半正定値基底を用いた錐最適化問題の近似について

成島　大悟

筑波大学大学院システム情報工学研究科社会工学専攻
指導教員：吉瀬章子　筑波大学　教授

1. はじめに

現在，錐最適化問題は様々な分野で応用されている．その一種である半正定値計画問題 (SDP) は，同じく錐最適化問題である線形計画問題 (LP) を一般化していることから，LP では定式化できない問題も求解可能となる．一方で，求解可能な行列のサイズや計算時間，ソルバー数では LP に劣る．また，同じ錐最適化問題に属する二重非負値計画問題 (DNN) は，組合せ最適化問題に対する凸緩和等において非常に有用であるが，その反面，SDP 以上に計算効率が悪く，非常に求解が困難な問題として知られている．

[1] の半正定値基底とは，階級 1 の半正定値行列からなる対称行列空間の基底であるが，[2] では，半正定値基底と似た集合を用いて，求解が困難な錐最適化問題を LP に外部近似し，上界を求める手法を提案し，計算機実験において性能を検証している．しかし，下界については考慮していない．本研究の目的は，求解が困難な錐最適化問題の上界については，[2] の改良手法を提案し，さらに下界についても求解手法を提案して，求解が困難な錐最適化問題のより精度の良い上界と下界を高速に求めることである．

2. 錐最適化問題

錐最適化問題とは，線形の制約と，変数行列 X が内部が非空で尖状 $(X, -X \in \mathcal{K} \Rightarrow X = 0)$ な閉凸錐 $\mathcal{K}$ に含まれるという制約の下で，線形の目的関数を最大化する問題であり，以下のように表される．

$$
\begin{aligned}
\text{(P)} \quad & \max \ \langle C, X\rangle \\
& \text{s.t.} \ \langle A_i, X\rangle = b_i \ (i = 1, \ldots, m) \\
& \quad\ X \in \mathcal{K}
\end{aligned}
$$

ただし，$C \in \mathcal{S}_n, A_i \in \mathcal{S}_n \ (i = 1, \ldots, m), b_i \in \mathbb{R} \ (i = 1, \ldots, m), \langle C, X\rangle = \mathrm{Tr}(C^{\mathrm{T}}X) = \sum_{i,j=1}^{n} C_{ij}X_{ij}$ とする．$\mathcal{S}_n$ は n 次対称行列の集合を表す．

(P) を主問題としたとき，主問題 (P) に対する双対問題 (D) は以下のように書ける．

$$
\begin{aligned}
\text{(D)} \quad & \min \ \sum_{i=1}^{m} b_i y_i \\
& \text{s.t.} \ \sum_{i=1}^{m} A_i y_i + Z = C \\
& \quad\ Z \in \mathcal{K}^*
\end{aligned}
$$

ここで，$\mathcal{K}^*$ は $\mathcal{K}$ に対する双対錐 $\mathcal{K}^* = \{X \in \mathcal{S}_n | \forall Y \in \mathcal{K}, \langle X, Y\rangle \geq 0\}$ である．

主問題 (P) において，$\mathcal{K} = \mathcal{S}_n^+ = \{X \in \mathcal{S}_n | \forall d \in \mathbb{R}^n, d^{\mathrm{T}}Xd \geq 0\}$ とすると，この問題は SDP となる．また，主問題 (P) において，$\mathcal{K} = \mathcal{S}_n^+ \cap \mathcal{N}_n = \{X \in \mathcal{S}_n | \forall d \in \mathbb{R}^n, d^{\mathrm{T}}Xd \geq 0, X \geq 0\}$ とすると，この問題は DNN となる．このとき，$\mathcal{S}_n^+ \cap \mathcal{N}_n$ の双対錐 $\mathcal{K}^*$ は $\mathcal{S}_n^+$ と $\mathcal{N}_n$ の Minkowski 和である [3]．本研究では，錐最適化問題の中で DNN を取り上げる．

