半正定値計画

— 多項式最適化問題への応用 —

“計算による数理科学の展開” （科研Ａ講演会）

神戸大学 理学部, ２００７年７月３１日

東京工業大学大学院情報理工学研究科

小島政和

目的

- 半正定値計画入門
- 多項式最適化問題に対する半正定値計画緩和

内容

第１部 半正定値計画問題 (SDP) の基礎 — ５０分

第２部 多項式最適化問題への応用 — １００分

参考文献

SDP — Semidefinite Program

第 1 部　半正定値計画問題 (SDP) の基礎

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

- LP (Linear Program) = 線形計画問題
- SDP (Semidefinite Program) = 半正定値計画問題

第２部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と２乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   5-1. 無制約多項式最適化の場合
   5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

- SOS — Sum of Squares

第 1 部 SDP の基礎

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

- LP (Linear Program) = 線形計画問題
- SDP (Semidefinite Program) = 半正定値計画問題

SDP(半正定値計画) は LP(線形計画) の対称行列空間への拡張

LP: min. $-X_{11} - 2X_{12} - 5X_{22}$

sub.to $2X_{11} + 3X_{12} + X_{22} = 7,\ X_{11} + X_{12} \geq 1,$

$X_{11} \geq 0,\ X_{12} \geq 0,\ X_{22} \geq 0.$

SDP: min. $-X_{11} - 2X_{12} - 5X_{22}$

sub.to $2X_{11} + 3X_{12} + X_{22} = 7,\ X_{11} + X_{12} \geq 1,$

$X_{11} \geq 0,\ X_{12} \geq 0,\ X_{22} \geq 0,$

$\begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{12} & X_{22} \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}$ (半正定値).

共通：

- X_{11}, X_{12}, X_{22} に関する線形目的関数.
- X_{11}, X_{12}, X_{22} に関する線形等式，線形不等式条件.
- 許容領域（制約を満たす X_{11}, X_{12}, X_{22} の集合）は凸集合.

SDP(半正定値計画) は LP(線形計画) の対称行列空間への拡張

LP: min. $-X_{11} - 2X_{12} - 5X_{22}$

sub.to $2X_{11} + 3X_{12} + X_{22} = 7,\ X_{11} + X_{12} \geq 1,$

$X_{11} \geq 0,\ X_{12} \geq 0,\ X_{22} \geq 0.$

SDP: min. $-X_{11} - 2X_{12} - 5X_{22}$

sub.to $2X_{11} + 3X_{12} + X_{22} = 7,\ X_{11} + X_{12} \geq 1,$

$X_{11} \geq 0,\ X_{12} \geq 0,\ X_{22} \geq 0,$

$$\begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{12} & X_{22} \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}$$ (半正定値).

拡張：

- SDP は半正定値制約条件 $\begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{12} & X_{22} \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}$ を含めることが出来る.
- SDP の許容領域は一般に多面体にはならない.

第１部　SDP の基礎 — ５０分

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

多彩な応用

- システムと制御 — 線形行列不等式 (LMI) [12]
- 組み合わせ最適化問題，非凸最適化問題の半正定値計画緩和
  - 最大カット問題 [22]
  - 0-1 整数計画問題 [47]
  - 多項式最適化問題 [41, 72]
- ロバスト最適化 [4]
- 量子化学 [20, 79]
- 確率過程 [8, 44]
- . . .

