離散最適化基礎論　第 11 回
組合せ最適化と半正定値計画法

岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2019 年 1 月 25 日

最終更新：2019 年 1 月 25 日　10:59

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)

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)

今日の内容

今日の内容

半正定値計画法を組合せ最適化に応用する
- 半正定値計画法とは？
- Lovász 数
- Lovász 数の計算法

目次

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 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して，次が成り立つこと

$$\boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x} \geq 0$$

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

$$\because \quad \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = x^2$$

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

$\boxed{注}$：A が正定値 $\Rightarrow$ A は半正定値

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 $J \subseteq \{1, 2, \ldots, n\}$ 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，$A = LL^\top$
   ただし，$r = \operatorname{rank} A$ (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

$n \geq 1$：自然数

記法

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

例：$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathcal{S}^2_+$，$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \not\in \mathcal{S}^2_+$

重要な性質

- $\mathcal{S}^n_+$ は凸集合
- $\mathcal{S}^n_+$ に対して，多項式時間分離オラクルを構成可能

目次

半正定値計画 (semidefinite programming)

$n \geq 1, m \geq 0$：自然数，$C, A_1, \ldots, A_m \in \mathbb{R}^{n \times n}$，$b_1, \ldots, b_m \in \mathbb{R}$

定義：半正定値計画問題とは？

次の形をした最適化問題 (変数は X)

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & C \bullet X \\ \text{subject to} & A_i \bullet X = b_i \quad (i \in \{1, \ldots, m\}) \\ & X \succeq O \end{array}$$

ここで，$C \bullet X = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} C_{ij} X_{ij} = \mathrm{tr}(C^\top X)$

補足：線形計画問題との類似

半正定値計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{max.} & C \bullet X \\ \text{s. t.} & A_i \bullet X = b_i \\ & \quad (i \in \{1, \ldots, m\}) \\ & X \succeq O \end{array}$$

線形計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{max.} & \boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{x} \\ \text{s. t.} & \boldsymbol{a}_i^\top \boldsymbol{x} = b_i \\ & \quad (i \in \{1, \ldots, m\}) \\ & \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{0} \end{array}$$

半正定値計画問題と凸計画問題

半正定値計画問題は凸計画問題

半正定値計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & C \bullet X \\ \text{subject to} & A_i \bullet X = b_i \quad (i \in \{1, \ldots, m\}) \\ & X \succeq O \end{array}$$

許容領域は凸集合

$$\text{許容領域} = \left\{ X \in \mathcal{S}^n \;\middle|\; \begin{array}{l} A_i \bullet X = b_i \quad (i \in \{1, \ldots, m\}) \\ X \succeq O \end{array} \right\}$$

- 復習：$\{X \mid X \succeq O\}$ は凸集合 ($\mathcal{S}^n_+$ は凸集合)
- 事実：$A_i \bullet X = b_i \Leftrightarrow A_i \bullet X \leq b_i$ かつ $A_i \bullet X \geq b_i$
- 復習：2 つの凸集合の共通部分も凸集合

半正定値計画問題に対するアルゴリズム

許容領域がある仮定を満たせば，楕円体法によって
半正定値計画問題は多項式時間で (近似的に) 解ける

半正定値計画問題は凸計画問題

半正定値計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & C \bullet X \\ \text{subject to} & A_i \bullet X = b_i \quad (i \in \{1, \ldots, m\}) \\ & X \succeq O \end{array}$$

許容領域は凸集合

$$\text{許容領域} = \left\{ X \in \mathcal{S}^n \;\middle|\; \begin{array}{l} A_i \bullet X = b_i \quad (i \in \{1, \ldots, m\}) \\ X \succeq O \end{array} \right\}$$

ある仮定：大きな球に含まれる，小さな球を含む

- 注：分離オラクルは前回構成済み

目次

László Lovász

ラースロー・ロヴァース (1948–)

http://web.cs.elte.hu/~lovasz/

Lovász 数

$G = (V, E)$：無向グラフ，$n = |V|$

定義：Lovász 数

G の Lovász 数 (Lovász number) とは，次の最適化問題の最適値

$$\begin{array}{lll} \text{(LOV)} & \text{maximize} & \sum_{u \in V} \sum_{v \in V} X_{uv} \\ & \text{subject to} & X_{uv} = 0 \quad (\{u, v\} \in E) \\ & & \sum_{v \in V} X_{vv} = 1 \\ & & X \succeq O \quad (\Leftrightarrow X \in \mathcal{S}^n_+) \end{array}$$

G の Lovász 数を $\vartheta(G)$ で表す

この最適化問題は半正定値計画問題

補グラフの Lovász 数

$G = (V, E)$：無向グラフ，$n = |V|$

補グラフの Lovász 数

補グラフ $\overline{G}$ の Lovász 数 $\vartheta(\overline{G})$ は次の最適化問題の最適値

$$
\begin{array}{llll}
(\overline{\mathrm{LOV}}) & \text{maximize} & \displaystyle\sum_{u \in V}\sum_{v \in V} X_{uv} & \\
& \text{subject to} & X_{uv} = 0 & (\{u, v\} \notin E) \\
& & \displaystyle\sum_{v \in V} X_{vv} = 1 & \\
& & X \succeq O & (\Leftrightarrow X \in \mathcal{S}^n_+)
\end{array}
$$