3. DNN の上界の求解

初めに，[2] の，DNN の上界の求解手法について説明する．1 以上 k 個以下の非ゼロ要素を持ち，その値が 1 か -1 であるベクトル全体の集合を $\mathcal{U}_{n,k}$ と定義する．このとき，$U_{n,k}$ を $U_{n,k} = \{uu^{\mathrm{T}} | u \in \mathcal{U}_{n,k}\}$ と定義する．[2] では，$U_{n,2}$ が階級 1 の半正定値行列のみを持つ集合であることから，DNN の錐制約 $(X \in \mathcal{S}_n^+ \cap \mathcal{N}_n)$ を $X \in \mathcal{S}_n^+$ と $X \in \mathcal{N}_n$ に分け，$X \in \mathcal{S}_n^+$ について，任意の $uu^{\mathrm{T}} \in U_{n,2}$ における $\mathcal{S}_n^+$ の支持超平面で外部近似を考えると，DNN は以下のように表される．

$$
\begin{aligned}
(\mathrm{LP_{out}}) \quad & \max \ \langle C, X\rangle \\
& \text{s.t.} \ \langle A_i, X\rangle = b_i \ (i = 1, \ldots, m) \\
& \quad\ \langle u_i u_i^{\mathrm{T}}, X\rangle \geq 0 \ (\forall u_i u_i^{\mathrm{T}} \in U_{n,2}) \\
& \quad\ X \in \mathcal{N}_n
\end{aligned}
$$

上記の問題は LP であり，DNN の上界を与える．本研究では，上記の問題を $\mathrm{LP_{out}}$ と呼ぶ．$\mathrm{LP_{out}}$ を考えることにより，DNN を直接求解することなく上界を得ることができ，大幅な計算効率の向上が期待される．更に，[2] では，切除平面を用いてより精度の良い上界を得ることを試みている．以下ではその手法を説明する．

初めに，$\mathrm{LP_{out}}$ を求解し，得られた最適解を X^* と

する．X^* が半正定値行列の場合，元問題 (DNN) の実行可能領域内のため，X^* は元問題 (DNN) の最適解となる．よって，X^* が元問題の最適解ではない場合，負の固有値を持つので，X^* の最小固有値に対応する固有ベクトルを u^* として，u^* を用いた階級 1 行列 $u^*u^{*\mathrm{T}}$ を用いて新たな制約を追加し，以下の問題を求解する．

$$
\begin{aligned}
(\mathrm{LP_{out}}2) \quad & \max\ \langle C, X\rangle \\
& \text{s.t. } \langle A_i, X\rangle = b_i \ (i = 1, \ldots, m) \\
& \quad\ \ \langle u_i u_i^{\mathrm{T}}, X\rangle \geq 0 \ (\forall u_i u_i^{\mathrm{T}} \in U_{n,2}) \\
& \quad\ \ X \in \mathcal{N}_n \\
& \quad\ \ \langle u^* u^{*\mathrm{T}}, X\rangle \geq 0
\end{aligned}
$$

X^* の最小固有値は負より，$\langle u^*u^{*\mathrm{T}}, X^*\rangle = u^{*\mathrm{T}}X^*u^* < 0$ となる．よって，$\mathrm{LP_{out}}2$ の実行可能領域は必ず $\mathrm{LP_{out}}$ の実行可能領域より小さくなる．本手法を繰り返すことで，より精度の良い上界を得ることを試みている．

4. DNN の上界の求解手法の改良

[2] では切除平面を考える際，最小固有値に対応する固有ベクトルのみを用いて制約を追加していた．しかし，$\mathrm{LP_{out}}$ の最適解 X^* には負の固有値が複数存在する場合が多いため，本研究では，最小固有値以外の負の固有値に対応する固有ベクトルについても，制約に追加することを考える．以下ではその手法を説明する．

