離散最適化基礎論　第 10 回
楕円体法：応用

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 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

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

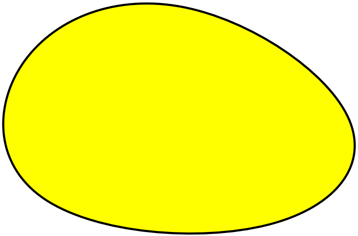
目次

$X \subseteq \mathbb{R}^n$, $n \geq 1$：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 $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q} \in X$ に対して，次が成り立つこと

$$\lambda \boldsymbol{p} + (1 - \lambda)\boldsymbol{q} \in X \qquad (\forall\ \lambda \in [0, 1])$$



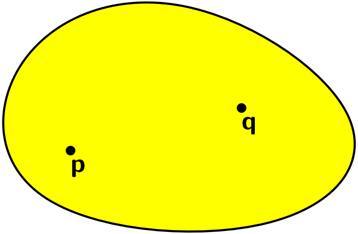
つまり，任意の 2 点 $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q} \in X$ に対して $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}$ を結ぶ線分が X に含まれる

$X \subseteq \mathbb{R}^n$, $n \geq 1$：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 $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q} \in X$ に対して，次が成り立つこと

$$\lambda \boldsymbol{p} + (1-\lambda)\boldsymbol{q} \in X \qquad (\forall\ \lambda \in [0,1])$$



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

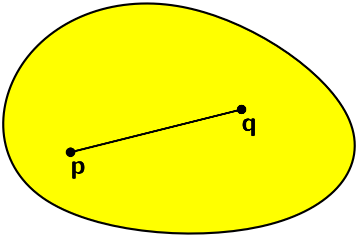
凸集合

$X \subseteq \mathbb{R}^n$, $n \geq 1$：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 $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q} \in X$ に対して，次が成り立つこと

$$\lambda \boldsymbol{p} + (1 - \lambda)\boldsymbol{q} \in X \qquad (\forall\ \lambda \in [0, 1])$$



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

凸集合の例 (1)

閉球体 (closed ball) は凸集合

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

$\because$ 任意の $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q} \in X$ と任意の $\lambda \in [0,1]$ に対して

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

凸集合の例 (2)

閉半空間 (closed halfspace) は凸集合

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

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

$\because$ 任意の $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q} \in X$ と任意の $\lambda \in [0,1]$ に対して

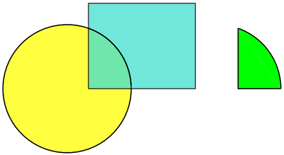
$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}^\top(\lambda \boldsymbol{p} + (1-\lambda)\boldsymbol{q}) &= \lambda \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{p} + (1-\lambda)\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{q} \\ &\leq \lambda b + (1-\lambda) b = b \end{aligned}$$

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

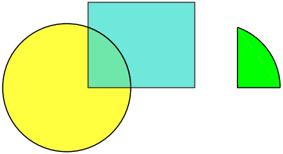


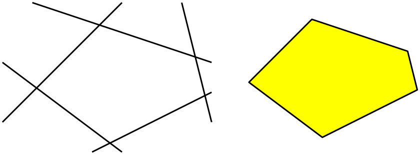
$X, Y \subseteq \mathbb{R}^n$,　$n \geq 1$: 自然数

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

$\because$ 凸多面体は有限個の閉半空間の共通部分

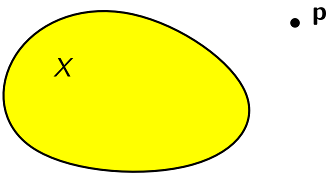
$n \geq 1$：自然数，$X \in \mathbb{R}^n$，$\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^n$

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

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

$$\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{x} \geq b \quad \forall\, \boldsymbol{x} \in X, \qquad \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{p} \leq b$$

このような $\boldsymbol{a}, b$ に対して，集合 $\{\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{z} = b\}$ を分離超平面という



証明は省略 (そう簡単ではない)

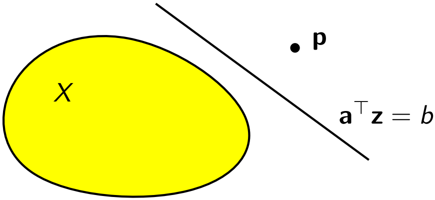
$n \geq 1$：自然数，$X \in \mathbb{R}^n$，$\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^n$

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

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

$$\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{x} \geq b \quad \forall\, \boldsymbol{x} \in X, \qquad \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{p} \leq b$$

このような $\boldsymbol{a}, b$ に対して，集合 $\{\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{z} = b\}$ を分離超平面という



