array} \right\}$$

の許容解 $x \in \mathbb{R}^n$ があるとき，これが最適解であるかどうかをどのように判定すればよいだろうか？

一回答

その双対問題の許容解 $y_1, \ldots, y_m, s$ で，$x^\top s = 0$ を満たすものを持って来ればよい

どのように最適性を保証するのか？ — 一回答

最適解を持つ線形計画問題

$$\inf \left\{ c^\top x \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i^\top x = b_i, i \in \{1, \dots, m\}, \\ x \geq 0 \end{array} \right\}$$

の許容解 $x \in \mathbb{R}^n$ があるとき，これが最適解であるかどうかをどのように判定すればよいだろうか？

一回答

その双対問題の許容解 $y_1, \dots, y_m, s$ で，$x^\top s = 0$ を満たすものを持って来ればよい

次の疑問

x が最適解であるとき，そのような $y_1, \dots, y_m, s$ は必ず存在するのか？

強双対定理 (strong duality theorem)

線形計画問題に対する強双対定理

P と D の両方が許容解を持つ

$\Rightarrow$ P も D も最適解を持ち，最適値は一致する

証明：省略 (田村–村松，定理 2.3 を参照)

強双対定理 (strong duality theorem)

線形計画問題に対する強双対定理

P と D の両方が許容解を持つ

$\Rightarrow$ P も D も最適解を持ち，最適値は一致する

証明：省略 (田村–村松，定理 2.3 を参照)

弱双対定理と強双対定理の帰結

$x \in \mathbb{R}^n$: P の許容解，
$y_1, \ldots, y_m \in \mathbb{R}, s \in \mathbb{R}^n$: D の許容解
このとき

これらがそれぞれ P と D の最適解 $\Leftrightarrow$ $x^\top s = 0$

- つまり,「$x^\top s$」は最適解への「近さ」を表現する量
- 先ほどの「次の疑問」に対する回答は「Yes」

双対ギャップ

x : P の許容解, $y_1, \ldots, y_m, s$: D の許容解

定義：双対ギャップ

これらの**双対ギャップ** (duality gap) とは $x^\top s$ のこと

双対ギャップ

x : P の許容解，$y_1, \ldots, y_m, s$: D の許容解

定義：双対ギャップ

これらの双対ギャップ (duality gap) とは $x^\top s$ のこと

x^* を P の最適解，$y_1^*, \ldots, y_m^*, s^*$ を D の最適解とすると

$$c^\top x^* \le c^\top x \qquad (x^* \text{ の主最適性と } x \text{ の主許容性})$$

双対ギャップ

x：P の許容解，$y_1, \dots, y_m, s$：D の許容解

定義：双対ギャップ

これらの**双対ギャップ** (duality gap) とは $x^\top s$ のこと

x^* を P の最適解，$y_1^*, \dots, y_m^*, s^*$ を D の最適解とすると

$$\begin{aligned} c^\top x^* &\leq c^\top x && (x^* \text{ の主最適性と } x \text{ の主許容性}) \\ &= \sum_{i=1}^{m} b_i y_i + x^\top s && (\text{弱双対定理}) \end{aligned}$$

双対ギャップ

x : P の許容解， $y_1, \ldots, y_m, s$: D の許容解

定義：双対ギャップ

これらの双対ギャップ (duality gap) とは $x^\top s$ のこと

x^* を P の最適解， $y_1^*, \ldots, y_m^*, s^*$ を D の最適解とすると

$$\begin{aligned} c^\top x^* &\leq c^\top x && (x^* \text{ の主最適性と } x \text{ の主許容性}) \\ &= \sum_{i=1}^{m} b_i y_i + x^\top s && (\text{弱双対定理}) \\ &\leq \sum_{i=1}^{m} b_i y_i^* + x^\top s && (y^* \text{ の双対最適性と } y \text{ の双対許容性}) \end{aligned}$$

