

岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2019 年 1 月 11 日

最終更新：2019 年 1 月 15 日 11:26

スケジュール 後半 (予定)

- 8 弱理想グラフ定理 (2)：多面体的手法 (12/14)
- 9 楕円体法 (1)：基礎とアルゴリズム (12/21)
- 10 楕円体法 (2)：応用 (1/11)
- * センター試験準備 のため 休み (1/18)
- 11 組合せ最適化と半正定値計画法 (1/25)
- 12 グラフのシャノン容量 (2/1)
- 13 理想グラフに対するアルゴリズム (2/8)
- * 期末試験 (2/15?)

注意：予定の変更もありうる

評価法に関する変更

レポートにする予定 (詳細は後日)

目次

- 1 凸集合
- 2 復習：楕円体法
- 3 凸計画問題と楕円体法
- 4 半正定値行列全体の集合
- 5 今日のまとめ と 次回の予告

凸集合の例：球体

凸集合の例 (1)

閉球体 (closed ball) は凸集合

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\|^2 \leq 1\}$$

∴ 任意の $p, q \in X$ と任意の $\lambda \in [0, 1]$ に対して

$$\begin{aligned} \|\lambda p + (1 - \lambda)q\|^2 &= \lambda^2 \|p\|^2 + (1 - \lambda)^2 \|q\|^2 + 2\lambda(1 - \lambda) \underbrace{\langle p, q \rangle}_{\text{内積}} \\ &\leq \lambda^2 \|p\|^2 + (1 - \lambda)^2 \|q\|^2 + 2\lambda(1 - \lambda) \|p\| \|q\| \\ &\quad \text{(コーシー・シュワルツの不等式)} \\ &\leq \lambda^2 + (1 - \lambda)^2 + 2\lambda(1 - \lambda) \quad (p, q \in X \text{ より}) \\ &= (\lambda + (1 - \lambda))^2 = 1 \end{aligned}$$

スケジュール 前半

- 1 理想グラフと組合せ最適化 (10/5)
- 2 代表的な理想グラフ (1)：二部グラフと二部グラフの線グラフ (10/12)
- 3 代表的な理想グラフ (2)：二部グラフの補グラフ (10/19)
- 4 代表的な理想グラフ (3)：区間グラフと弦グラフ (10/26)
- * 出張のため休講 (11/2)
- 5 弱理想グラフ定理 (1)：グラフ理論的手法 (11/9)
- 6 組合せ最適化と線形計画法 (11/16)
- * 調布祭 のため 休み (11/23)
- * 休講 (11/30)
- 7 凸多面体の基礎 (12/7)

今日の内容

今日の内容

楕円体法を用いて、凸最適化問題を解く手法を理解する

- ▶ 凸集合とは？
- ▶ 凸集合の例
- ▶ 凸集合をアルゴリズムの入力とする方法

重要な例

半正定値行列全体の集合

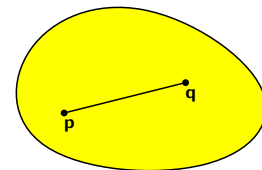
凸集合

$X \subseteq \mathbb{R}^n, n \geq 1$ ：自然数

定義：凸集合とは？

X が凸集合 (convex set) であるとは、
任意の 2 点 $p, q \in X$ に対して、次が成り立つこと

$$\lambda p + (1 - \lambda)q \in X \quad (\forall \lambda \in [0, 1])$$



つまり、任意の 2 点 $p, q \in X$ に対して p, q を結ぶ線分が X に含まれる

凸集合の例：半空間

凸集合の例 (2)

閉半空間 (closed halfspace) は凸集合

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a^T x \leq b\}$$

ただし、 $a \in \mathbb{R}^n - \{0\}, b \in \mathbb{R}$

∴ 任意の $p, q \in X$ と任意の $\lambda \in [0, 1]$ に対して

$$\begin{aligned} a^T (\lambda p + (1 - \lambda)q) &= \lambda a^T p + (1 - \lambda) a^T q \\ &\leq \lambda b + (1 - \lambda)b = b \end{aligned}$$

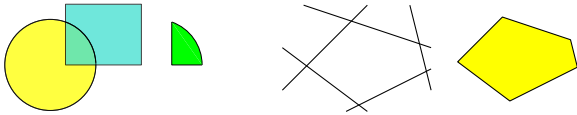
凸集合の重要な性質 (1)