これも半正定値計画問題

Lovász 数とクリーク数，染色数

$G = (V, E)$：無向グラフ

性質：Lovász 数とクリーク数，染色数

$$\omega(G) \leq \vartheta(\overline{G}) \leq \chi(G)$$

『Lovász のサンドイッチ定理』とも呼ばれる

証明

次を順に示す

1. $\omega(G) \leq \vartheta(\overline{G})$
2. $\vartheta(\overline{G}) \leq \chi(G)$

Lovász 数とクリーク数 (1)

- C を G の最大クリークとする
- 次のベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ を考える

$$y_v = \begin{cases} 1 & (v \in C) \\ 0 & (v \notin C) \end{cases}$$

- ここで，$X = \dfrac{1}{|C|}\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^\top$ とする

Lovász 数とクリーク数 (2)

$X = \dfrac{1}{|C|}\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^\top$ とする

このとき，X は問題 $(\overline{\mathrm{LOV}})$ の許容解

- X は半正定値 (c.f. コレスキー分解)
- $\{u, v\} \notin E$ のとき，u, v は同時に C の要素になれないので

$$X_{uv} = \frac{1}{|C|} y_u y_v = 0$$

- また，$\displaystyle\sum_{v \in V} X_{vv} = \sum_{v \in V} \frac{1}{|C|} y_v^2 = \frac{1}{|C|} \cdot |C| = 1$

$$
\begin{aligned}
\text{つまり，}\quad \vartheta(\overline{G}) &= (\overline{\mathrm{LOV}})\text{ の最適値} \geq \sum_{u \in V}\sum_{v \in V} X_{uv} \\
&= \sum_{u \in V}\sum_{v \in V} \frac{1}{|C|} y_u y_v = \frac{1}{|C|} \cdot |C|^2 = |C| = \omega(G)
\end{aligned}
$$

Lovász 数とクリーク数，染色数：再掲

$G = (V, E)$：無向グラフ

性質：Lovász 数とクリーク数，染色数

$$\omega(G) \leq \vartheta(\overline{G}) \leq \chi(G)$$

『Lovász のサンドイッチ定理』とも呼ばれる

証明

次を順に示す

1. $\omega(G) \leq \vartheta(\overline{G})$ (済)
2. $\vartheta(\overline{G}) \leq \chi(G)$

Lovász 数と染色数 (1)

X を問題 $(\overline{\mathrm{LOV}})$ の最適解とする

- $\chi(G) = k$ とする
- このとき，V は k 個の独立集合 $V_1, \ldots, V_k$ に分割できる
- 各 $j \in \{1, \ldots, k\}$ に対して，次のベクトル $\boldsymbol{y}^j \in \mathbb{R}^n$ を定義

$$y^j_v = \begin{cases} 1 & (v \in V_j) \\ 0 & (v \notin V_j) \end{cases}$$

Lovász 数と染色数 (2)

- X は半正定値なので，$(k\boldsymbol{y}^j - \mathbf{1})^\top X (k\boldsymbol{y}^j - \mathbf{1}) \geq 0$
- 一方，次が成り立つ

$$
\begin{aligned}
0 &\leq \sum_{j=1}^{k} (k\boldsymbol{y}^j - \mathbf{1})^\top X (k\boldsymbol{y}^j - \mathbf{1}) \\
&= k^2 \sum_{j=1}^{k} \boldsymbol{y}^{j\top} X \boldsymbol{y}^j - 2k \sum_{j=1}^{k} \boldsymbol{y}^{j\top} X \mathbf{1} + \sum_{j=1}^{k} \mathbf{1}^\top X \mathbf{1} \\
&= k^2 \sum_{j=1}^{k} \sum_{v \in V_j} X_{vv} - 2k \mathbf{1}^\top X \mathbf{1} + k \mathbf{1}^\top X \mathbf{1} \\
&= k^2 \sum_{v \in V} X_{vv} - k \sum_{u \in V}\sum_{v \in V} X_{uv} \\
&= k^2 - k\vartheta(\overline{G})
\end{aligned}
$$

- すなわち，$\vartheta(\overline{G}) \leq k = \chi(G)$

Lovász 数とクリーク数，染色数：再掲

$G = (V, E)$：無向グラフ

性質：Lovász 数とクリーク数，染色数

$$\omega(G) \leq \vartheta(\overline{G}) \leq \chi(G)$$

『Lovász のサンドイッチ定理』とも呼ばれる

証明

次を順に示す

1. $\omega(G) \leq \vartheta(\overline{G})$ (済)
2. $\vartheta(\overline{G}) \leq \chi(G)$ (済)