双対ギャップ

x : P の許容解，$y_1, \ldots, y_m, s$: D の許容解

定義：双対ギャップ

これらの双対ギャップ (duality gap) とは $x^\top s$ のこと

x^* を P の最適解，$y_1^*, \ldots, y_m^*, s^*$ を D の最適解とすると

$$\begin{aligned}
c^\top x^* &\leq c^\top x && (x^* \text{ の主最適性と } x \text{ の主許容性}) \\
&= \sum_{i=1}^{m} b_i y_i + x^\top s && (\text{弱双対定理}) \\
&\leq \sum_{i=1}^{m} b_i y_i^* + x^\top s && (y^* \text{ の双対最適性と } y \text{ の双対許容性}) \\
&= c^\top x^* + x^\top s && (\text{強双対定理})
\end{aligned}$$

双対ギャップ

x : P の許容解，$y_1, \ldots, y_m, s$: D の許容解

定義：双対ギャップ

これらの**双対ギャップ** (duality gap) とは $x^\top s$ のこと

x^* を P の最適解，$y_1^*, \ldots, y_m^*, s^*$ を D の最適解とすると

$$
\begin{aligned}
c^\top x^* &\leq c^\top x && (x^* \text{ の主最適性と } x \text{ の主許容性}) \\
&= \sum_{i=1}^m b_i y_i + x^\top s && (\text{弱双対定理}) \\
&\leq \sum_{i=1}^m b_i y_i^* + x^\top s && (y^* \text{ の双対最適性と } y \text{ の双対許容性}) \\
&= c^\top x^* + x^\top s && (\text{強双対定理})
\end{aligned}
$$

つまり，

$$\boxed{\text{最適値}} \leq \boxed{x \text{ の目的関数値}} \leq \boxed{\text{最適値}} + \boxed{\text{双対ギャップ}}$$

弱双対定理と強双対定理の帰結

$$[\text{主問題 P}] \qquad \inf \left\{ c^\top x \;\middle|\; \begin{array}{l} a_i^\top x = b_i, i \in \{1,\dots,m\}, \\ x \geq 0 \end{array} \right\}$$

$$[\text{双対問題 D}] \qquad \sup \left\{ \sum_{i=1}^m b_i y_i \;\middle|\; \begin{array}{l} \sum_{i=1}^m y_i a_i + s = c, \\ s \geq 0 \end{array} \right\}$$

- $\left\{ \begin{array}{l} x : \text{P の許容解} \\ y_1,\dots,y_m, s : \text{D の許容解} \\ x^\top s = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow$ それらは最適解　(弱双対定理)
- P と D に許容解が存在 $\Rightarrow x^\top s = 0$ となるものが必ず存在 (強双対定理)

双対定理と線形計画問題の分類

事実 (再掲)

任意の線形計画問題は以下のいずれか 1 つだけを満たす

(1)	$\Omega = \emptyset$	最適値 $= +\infty$	(非許容)
(2)	$\Omega \neq \emptyset$	最適値 $= -\infty$	(非有界)
(4)		最適値 $\in \mathbb{R}$	最適解が存在

注：線形計画問題の双対問題も線形計画問題

事実

任意の線形計画問題 P とその双対問題 D は以下のいずれかを満たす

		双対問題 D		
		(1)	(2)	(4)
主問題 P	(1)	○	○	×
	(2)	○	×	×
	(4)	×	×	○

1. 最適化問題
2. 線形計画問題
3. 双対性
4. 半正定値計画問題
5. 緩和

半正定値計画問題とは

- 半正定値行列錐制約とアフィン制約の下で線形関数を最小化する問題
- 線形計画問題 (LP) の一般化
  (LP：非負錐とアフィン制約の下で線形関数を最小化する問題)
- 既に多くの応用を持つ
- (ある穏やかな仮定の下) 多項式時間で解くことができる
- 多くのソフトウェアが開発され，利用できる