$X, Y \subseteq \mathbb{R}^n, n \geq 1$: 自然数

凸集合の重要な性質 (1)

X と Y が凸集合 $\Rightarrow X \cap Y$ も凸集合

証明は演習問題



重要な帰結

凸多面体は凸集合

\therefore 凸多面体は有限個の閉半空間の共通部分

目次

- ① 凸集合
- ② 復習：楕円体法
- ③ 凸計画問題と楕円体法
- ④ 半正定値行列全体の集合
- ⑤ 今日のまとめ と 次回の予告

復習：正定値行列の性質

$n \geq 1$: 自然数, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$: 実対称行列

性質：正定値行列の性質

次は同値

- 1 V は正定値
- 2 V の固有値はすべて正 (注：固有値はすべて実数)
- 3 任意の $J \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ に対して, $\det(V_{JJ}) > 0$
ただし, V_{JJ} は行添え字を J , 列添え字を J とする V の小行列
- 4 ある実行列 $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が存在して, $V = LL^T$
(V の **コレスキー分解** (Cholesky decomposition))

例： $\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ の固有値は $\frac{5 \pm \sqrt{5}}{2} > 0$ で, 行列式は 5. また,

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{1/3} & \sqrt{5/3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{1/3} \\ 0 & \sqrt{5/3} \end{pmatrix}$$

楕円体法：基本アイデア

楕円体法は線形計画の許容性判定問題を解く

許容性判定問題とは？

与えられた凸多面体 P 中の点を 1 つ見つける問題
(凸多面体が空である場合は, 空であると判定する問題)

- 1 P を含む大きな楕円体 E を考える (半径 R , 原点中心とする球体)
- 2 E の中心 x が P に含まれていれば, x を返して終了
- 3 そうでなければ, P を定める不等式の中で, x が違反するものを 1 つ見つける
- 4 その不等式が定める半空間の境界が x を含むように平行移動する
- 5 E とその半空間の共通部分を囲む最小体積の楕円体を見つけて, 新たに E とする
- 6 十分反復しても止まらなければ, 空であると判定して終了
まだ続けるならば, 2 に戻る

凸集合の重要な性質 (2) : 分離定理

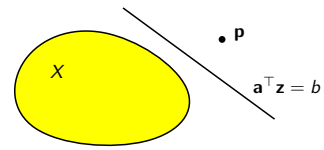
$n \geq 1$: 自然数, $X \in \mathbb{R}^n, p \in \mathbb{R}^n$

凸集合の重要な性質 (2) : 分離定理 (separation theorem)

X が凸集合, $p \notin X \Rightarrow$ ある $a \in \mathbb{R}^n - \{0\}$ と $b \in \mathbb{R}$ が存在して

$$a^T x \geq b \quad \forall x \in X, \quad a^T p \leq b$$

このような a, b に対して, 集合 $\{z \mid a^T z = b\}$ を **分離超平面** という



証明は省略 (そう簡単ではない)

復習：正定値行列

$n \geq 1$: 自然数, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$: 実対称行列

定義：正定値行列とは？

V が **正定値行列** (positive definite matrix) であるとは,
任意の $x \in \mathbb{R}^n - \{0\}$ に対して, 次が成り立つこと

$$x^T V x > 0$$

例： $\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ は正定値

$$\therefore \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 3x^2 + 2y^2 + 2xy = 2x^2 + y^2 + (x+y)^2$$

楕円体

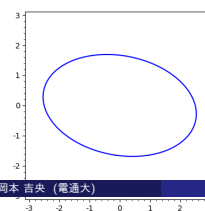
$n \geq 1$: 自然数

定義：楕円体とは？

n 次元空間における **楕円体** (ellipsoid) とは, 実対称正定値行列 $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ とベクトル $x \in \mathbb{R}^n$ を用いて次のように書ける集合

$$\{z \in \mathbb{R}^n \mid (z - x)^T V^{-1} (z - x) \leq 1\}$$

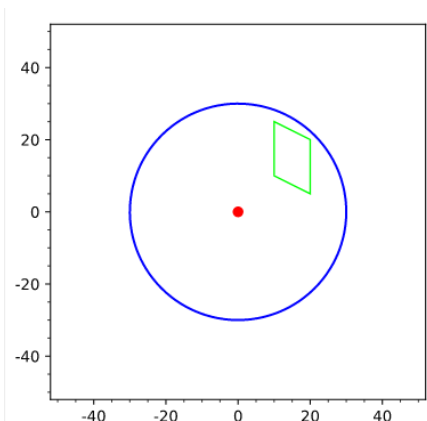
例： $V = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ のとき