目次

Lovász 数

$G = (V, E)$：無向グラフ，$n = |V|$

定義：Lovász 数

G の Lovász 数 (Lovász number) とは，次の最適化問題の最適値

$$\begin{array}{lll} \text{(LOV)} & \text{maximize} & \sum_{u \in V} \sum_{v \in V} X_{uv} \\ & \text{subject to} & X_{uv} = 0 \quad (\{u, v\} \in E) \\ & & \sum_{v \in V} X_{vv} = 1 \\ & & X \succeq O \quad (\Leftrightarrow X \in \mathcal{S}^n_+) \end{array}$$

G の Lovász 数を $\vartheta(G)$ で表す

この最適化問題は半正定値計画問題なので，
「仮定」を満たせば，$\vartheta(G)$ を多項式時間で計算できる

大きな球に含まれること

- 最適値 $\vartheta(G)$ は $\chi(\overline{G})$ 以下なので，最適解 X に対して

$$\sum_{u \in V} \sum_{v \in V} X_{uv}^2 \leq \left(\sum_{u \in V} \sum_{v \in V} X_{uv} \right)^2 \leq \chi(\overline{G})^2$$

- つまり，最適解は必ず原点中心半径 $\chi(\overline{G})$ の球の中にある
(その球の中だけを探索すればよい)

小さな球を含むこと (1)

$$\text{(LOV) の許容領域} = \left\{ X \in \mathcal{S}^n \;\middle|\; \begin{array}{l} X_{uv} = 0 \quad (\{u, v\} \in E) \\ \sum_{v \in V} X_{vv} = 1 \\ X \succeq O \end{array} \right\}$$

- 変数の数は n^2 だが，自由度は $\frac{1}{2} n(n+1) - |E| - 1$
- この次元の小さな球を含むことを示す

まず，次の行列 X は許容解 (許容領域の要素)

$$X_{uv} = \begin{cases} \frac{1}{n} & (u = v) \\ 0 & (u \neq v) \end{cases}$$

小さな球を含むこと (2)

$$\text{(LOV) の許容領域} = \left\{ X \in \mathcal{S}^n \;\middle|\; \begin{array}{l} X_{uv} = 0 \quad (\{u, v\} \in E) \\ \sum_{v \in V} X_{vv} = 1 \\ X \succeq O \end{array} \right\}$$

この X をちょっとずらした行列も許容解

補題

実対称優対角行列は半正定値

行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が優対角であるとは，
任意の i に対して $|a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$ が成り立つこと

実対称優対角行列は半正定値であることの証明 (1)

<u>補題の証明</u>：$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を実対称優対角行列であるとする

- A の最小固有値を λ，それに対応する固有ベクトルの 1 つを $\boldsymbol{x}$ とする
- $\boldsymbol{x}$ の中で，その成分の絶対値 $|x_i|$ が最大の添え字を k とする
($x_k \neq 0$ に注意)
- このとき，$A\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}$ なので，この式の第 k 行を見ると

$$\sum_{j=1}^{n} a_{kj} x_j = \lambda x_k$$

- すなわち，

$$\sum_{j \neq k} a_{kj} x_j = (\lambda - a_{kk}) x_k$$

実対称優対角行列は半正定値であることの証明 (2)

<u>補題の証明 (続き)</u>：

- ここで，$x_k \neq 0$ より

$$|\lambda - a_{kk}| = \left| \frac{\sum_{j \neq k} a_{kj} x_j}{x_k} \right| \leq \sum_{j \neq k} \left| \frac{a_{kj} x_j}{x_k} \right| \leq \sum_{j \neq k} |a_{kj}|$$

- A は優対角行列なので，$|\lambda - a_{kk}| \leq |a_{kk}|$
- つまり，実対称行列の固有値は実数なので，$\lambda \in [0, 2a_{kk}]$ であり，
特に，$\lambda \geq 0$ □

Lovász 数の計算

$G = (V, E)$：無向グラフ，$n = |V|$

定義：Lovász 数

G の Lovász 数 (Lovász number) とは，次の最適化問題の最適値

$$\begin{array}{lll} \text{(LOV)} & \text{maximize} & \sum_{u \in V} \sum_{v \in V} X_{uv} \\ & \text{subject to} & X_{uv} = 0 \quad (\{u, v\} \in E) \\ & & \sum_{v \in V} X_{vv} = 1 \\ & & X \succeq O \quad (\Leftrightarrow X \in \mathcal{S}^n_+) \end{array}$$

結論

Lovász 数の計算は多項式時間でできる

目次

Lovász 数と理想グラフ

ここまでのまとめ

- $\omega(G) \leq \vartheta(\overline{G}) \leq \chi(G)$
- $\vartheta(\overline{G})$ は多項式時間で計算可能

G が理想グラフであるならば，$\omega(G) = \chi(G)$ なので，

$$\omega(G) = \vartheta(\overline{G}) = \chi(G)$$

$\therefore \vartheta(\overline{G})$ を計算することで，$\omega(G), \chi(G)$ が計算可能

結論

理想グラフのクリーク数と染色数は多項式時間で計算可能

実際に最大クリークと最小彩色を求める方法は次々回

目次

今日の内容

今日の内容

半正定値計画法を組合せ最適化に応用する

- 半正定値計画法とは？
- Lovász 数
- Lovász 数の計算法