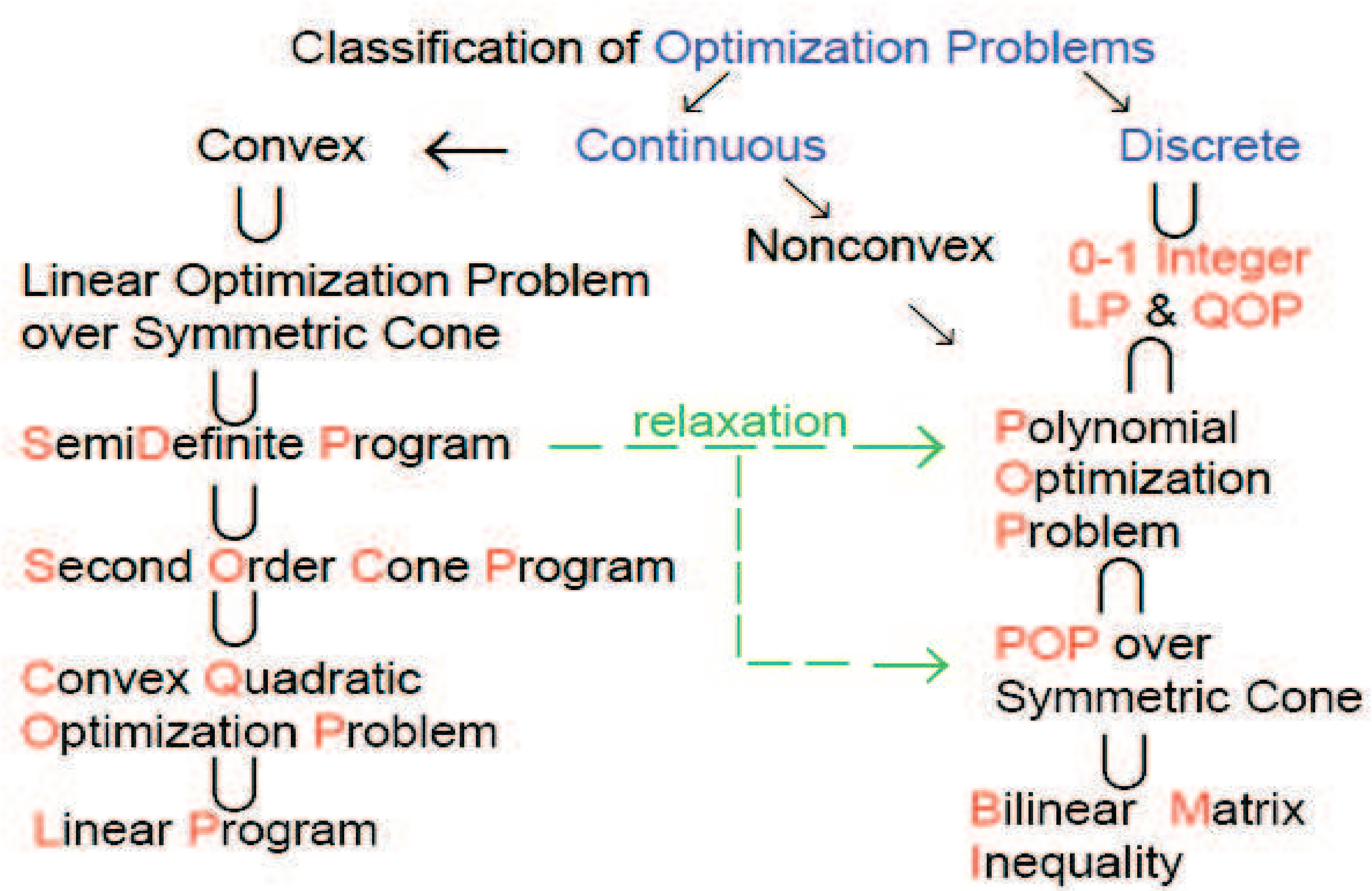
サーベイ論文 — Todd [66], Vandenberghe-Boyd [73]
ハンドブック— Wolkowicz-Saigal-Vandenberghe [74]
和文文献 — [80, 81, 82]
Tutorial Lecture — Kojima [34]

Web page — Helmberg [23], Wolkowicz [75]

理論

- Self-concordant 理論 [58]
- Euclid 的 Jordan 代数 [15]
- 線形計画問題に対する主双対内点法の拡張 [1, 25, 37, 51, 59]

SDP は凸計画問題の中核



第 1 部 SDP の基礎 — ５０分

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

$$
\begin{array}{lll}
\text{(LP)} & \text{min} & \boldsymbol{a}_0 \cdot \boldsymbol{x} \\
 & \text{sub.to} & \boldsymbol{a}_p \cdot \boldsymbol{x} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \mathbb{R}^n \ni \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}.
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{lll}
\boldsymbol{a}_p \in \mathbb{R}^n & : & \text{データ}, n \text{ 次元ベクトル } (p = 0, 1, 2 \ldots, m), \\
b_p \in \mathbb{R} & : & \text{データ, 実数 } (p = 1, 2 \ldots, m), \\
\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n & : & \text{変数}, n \text{ 次元ベクトル}, \\
\boldsymbol{a}_p \cdot \boldsymbol{x} & = & \sum_{i=1}^{n} [\boldsymbol{a}_p]_i x_i \ \text{(内積)}.
\end{array}
$$

(LP)	min	$\boldsymbol{a}_0 \cdot \boldsymbol{x}$
	sub.to	$\boldsymbol{a}_p \cdot \boldsymbol{x} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \mathbb{R}^n \ni \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}$.