証明は省略 (そう簡単ではない)

目次

$n \geq 1$：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 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n - \{\mathbf{0}\}$ に対して，次が成り立つこと

$$\boldsymbol{x}^\top V \boldsymbol{x} > 0$$

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

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

$n \geq 1$：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 $J \subseteq \{1, 2, \ldots, n\}$ 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，$V = LL^\top$
   (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 $\dfrac{5 \pm \sqrt{5}}{2} > 0$ で，行列式は 5．また，

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

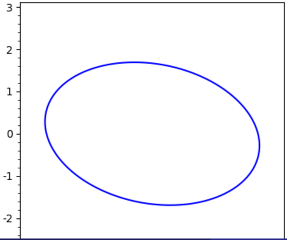
$n \geq 1$：自然数

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 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ を用いて次のように書ける集合

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

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

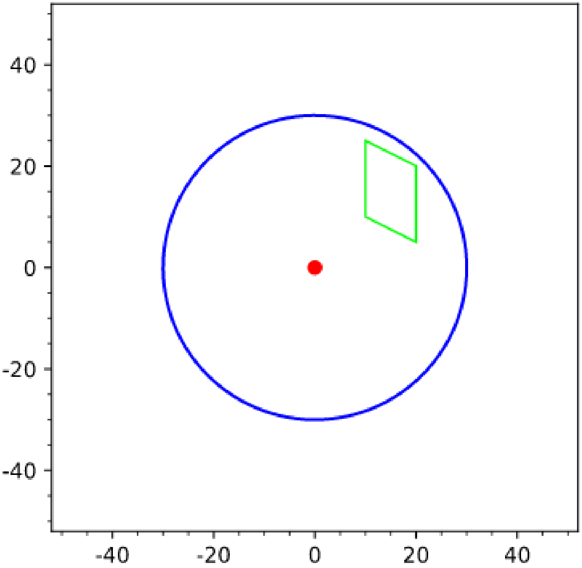
楕円体法は線形計画の許容性判定問題を解く

許容性判定問題とは？

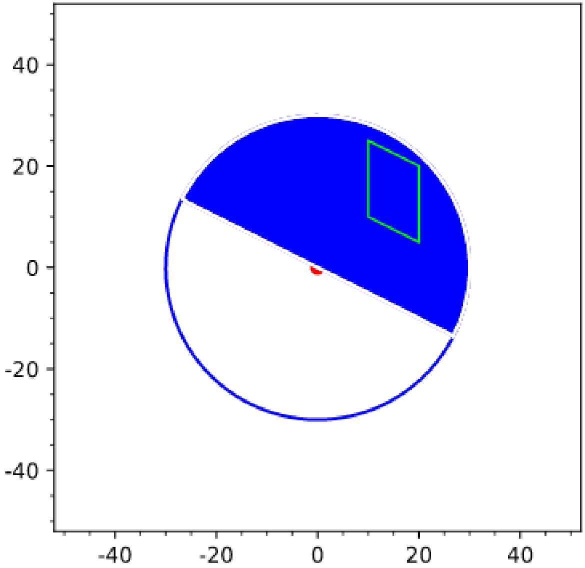
与えられた凸多面体 P の中の点を 1 つ見つける問題
(凸多面体が空である場合は，空であると判定する問題)

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 $\boldsymbol{x}$ が P に含まれていれば，$\boldsymbol{x}$ 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，$\boldsymbol{x}$ 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 $\boldsymbol{x}$ 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

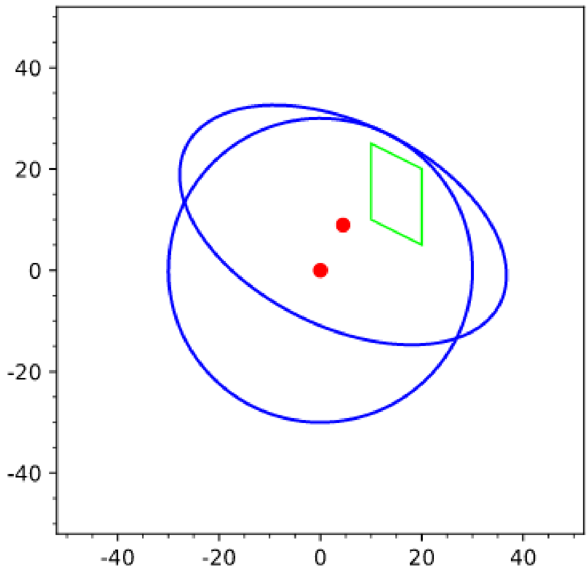
楕円体法：例 (1)