記法

記法：対称行列全体の集合

$$\mathcal{S}^n = \{X \in \mathbb{R}^{n\times n} \mid X \text{ は対称行列 }\}$$

$X, Y \in \mathcal{S}^n$：対称行列

定義：対称行列の内積

$$X \bullet Y = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_{i,j} y_{i,j} = \mathrm{tr}(XY)$$

記法：半正定値性

- 「$X \succeq O$」で X が対称半正定値行列であることを表す
- 「$X \succ O$」で X が対称正定値行列であることを表す

半正定値計画問題

定義：半正定値計画問題

次のように記述できる最適化問題を半正定値計画問題 (semidefinite program, SDP) と呼ぶ

$$\inf \left\{ C \bullet X \;\middle|\; \begin{array}{l} A_i \bullet X = b_i, i \in \{1, \ldots, m\}, \\ X \succeq O \end{array} \right\}$$

ただし,

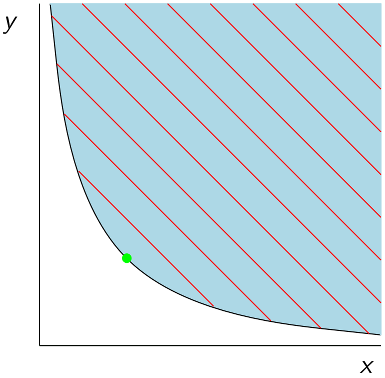
- m, n：自然数
- $A_1, \ldots, A_m, C \in \mathcal{S}^n$：実対称行列
- $b_1, \ldots, b_m \in \mathbb{R}$：実数

半正定値計画問題の変数は $X \in \mathcal{S}^n$

半正定値計画問題の例

半正定値計画問題の例

$$\inf\left\{x+y \mid xy-1 \geq 0, x+y \geq 0\right\}$$



- 最適解は $x=1, y=1$
- 最適値は 2
- 先ほどの記法では
  - $n=2, \quad m=1$
  - $X=\begin{pmatrix} x & z \\ z & y \end{pmatrix}$
  - $A_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad b_1=2$
  - $C=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
- 注：$X \succeq O \Leftrightarrow xy-z^2 \geq 0, x+y \geq 0$

半正定値計画問題の双対問題

半正定値計画問題

$$\inf \left\{ C \bullet X \;\middle|\; \begin{array}{l} A_i \bullet X = b_i, i \in \{1, \ldots, m\}, \\ X \succeq O \end{array} \right\}$$

の双対問題 (dual problem) とは

$$\sup \left\{ \sum_{i=1}^{m} b_i y_i \;\middle|\; \begin{array}{l} \displaystyle\sum_{i=1}^{m} y_i A_i + S = C, \\ S \succeq O \end{array} \right\}$$

のこと

- ただし，双対問題の変数は $y_1, \ldots, y_m \in \mathbb{R}$ と $S \in \mathcal{S}^n$
- このとき，元の問題を主問題 (primal problem) と言うことが多い

半正定値計画問題に対する弱双対定理

半正定値計画問題に対する弱双対定理

$X \in \mathcal{S}^n$: 主問題の許容解
$y_1, \ldots, y_m \in \mathbb{R}, S \in \mathcal{S}^n$: 双対問題の許容解
このとき,

$$C \bullet X - \sum_{i=1}^{m} b_i y_i = X \bullet S \geq 0$$

このとき, $X \bullet S$ を双対ギャップ (duality gap) と呼ぶ

証明 : 演習問題

半正定値計画問題に対する強双対定理

半正定値計画問題に対する強双対定理

P と D の両方が内点許容解を持つ

$\Rightarrow$ P も D も最適解を持ち，最適値は一致する

定義：内点許容解

- P の許容解 $X \in \mathcal{S}^n$ が内点許容解 (interior feasible sol'n) であるとは $X \succ O$ を満たすこと
- D の許容解 $y_1, \ldots, y_m \in \mathbb{R}, S \in \mathcal{S}^n$ が内点許容解であるとは $S \succ O$ を満たすこと