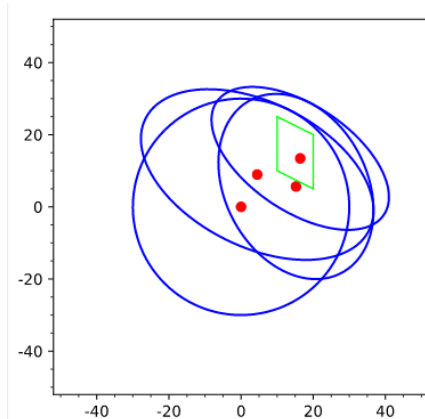
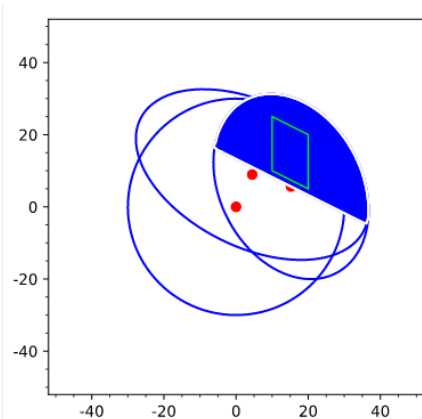
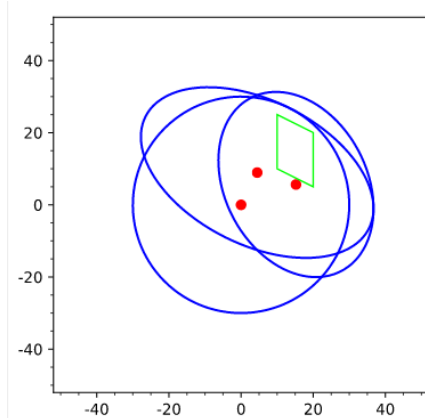
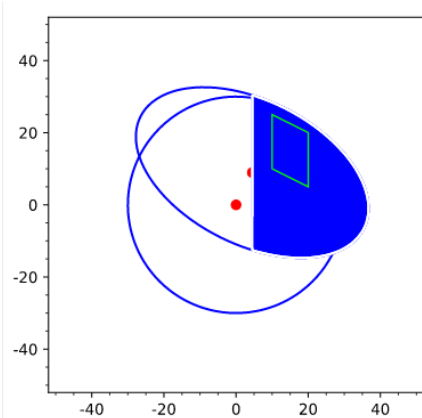
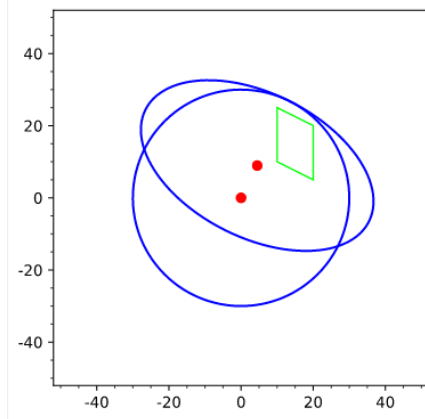
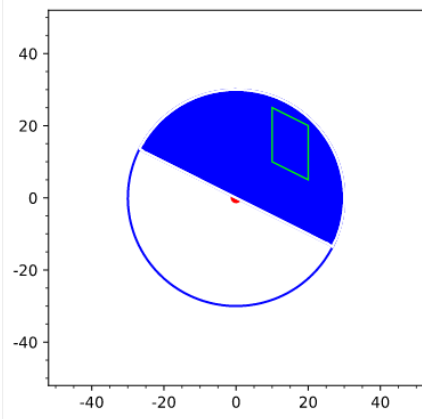


注

V が実対称正定値 \Rightarrow
 V^{-1} が存在し,
 V^{-1} も実対称正定値

楕円体法：例 (1)