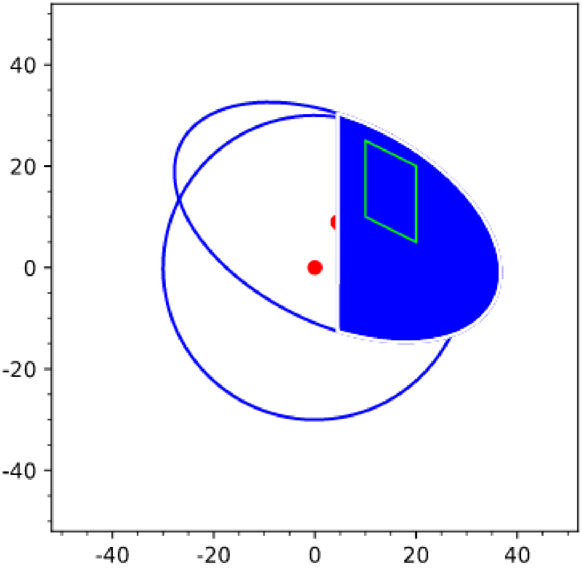
楕円体法：例 (2)



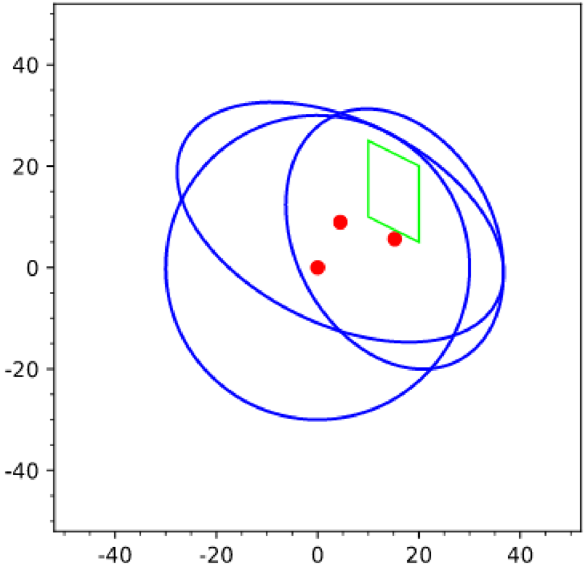
楕円体法：例 (3)



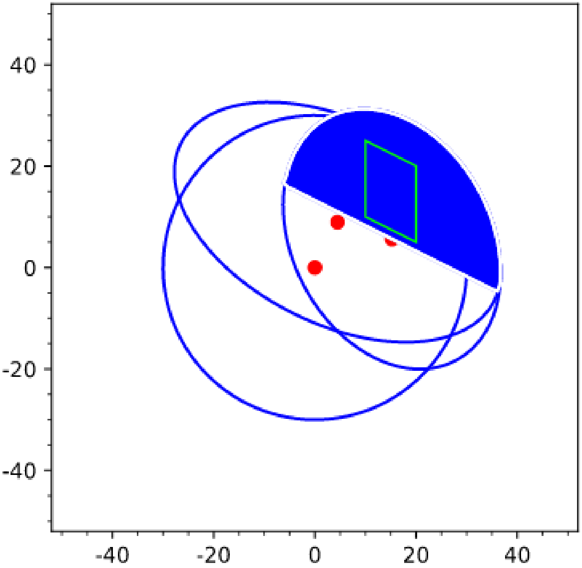
楕円体法：例 (4)

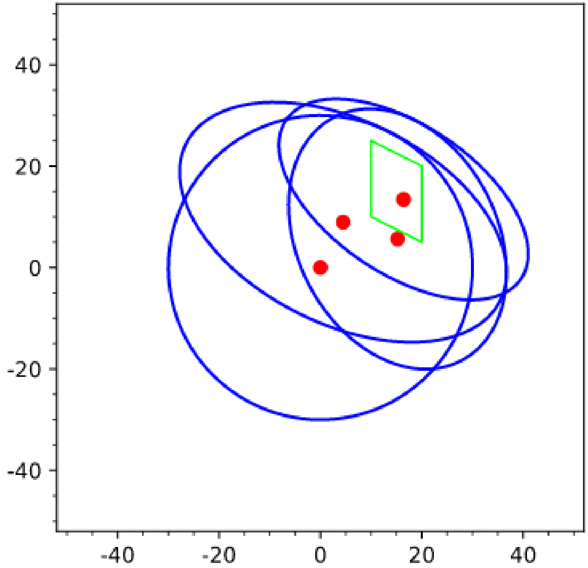


楕円体法：例 (5)