注意

SDP の強双対定理が成り立つためには，LP より強い条件が必要となる

半正定値計画問題のアルゴリズム的側面

事実

P と D に内点許容解が存在し，許容領域が有界な SDP に対して，
双対ギャップが ε 以下になる P と D の許容解は多項式時間で計算可能

LP ほど多くないが，多くのソフトウェアにアルゴリズムが実装されている

- 参考：
  福田光浩,『半正定値計画問題に対するソルバーの紹介』，オペレーションズ・リサーチ **55** (2010) 393–399.
- NEOS Server でも SDP を解いてくれる
  http://www.neos-server.org/neos/

1. 最適化問題
2. 線形計画問題
3. 双対性
4. 半正定値計画問題
5. 緩和

緩和

設定

- $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$
- $\tilde{f} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$
- $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$
- $\tilde{\Omega} \subseteq \mathbb{R}^n$

定義：緩和

最適化問題

$$[\mathrm{P}] \qquad \inf\{f(x) \mid x \in \Omega\}$$

の緩和 (relaxation) とは，最適化問題

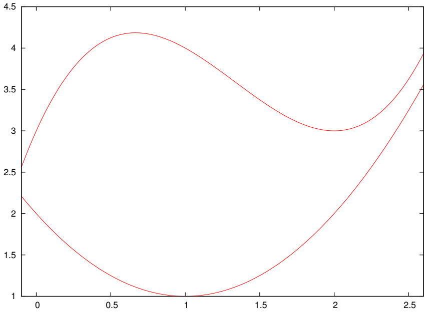
$$[\mathrm{R}] \qquad \inf\{\tilde{f}(x) \mid x \in \tilde{\Omega}\}$$

で，次を満たすもののこと

1. $\Omega \subseteq \tilde{\Omega}$
2. $\forall\, x \in \Omega : f(x) \geq \tilde{f}(x)$

緩和の例

$$
\begin{array}{ll}
[\mathrm{P}] & \inf\{x^3 - 4x^2 + 4x + 3 \mid 1 \le x \le 5/2\} \\
[\mathrm{R}] & \inf\{x^2 - 2x + 2 \mid 0 \le x \le 5/2\}
\end{array}
$$



緩和の性質

命題

先ほどの最適化問題 P とその緩和 R に対して

$$\text{R の最適値} \leq \text{P の最適値}$$

証明：

$$\begin{aligned}
\text{R の最適値} &= \inf\{\tilde{f}(x) \mid x \in \tilde{\Omega}\} \\
&\leq \inf\{\tilde{f}(x) \mid x \in \Omega\} && (\Omega \subseteq \tilde{\Omega}) \\
&\leq \inf\{f(x) \mid x \in \Omega\} && (\forall\, x \in \Omega : \tilde{f}(x) \leq f(x)) \\
&= \text{P の最適値}
\end{aligned}$$

$\square$

緩和ギャップ

定義：緩和ギャップ

先ほどの最適化問題 P とその緩和 R に対して，それらの緩和ギャップ (relaxation gap) とは

$$\text{P の最適値} - \text{R の最適値}$$

のこと

- 緩和ギャップが 0 に近い緩和ほど「強い」緩和
- 緩和の最適値が元の問題の最適値を近似
- 問題点：緩和ギャップの小ささが分からない

元の問題と緩和の目的関数が同一である場合

命題

先ほどの最適化問題 P とその緩和 R に対して,

$$\boxed{\begin{array}{l} f = \tilde{f}, \\ \text{R に最適解 } x^* \text{ が存在}, \\ x^* \in \Omega \end{array}} \quad \Rightarrow \quad \boxed{x^* \text{ は P の最適解}}$$