重要な性質

考えている楕円体の体積は、楕円体法の 1 回の反復において、必ず $e^{-1/(5n)}$ 倍以下になる

- ▶ つまり、 N 回の反復を繰り返すと、体積は $e^{-N/(5n)}$ 倍以下になる
- ▶ 始めの楕円体の体積は R^n

つまり、体積が十分小さい $\epsilon^n > 0$ になるまでの反復回数 N は次を満たす

$$R^n \cdot e^{-N/(5n)} \leq \epsilon^n$$

つまり、 $N = O(n^2 \log(R/\epsilon))$ とすれば楕円体法が“正しく”動く
(前回の「体積補題」を参照)

- 1 凸集合
- 2 復習：楕円体法
- 3 凸計画問題と楕円体法
- 4 半正定値行列全体の集合
- 5 今日のまとめ と 次回予告

$X \subseteq \mathbb{R}^n$: 凸集合, $n \geq 1$: 自然数, $c \in \mathbb{R}^n$

凸計画問題とは？

次の形の最適化問題 (変数は $x \in \mathbb{R}^n$)

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && c^T x \\ & \text{subject to} && x \in X \end{aligned}$$

X が凸多面体であるとき, これは線形計画問題

注

これは教科書や論文でよく現れる「凸計画問題」と見た目が違うが, 本質は (さほど) 変わらない

凸計画問題と楕円体法: (1) 凸集合の入力法

凸集合は「分離オラクル」というサブルーチンとして与えられる

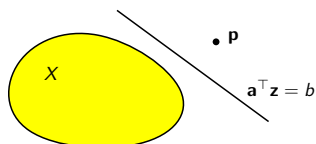
分離オラクル (separation oracle) とは？

凸集合 $X \subseteq \mathbb{R}^n$ に対する分離オラクルとは次を行うアルゴリズム

- ▶ 入力: 点 $p \in \mathbb{R}^n$
- ▶ 出力: $p \in X$ ならば, 「YES」
 $p \notin X$ ならば, 次を満たす $a \in \mathbb{R}^n - \{0\}$ と $b \in \mathbb{R}$

$$a^T x \geq b \quad \forall x \in X, \quad a^T p \leq b$$

分離定理から, そのような a, b の存在が保証される



凸計画問題と楕円体法: 許容性判定問題

今の仮定を使えば, 楕円体法で許容性判定問題を解ける

凸集合に対する許容性判定問題とは？

- ▶ 入力: 凸集合 $X \subseteq \mathbb{R}^n$ (分離オラクルとして)
ただし, 前ページに挙げた仮定を満たす
- ▶ 出力: 点 $p \in X$
- ▶ 分離オラクルと仮定を使うことで, 楕円体法を動かすことができる
- ▶ 反復回数 = $n^2 \log(R/r)$ (多項式時間)

注1: 実際は, 数値誤差などを考えないといけないので, もっと複雑

注2: 実際は, 許容性判定問題を「近似」的にしか解けない

凸計画問題と楕円体法: 再掲

先に結論

凸計画問題は (ある仮定を満たせば) 楕円体法で解ける

考えなくてはならないこと

- (1) どのように凸集合 X を入力するのか? (済)
- (2) どのように最適化問題を許容性判定問題に置き換えるのか?

先に結論

凸計画問題は (ある仮定を満たせば) 楕円体法で解ける

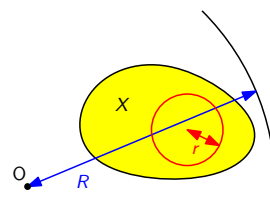
考えなくてはならないこと

- (1) どのように凸集合 X を入力するのか?
- (2) どのように最適化問題を許容性判定問題に置き換えるのか?

凸計画問題と楕円体法: 楕円体法がうまく動くための仮定

楕円体法をうまく動かすためには, 凸集合 X に仮定が必要

- ▶ X は原点中心, 半径 R の球体に含まれている
- ▶ X は半径 r の球体を含んでいる (参照: 前回の「体積補題」)
- ▶ アルゴリズムは R と r を知っている



凸集合に対する許容性判定問題を解くための楕円体法: 考え方

線形計画の場合とほとんど同じ

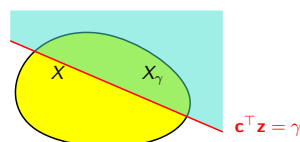
- 1 X を含む大きな楕円体 E を考える (半径 R , 原点中心とする球体)
- 2 E の中心 x が X に含まれていれば, x を返して終了
- 3 そうでなければ, 分離オラクルによって, X と x に対する分離超平面 H を 1 つ見つける
- 4 H が x を含むように平行移動する
- 5 E と H の定める半空間の共通部分を囲む最小体積の楕円体を見つけて, 新たに E とする
- 6 十分反復しても止まらなければ, 空であると判定して終了
まだ続けるならば, 2 に戻る

凸計画問題と楕円体法: (2) 最適化問題と許容性判定問題

許容性判定問題を使って, 凸計画問題 (最適化問題) を解くには?