楕円体法：例 (6)




40
20
0
-20
-40
-40
-20
0
20
40

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 $\mathrm{e}^{-1/(5n)}$ 倍以下になる

- つまり，N 回の反復を繰り返すと，体積は $\mathrm{e}^{-N/(5n)}$ 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 $\varepsilon^n > 0$ になるまでの反復回数 N は次を満たす

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

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

目次

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

凸計画問題とは？

次の形の最適化問題 (変数は $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$)

$$\begin{array}{rl} \text{minimize} & \boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{x} \\ \text{subject to} & \boldsymbol{x} \in X \end{array}$$

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

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

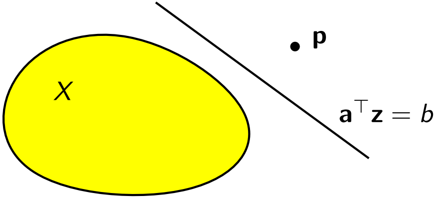
分離オラクル (separation oracle) とは？

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

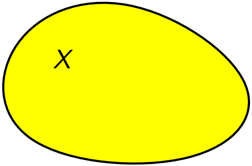
$$\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{x} \geq b \quad \forall\, \boldsymbol{x} \in X, \qquad \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{p} \leq b$$

分離定理から，そのような $\boldsymbol{a}$, b の存在が保証される



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
$$X \subseteq \{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n \mid \|\boldsymbol{z}\| \leq R\}$$
- X は半径 r の球体を含んでいる　　　(参照：前回の「体積補題」)
$$\exists\, \boldsymbol{x} \colon \{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n \mid \|\boldsymbol{z} - \boldsymbol{x}\| \leq r\} \subseteq X$$
- アルゴリズムは R と r を知っている



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

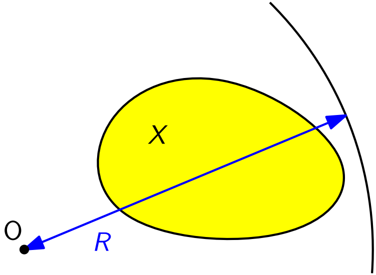
- X は原点中心，半径 R の球体に含まれている

$$X \subseteq \{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n \mid \|\boldsymbol{z}\| \leq R\}$$

- X は半径 r の球体を含んでいる　　　(参照：前回の「体積補題」)

$$\exists\, \boldsymbol{x} \colon \{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n \mid \|\boldsymbol{z} - \boldsymbol{x}\| \leq r\} \subseteq X$$

- アルゴリズムは R と r を知っている



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

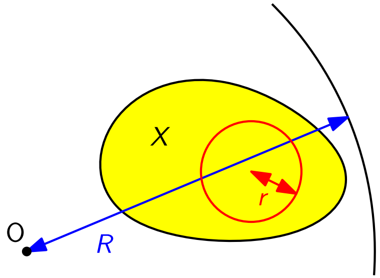
- X は原点中心，半径 R の球体に含まれている

$$X \subseteq \{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n \mid \|\boldsymbol{z}\| \leq R\}$$

- X は半径 r の球体を含んでいる　　　　(参照：前回の「体積補題」)

$$\exists\, \boldsymbol{x} \colon \{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n \mid \|\boldsymbol{z} - \boldsymbol{x}\| \leq r\} \subseteq X$$

- アルゴリズムは R と r を知っている



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 $\boldsymbol{p} \in X$

- 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

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 $\boldsymbol{x}$ が X に含まれていれば，$\boldsymbol{x}$ 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 $\boldsymbol{x}$ に対する分離超平面 H を 1 つ見つける
4. H が $\boldsymbol{x}$ 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

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

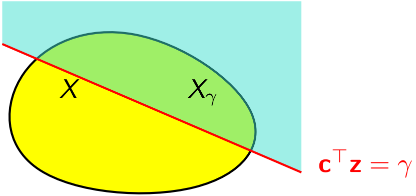
(1) どのように凸集合 X を入力するのか？ (済)

(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？

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
$$X_\gamma = X \cap \{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{c}^\top \mathbf{z} \le \gamma\}$$
- $X_\gamma \neq \emptyset \Leftrightarrow$ 最適値 $\le \gamma$
- X が前述の仮定を満たす $\Rightarrow -\|c\|R \le \gamma \le \|c\|R$ で γ を動かす
- $\therefore$ 二分探索の反復回数 $= O(\log \|c\|R)$