$\mathrm{LP_{out}}$ の最適解 X^* における，負の固有値の数を e とする．その中で，制約として追加する割合を $r \in (0, 1]$ とする．そして，各負の固有値について，固有値の小さいものから，対応する各固有ベクトルを u_i^* $(i = 1, \ldots, \lceil re\rceil)$ として，固有ベクトルを用いた階級 1 行列 $u_i^*u_i^{*\mathrm{T}}$ $(i = 1, \ldots, \lceil re\rceil)$ を用いて新たな制約を追加し，以下の問題を求解する．

$$
\begin{aligned}
(\mathrm{LP^r_{out}}2) \quad & \max\ \langle C, X\rangle \\
& \text{s.t. } \langle A_i, X\rangle = b_i \ (i = 1, \ldots, m) \\
& \quad\ \ \langle u_i u_i^{\mathrm{T}}, X\rangle \geq 0 \ (\forall u_i u_i^{\mathrm{T}} \in U_{n,2}) \\
& \quad\ \ X \in \mathcal{N}_n \\
& \quad\ \ \langle u_i^* u_i^{*\mathrm{T}}, X\rangle \geq 0 \ (i = 1, \ldots, \lceil re\rceil)
\end{aligned}
$$

固有ベクトル u_i^* $(i = 1, \ldots, \lceil re\rceil)$ の固有値の負性より $\langle u_i^*u_i^{*\mathrm{T}}, X^*\rangle < 0$ $(i = 1, \ldots, \lceil re\rceil)$ となる．よって，$\mathrm{LP^r_{out}}2$ の実行可能領域は必ず $\mathrm{LP^r_{out}}$ の実行可能領域より小さくなる．[2] の手法では，1 反復ごとに制約を 1 本加えているが，本手法を用いると，1 反復ごとに 1 本以上の実行可能領域を縮小させる制約を加えることが可能なため，計算効率の向上が期待される．

5. DNN の下界の求解

[2] では，DNN の上界のみ考慮している．本研究では，[2] の手法を応用して，DNN の下界の求解手法を提案する．

初めに，DNN の双対問題を考え，双対問題の $\sum_{i=1}^m A_i y_i + Z = C$ と錐制約 $(Z \in \mathcal{S}_n^+ + \mathcal{N}_n)$ を，$\sum_{i=1}^m A_i y_i + Z \leq C$ と $Z \in \mathcal{S}_n^+$ に等価に変形し，$Z \in \mathcal{S}_n^+$ について，任意の $uu^{\mathrm{T}} \in U_{n,2}$ における $\mathcal{S}_n^+$ の支持超平面で外部近似を考えると，以下のように表される．

$$
\begin{aligned}
(\mathrm{LP^*_{in}}) \quad & \min\ \sum_{i=1}^m b_i y_i \\
& \text{s.t. } \sum_{i=1}^m A_i y_i + Z \leq C \\
& \quad\ \ \langle u_i u_i^{\mathrm{T}}, Z\rangle \geq 0 \ (\forall u_i u_i^{\mathrm{T}} \in U_{n,2})
\end{aligned}
$$

上記の問題は LP であり，DNN の下界を与える．本研究では，上記の問題を $\mathrm{LP^*_{in}}$ と呼ぶ．また，下界の求解についても，3 章，4 章の切除平面を用いた手法を適用し，LP を繰り返し解き，より精度の良い下界を得ることを試みる．

6. 計算機実験

本実験では，ランダム生成した DNN と，ランダム生成した最大安定集合問題を用いて，各問題の上界と下界を求める．計算機実験に際し，上界に関しては，[2] の手法 $(\mathrm{LP_{out}})$ と提案手法 $(\mathrm{LP^r_{out}})$ を比較し，性能を評価した．下界に関しては，提案手法である $\mathrm{LP^*_{in}}$ の性能を評価した．なお，計算機は Intel(R) Core(TM) i7 950 CPU @3.07Ghz メモリ 12.0 GB を用いた．

計算機実験の結果，上界では，[2] に比べ良好な結果が得られ，さらに，下界においても精度の良い結果が得られた．

参考文献

[1] A. Tanaka and A. Yoshise, "LP-based tractable subcones of the semidefinite plus nonnegative cone," *Annals of Operations Research*, **265**, pp. 155–182, 2018.

[2] A. A. Ahmadi, S. Dash and G. Hall, "Optimization over structured subsets of positive semidefinite matrices via column generation," *Discrete Optimization*, **24**, pp. 129–51, 2017.

[3] A. Yoshise and Y. Matsukawa, "On optimiziation over the Doubly nonnegative cone," In *Proceedings of 2010 IEEE Multi-conference on Systems and Control*, pp. 13–19, 2010.