証明：

- $\forall\, x \in \tilde{\Omega} : \tilde{f}(x^*) \leq \tilde{f}(x)$ (R における x^* の最適性)

元の問題と緩和の目的関数が同一である場合

命題

先ほどの最適化問題 P とその緩和 R に対して,

$f = \tilde{f}$, R に最適解 x^* が存在, $x^* \in \Omega$	$\Rightarrow$	x^* は P の最適解

証明：

- $\forall\, x \in \tilde{\Omega} : \tilde{f}(x^*) \leq \tilde{f}(x)$ (R における x^* の最適性)
- $\forall\, x \in \Omega : \tilde{f}(x^*) \leq \tilde{f}(x)$ $(\Omega \subseteq \tilde{\Omega})$

元の問題と緩和の目的関数が同一である場合

命題

先ほどの最適化問題 P とその緩和 R に対して,

$f = \tilde{f}$,
R に最適解 x^* が存在,
$x^* \in \Omega$

$\Rightarrow$

x^* は P の最適解

証明:

- $\forall\, x \in \tilde{\Omega} : \tilde{f}(x^*) \leq \tilde{f}(x)$ (R における x^* の最適性)
- $\forall\, x \in \Omega : \tilde{f}(x^*) \leq \tilde{f}(x)$ $(\Omega \subseteq \tilde{\Omega})$
- $\forall\, x \in \Omega : f(x^*) \leq f(x)$ $(f = \tilde{f})$

元の問題と緩和の目的関数が同一である場合

命題

先ほどの最適化問題 P とその緩和 R に対して,

$f = \tilde{f}$,
R に最適解 x^* が存在,
$x^* \in \Omega$

$\Rightarrow$

x^* は P の最適解

証明：

- $\forall\, x \in \tilde{\Omega} : \tilde{f}(x^*) \leq \tilde{f}(x)$ (R における x^* の最適性)
- $\forall\, x \in \Omega : \tilde{f}(x^*) \leq \tilde{f}(x)$ $(\Omega \subseteq \tilde{\Omega})$
- $\forall\, x \in \Omega : f(x^*) \leq f(x)$ $(f = \tilde{f})$
- x^* は P の最適解 $(x^* \in \Omega)$

$\square$

典型的な緩和の使い方 (I)

$$[\mathrm{P}] \quad \inf\{f(x) \mid x \in \Omega\} \qquad [\mathrm{R}] \quad \inf\{f(x) \mid x \in \tilde{\Omega}\}$$

共通事項

P は解くのが難しい問題，R は解くのが簡単な問題

使い方 I (厳密アルゴリズム)

- 緩和問題 R の最適解 x^* を計算
- $x^* \in \Omega$ ならば，x^* は P の最適解 $\to$ x^* を出力 (アルゴリズム停止)
- そうでなければ，$\Omega \subseteq \tilde{\Omega}' \subsetneq \tilde{\Omega}$ を満たす $\tilde{\Omega}'$ を発見
  (緩和の強化：工夫するところ)
- $\tilde{\Omega}$ を $\tilde{\Omega}'$ に置き換えた緩和 R を考え，はじめに戻る

典型的な緩和の使い方 (II)

$$[\mathrm{P}] \quad \inf\{f(x) \mid x \in \Omega\} \qquad [\mathrm{R}] \quad \inf\{f(x) \mid x \in \tilde{\Omega}\}$$

共通事項

P は解くのが難しい問題，R は解くのが簡単な問題

使い方 II (近似アルゴリズム)

- 緩和問題 R の最適解 x^* を計算
- $x^* \in \Omega$ ならば，x^* は P の最適解 $\rightarrow$ x^* を出力 (アルゴリズム停止)
- そうでなければ，P の許容解 x を x^* から作成
  (解の丸め：工夫するところ)
- x を P の近似最適解として出力 (アルゴリズム停止)

典型的な使い方 I の例 (1)