解き方: 最適値を二分探索によって探す

- ▶ 最適値が γ であると推測したとき, 次の凸集合を考える
- $$X_\gamma = X \cap \{z \in \mathbb{R}^n \mid c^T z \leq \gamma\}$$
- ▶ $X_\gamma \neq \emptyset \Leftrightarrow$ 最適値 $\leq \gamma$
 - ▶ X が前述の仮定を満たす $\Rightarrow -\|c\|R \leq \gamma \leq \|c\|R$ で γ を動かす
 - ▶ \therefore 二分探索の反復回数 = $O(\log \|c\|R)$



X_γ が空集合かどうか調べるために, 許容性判定問題を使いたい

許容性判定問題を使って、凸計画問題 (最適化問題) を解くには？

問題点

X_r は半径 r の球体を含まないかもしれない

- ▶ しかし、その場合は X_r の体積自体も小さいので、 $X_r \approx \emptyset$
- ▶ つまり、楕円体法は多項式時間で「近似的に空集合」であると判定可
- ▶ これによって、最適化問題は「近似」的に解ける (もともと許容性判定も近似的にしかできないので、問題なし)

細かい議論は省略

結論

凸計画問題は (与えられる凸集合がある仮定を満たせば) 近似的に多項式時間で解ける

仮定：分離オラクルがある、大きな球体に含まれる、小さな球体を含む

目次

- ① 凸集合
- ② 復習：楕円体法
- ③ 凸計画問題と楕円体法
- ④ 半正定値行列全体の集合
- ⑤ 今日のまとめ と 次回の予告

復習：半正定値行列

$n \geq 1$: 自然数, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$: 実対称行列

定義：半正定値行列とは？

A が半正定値行列 (positive semidefinite matrix) であるとは、任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対して、次が成り立つこと

$$x^T A x \geq 0$$

例： $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ は半正定値

$$\therefore (x \ y) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = x^2$$

補足

実対称行列 A が半正定値であることを「 $A \succeq O$ 」と書くことも多い

注： A が正定値 $\Rightarrow A$ は半正定値

半正定値行列全体の集合

$n \geq 1$: 自然数

記法

- ▶ $S^n \subseteq \mathbb{R}^{n \times n}$: n 次実対称行列全体の集合
- ▶ $S_+^n \subseteq \mathbb{R}^{n \times n}$: n 次実対称半正定値行列全体の集合

例： $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \in S_+^2, \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \notin S_+^2$

最後の注意

一般の凸計画問題に対して、できることはすべて「近似的」

- ▶ 近似的な分離オラクル
- ▶ 近似的な許容性判定
- ▶ 近似的な最適化

多項式時間というときは、次の多項式時間

- ▶ (近似的な) 分離オラクルの呼び出し回数
- ▶ n
- ▶ $\text{size}(c)$ (c は目的関数の方向)
- ▶ $\log(1/\varepsilon)$ (ε は近似精度)
- ▶ $\log(R/r)$ (R, r は仮定に出てくるもの)

ただし、線形計画問題に対してはすべて「厳密」に行える

半正定値行列全体の集合

いまからやること

- ▶ 半正定値行列全体の集合は凸集合であることを証明する
- ▶ 半正定値行列全体の集合に対する分離オラクルを作る

半正定値行列は最適化、計算理論においてとても重要な役割を持っている

復習：半正定値行列の性質

$n \geq 1$: 自然数, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$: 実対称行列

性質：半正定値行列の性質

次は同値

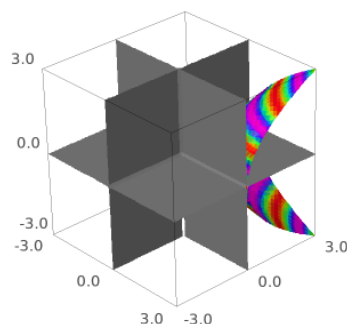
- 1 A は半正定値
- 2 A の固有値はすべて非負 (注：固有値はすべて実数)
- 3 任意の $J \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ に対して、 $\det(A_{JJ}) \geq 0$
ただし、 A_{JJ} は行添え字を J 、列添え字を J とする A の小行列
- 4 ある実行列 $L \in \mathbb{R}^{n \times r}$ が存在して、 $A = LL^T$
ただし、 $r = \text{rank } A$ (A のコレスキー分解 (Cholesky decomposition))