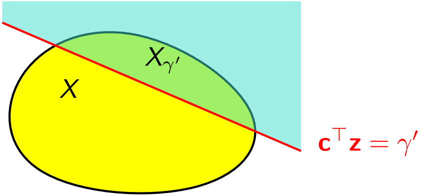


X_γ が空集合かどうか調べるために，許容性判定問題を使いたい

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？

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
$$X_\gamma = X \cap \{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{z} \leq \gamma\}$$
- $X_\gamma \neq \emptyset \Leftrightarrow$ 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 $= O(\log \|c\|R)$

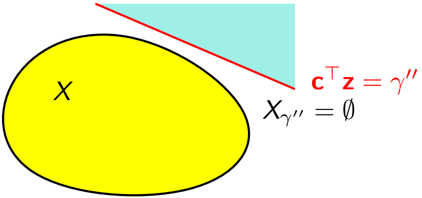


X_γ が空集合かどうか調べるために，許容性判定問題を使いたい

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？

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
$$X_\gamma = X \cap \{\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{z} \leq \gamma\}$$
- $X_\gamma \neq \emptyset \Leftrightarrow$ 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

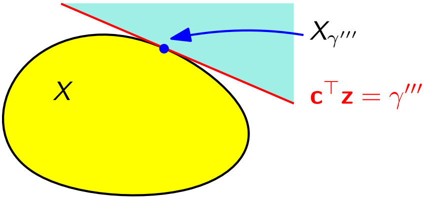
許容性判定問題を使って，凸計画問題 (最適化問題) を解くには？

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

$$X_\gamma = X \cap \{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{c}^\top \mathbf{z} \le \gamma\}$$

- $X_\gamma \neq \emptyset \Leftrightarrow$ 最適値 $\le \gamma$
- X が前述の仮定を満たす $\Rightarrow -\|c\|R \le \gamma \le \|c\|R$ 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_γ 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_γ の体積自体も小さいので，$X_\gamma \approx \emptyset$
- 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

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_γ 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_γ の体積自体も小さいので，$X_\gamma \approx \emptyset$
- 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

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
- $\mathrm{size}(\boldsymbol{c})$ ($\boldsymbol{c}$ 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

目次

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

$n \geq 1$：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

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

$n \geq 1$：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，

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

$n \geq 1$：自然数

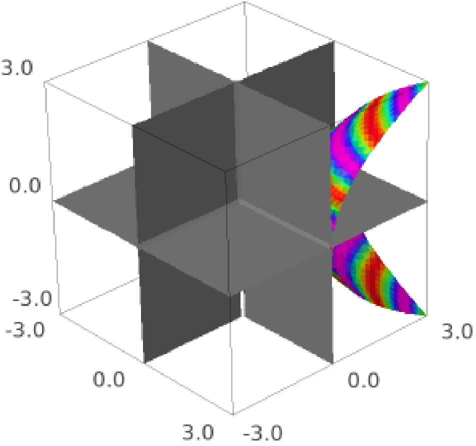
記法

- $\mathcal{S}^n \subseteq \mathbb{R}^{n \times n}$：$n$ 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：$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathcal{S}^2_+$，$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \notin \mathcal{S}^2_+$

半正定値行列全体の集合：例

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



$n \geq 1$：自然数

性質：半正定値行列全体の集合は凸集合

集合 $\mathcal{S}^n_+$ は凸集合

証明：$A, B \in \mathcal{S}^n_+$ とする

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

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

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

$\mathcal{S}^n_+$ に対する分離オラクルとは？

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

$$A \bullet X \geq b \quad \forall\, X \in \mathcal{S}^n_+, \qquad A \bullet V \leq b$$

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

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

構成法のアイディア

入力 V の最小固有値 $\lambda_{\min}$ 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，$\boldsymbol{x}^\top V \boldsymbol{x} < 0$ となる $\boldsymbol{x}$ 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 $3, -1$

構成法のアイディア (続き)

$\boldsymbol{x}$ 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，$\boldsymbol{x}^\top V \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^\top \lambda_{\min} \boldsymbol{x} = \lambda_{\min} \|\boldsymbol{x}\|^2 < 0$
- 一方，任意の半正定値行列 $X \in \mathcal{S}^n_+$ に対して $\boldsymbol{x}^\top X \boldsymbol{x} \geq 0$
- ここで，$\boldsymbol{x}^\top X \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\top) \bullet X$ なので，$A = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\top$, $b = 0$ 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

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

構成法のアイディア (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

目次

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

- 演習問題をやる
  - 相談推奨 (ひとりでやらない)
- 質問をする
  - 教員は巡回
- 退室時，小さな紙に感想など書いて提出する ← 重要
  - 内容は何でも OK
  - 匿名で OK

目次