次の問題を考える

$$[\mathrm{P}] \qquad \inf\left\{ \begin{array}{l} 2x_1+3x_2 \\ +2x_3+2x_4 \\ +2x_5+2x_6 \end{array} \;\middle|\; \begin{array}{l} x_1+x_2\geq 1, x_1+x_4\geq 1, x_1+x_5\geq 1, \\ x_2+x_3\geq 1, x_2+x_6\geq 1, x_3+x_4\geq 1, \\ x_4+x_5\geq 1, x_5+x_6\geq 1, \\ x\in\{0,1\}^6 \end{array} \right\}$$

その緩和

$$[\mathrm{R1}] \qquad \inf\left\{ \begin{array}{l} 2x_1+3x_2 \\ +2x_3+2x_4 \\ +2x_5+2x_6 \end{array} \;\middle|\; \begin{array}{l} x_1+x_2\geq 1, x_1+x_4\geq 1, x_1+x_5\geq 1, \\ x_2+x_3\geq 1, x_2+x_6\geq 1, x_3+x_4\geq 1, \\ x_4+x_5\geq 1, x_5+x_6\geq 1, \\ 0\leq x\leq 1 \end{array} \right\}$$

これは線形計画問題

- $x^{(1)} = (\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})^\top$ は R1 の最適解 (最適値は $\frac{13}{2} = 6.5$)
- $x^{(1)}$ は P の許容解ではないので，P の最適解ではない $\rightsquigarrow$ 緩和の強化

典型的な使い方 I の例 (2)

$$[\mathrm{P}] \qquad \inf \left\{ \begin{array}{l} 2x_1 + 3x_2 \\ +2x_3 + 2x_4 \\ +2x_5 + 2x_6 \end{array} \;\middle|\; \begin{array}{l} x_1 + x_2 \geq 1, x_1 + x_4 \geq 1, x_1 + x_5 \geq 1, \\ x_2 + x_3 \geq 1, x_2 + x_6 \geq 1, x_3 + x_4 \geq 1, \\ x_4 + x_5 \geq 1, x_5 + x_6 \geq 1, \\ x \in \{0,1\}^6 \end{array} \right\}$$

- 3 つの不等式を足す

$$\begin{array}{rcl} x_1 + x_4 & \geq & 1 \\ +)\ x_1 + x_5 & \geq & 1 \\ +)\ x_4 + x_5 & \geq & 1 \\ \hline 2(x_1 + x_4 + x_5) & \geq & 3 \\ \therefore \quad x_1 + x_4 + x_5 & \geq & 3/2 \end{array}$$

- P の許容解は $x \in \{0,1\}^6$ を満たすので，

$$x_1 + x_4 + x_5 \geq 2$$

も満たす

典型的な使い方 I の例 (3)

強化された緩和

$$
[\mathrm{R2}] \qquad \inf \left\{ \begin{array}{l} 2x_1 + 3x_2 \\ +2x_3 + 2x_4 \\ +2x_5 + 2x_6 \end{array} \middle| \begin{array}{l} x_1 + x_2 \geq 1, x_1 + x_4 \geq 1, x_1 + x_5 \geq 1, \\ x_2 + x_3 \geq 1, x_2 + x_6 \geq 1, x_3 + x_4 \geq 1, \\ x_4 + x_5 \geq 1, x_5 + x_6 \geq 1, x_1 + x_4 + x_5 \geq 2, \\ 0 \leq x \leq 1 \end{array} \right\}
$$

これは線形計画問題

- $x^{(2)} = (0,1,0,1,1,0)^\top$ は R2 の最適解 (最適値は 7)
- $x^{(2)}$ は P の許容解なので，P の最適解である

典型的な使い方 II の例 (1)