例： $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ の固有値は $1, 0$ で、行列式は 0 。また、

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}$$

半正定値行列全体の集合：例

$$\begin{pmatrix} x & z \\ z & y \end{pmatrix} \in S_+^2 \Leftrightarrow x \geq 0, y \geq 0, xy - z^2 \geq 0$$



$n \geq 1$: 自然数

性質: 半正定値行列全体の集合は凸集合

集合 S_+^n は凸集合証明: $A, B \in S_+^n$ とする

- ▶ 半正定値行列の定義から, 任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対して $x^T A x \geq 0$ かつ $x^T B x \geq 0$
- ▶ $\lambda \in [0, 1]$ とすると, 証明したいことは任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対して, $x^T (\lambda A + (1-\lambda)B)x \geq 0$
- ▶ 実際に式変形をすると

$$\begin{aligned} x^T (\lambda A + (1-\lambda)B)x &= \lambda x^T A x + (1-\lambda)x^T B x \\ &\geq \lambda \cdot 0 + (1-\lambda) \cdot 0 = 0 \end{aligned}$$

が得られる

□

半正定値行列に対する最適化問題を解くなら, 分離オラクルが欲しい

 S_+^n に対する分離オラクルとは?

- ▶ 入力: 実対称行列 $V \in S^n$
- ▶ 出力: $V \in S_+^n$ ならば, 「Yes」
 $V \notin S_+^n$ ならば, 次を満たす行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ と実数 $b \in \mathbb{R}$

$$A \bullet X \geq b \quad \forall X \in S_+^n, \quad A \bullet V \leq b$$

ただし, $A \bullet X = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij} X_{ij} = \text{tr}(A^T X)$ (行列に対する内積)

$$\text{tr} \left(\begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} x & z \\ z & y \end{pmatrix} \right) = \text{tr} \left(\begin{pmatrix} ax + cz & az + cy \\ cx + bz & cz + by \end{pmatrix} \right) = ax + 2cz + by$$

構成法のアイデア

入力 V の最小固有値 λ_{\min} を求めてみる

- 1 $\lambda_{\min} \geq 0 \Rightarrow V$ は半正定値 (YES と出力)
- 2 $\lambda_{\min} < 0 \Rightarrow V$ は半正定値ではない
 - ▶ このときに, $x^T V x < 0$ となる x を見つける

例: $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ の特性方程式は $(\lambda - 1)^2 - 4 = (\lambda + 1)(\lambda - 3)$ なので, 固有値は 3, -1

構成法のアイデア (続き)

 x を最小固有値 $\lambda_{\min} < 0$ に関する固有ベクトルとする

- ▶ このとき, $x^T V x = x^T \lambda_{\min} x = \lambda_{\min} \|x\|^2 < 0$
- ▶ 一方, 任意の半正定値行列 $X \in S_+^n$ に対して $x^T X x \geq 0$
- ▶ ここで, $x^T X x = (x x^T) \bullet X$ なので, $A = x x^T, b = 0$ とすればよい

例: $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ の固有値 -1 に関する固有ベクトルは $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ つまり, 分離超平面は次の式で与えられる

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{12} & x_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = x_{11} + x_{22} - 2x_{12} = 0$$

構成法のアイデア (続き)

固有値を求めるアルゴリズムはたくさん知られている

- ▶ 例えば, QR アルゴリズムを使えば, 精度よく, 多項式時間ですべての固有値と固有ベクトルを計算可能

このような話は『数値計算』, 『数値解析』, 『HPC』で扱うものなのでここでは省略

- 1 凸集合
- 2 復習: 楕円体法
- 3 凸計画問題と楕円体法
- 4 半正定値行列全体の集合
- 5 今日のまとめ と 次回の予告

今日の内容

楕円体法を用いて, 凸最適化問題を解く手法を理解する

- ▶ 凸集合とは?
- ▶ 凸集合の例
- ▶ 凸集合をアルゴリズムの入力とする方法

重要な例

半正定値行列全体の集合

次回の予告

半正定値行列を組合せ最適化に応用していく