次の問題を考える

$$[\mathrm{P}] \qquad \inf \left\{ \begin{array}{l} 5x_1 + x_2 + 5x_3 \\ +2x_4 + 5x_5 \\ +x_6 + x_7 \end{array} \middle| \begin{array}{l} x_1 + x_2 \geq 1, x_1 + x_5 \geq 1, x_1 + x_6 \geq 1, \\ x_1 + x_7 \geq 1, x_2 + x_3 \geq 1, x_2 + x_6 \geq 1, \\ x_3 + x_4 \geq 1, x_3 + x_6 \geq 1, x_4 + x_5 \geq 1, \\ x_4 + x_7 \geq 1, x_5 + x_7 \geq 1, x_6 + x_7 \geq 1, \\ x \in \{0,1\}^7 \end{array} \right\}$$

その緩和

$$[\mathrm{R}] \qquad \inf \left\{ \begin{array}{l} 5x_1 + x_2 + 5x_3 \\ +2x_4 + 5x_5 \\ +x_6 + x_7 \end{array} \middle| \begin{array}{l} x_1 + x_2 \geq 1, x_1 + x_5 \geq 1, x_1 + x_6 \geq 1, \\ x_1 + x_7 \geq 1, x_2 + x_3 \geq 1, x_2 + x_6 \geq 1, \\ x_3 + x_4 \geq 1, x_3 + x_6 \geq 1, x_4 + x_5 \geq 1, \\ x_4 + x_7 \geq 1, x_5 + x_7 \geq 1, x_6 + x_7 \geq 1, \\ 0 \leq x \leq 1 \end{array} \right\}$$

これは線形計画問題

典型的な使い方 II の例 (2)

$$
\text{[R]} \qquad \inf \left\{ \begin{array}{l} 5x_1 + x_2 + 5x_3 \\ +2x_4 + 5x_5 \\ +x_6 + x_7 \end{array} \middle| \begin{array}{l} x_1 + x_2 \geq 1, x_1 + x_5 \geq 1, x_1 + x_6 \geq 1, \\ x_1 + x_7 \geq 1, x_2 + x_3 \geq 1, x_2 + x_6 \geq 1, \\ x_3 + x_4 \geq 1, x_3 + x_6 \geq 1, x_4 + x_5 \geq 1, \\ x_4 + x_7 \geq 1, x_5 + x_7 \geq 1, x_6 + x_7 \geq 1, \\ 0 \leq x \leq 1 \end{array} \right\}
$$

- $x = (\frac{1}{2}, 1, 0, 1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})^\top$ は R の最適解 (最適値は $\frac{19}{2} = 9.5$)
- x は P の許容解ではないので，P の最適解ではない
  $\rightsquigarrow$ x から P の許容解を作る (丸め (rounding))

典型的な使い方 II の例 (3)

- $x \in \mathbb{R}^7$ から $x' \in \{0,1\}^7$ を次のように作成

$$x'_i = \begin{cases} 0 & (x_i < 1/2 \text{ のとき}) \\ 1 & (x_i \geq 1/2 \text{ のとき}) \end{cases}$$

- つまり， $x = (\frac{1}{2}, 1, 0, 1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})^\top$ なので

$$x' = (1, 1, 0, 1, 1, 1, 1)^\top$$

  目的関数値は 15
- これは (偶然にも？) P の許容解
- $9.5 = \boxed{\text{R の最適値}} \leq \boxed{\text{P の最適値}} \leq \boxed{x' \text{ の目的関数値}} = 15$

1. 最適化問題
2. 線形計画問題
3. 双対性
4. 半正定値計画問題
5. 緩和

文献情報

最適化の教科書

- 田村明久，村松正和,『最適化法』，共立出版，2002 年.
- A. Ben-Tal, A. Nemirovski. Lectures on Modern Convex Optimization: Analysis, Algorithms, and Engineering Applications. SIAM, 2001.

半正定値計画問題に関する web 上の情報源

- http://www-user.tu-chemnitz.de/~helmberg/semidef.html