(SDP)	min	$\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$
	sub.to	$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \mathbb{S}^n \ni \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}$.

$\mathbb{S}^n$	:	$n \times n$ 対称行列からなる線形空間,
$\boldsymbol{A}_p \in \mathbb{S}^n$	:	データ, $n \times n$ 対称行列 $(p = 0, 1, 2 \ldots, m)$,
$b_p \in \mathbb{R}$	:	データ, 実数 $(p = 1, 2 \ldots, m)$,
$\boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^n$	:	$n \times n$ 変数, $n \times n$ 対称行列;
		$\boldsymbol{X} = (X_{ij}) \in \mathbb{S}^n$,
		$X_{ij} = X_{ji} \in \mathbb{R} \ (1 \leq i \leq j \leq n)$,
$\boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}$	$\Leftrightarrow$	$\boldsymbol{X} \in \mathcal{S}^n$ は半正定値,
$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X}$	$=$	$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n [\boldsymbol{A}_p]_{ij} X_{ij}$ ($\boldsymbol{A}_p$ と $\boldsymbol{X}$ の内積).

$$\text{(LP)} \quad \min \quad \boldsymbol{a}_0 \cdot \boldsymbol{x}$$
$$\text{sub.to} \quad \boldsymbol{a}_p \cdot \boldsymbol{x} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \mathbb{R}^n \ni \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}.$$

$$\text{(SDP)} \quad \min \quad \boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$$
$$\text{sub.to} \quad \boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \mathbb{S}^n \ni \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}.$$

$$\Uparrow \quad \left\{ \begin{array}{l} m = 2, \ n = 2, \ b_1 = 7, \ b_2 = 9, \ X_{12} = X_{21}, \\ \boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{A}_0 = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & -5 \end{pmatrix}, \\ \boldsymbol{A}_1 = \begin{pmatrix} 2 & 1.5 \\ 1.5 & 1 \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{A}_2 = \begin{pmatrix} 2 & 0.5 \\ 0.5 & 3 \end{pmatrix}. \end{array} \right.$$

$$\min \quad -X_{11} - 2X_{12} - 5X_{22}$$
$$\text{sub.to} \quad 2X_{11} + 3X_{12} + X_{22} = 7, \ 2X_{11} + X_{12} + 3X_{22} = 9,$$
$$\begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{12} & X_{22} \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}.$$

第 1 部 SDP の基礎

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

(SDP)	min	$\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$
	sub.to	$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \mathbb{S}^n \ni \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}.$

$\mathbb{S}^n \ni \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}$: semidefinite constraint.

- 定義: $\boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}$ if
  $\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{u} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n X_{ij} u_i u_j \geq 0$ for $\forall \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^n$.
- 定義: $\boldsymbol{X} \succ \boldsymbol{O}$ if $\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{u} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n X_{ij} u_i u_j > 0$ for $\forall \boldsymbol{u} \neq \mathbf{0}$.
- $\boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}$ ($\succ \boldsymbol{O}$) $\Leftrightarrow n$ 個の固有値がすべて非負 (正).

$$
\begin{array}{lll}
\text{(SDP)} & \min & \boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X} \\
 & \text{sub.to} & \boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \mathbb{S}^n \ni \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}.
\end{array}
$$

$\mathbb{S}^n$: $n(n+1)/2$ 次元線形空間.

- $\boldsymbol{X} + \boldsymbol{Y} \in \mathbb{S}^n$ for $\forall \boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^n$, $\forall \boldsymbol{Y} \in \mathbb{S}^n$.
- $\alpha \boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^n$ for $\forall \alpha \in \mathbb{R}$, $\forall \boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^n$.
- 線形独立性.
- $n(n+1)/2$ 個基底.

$$
\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \ : \ \mathbb{S}^2 \text{ の基底}.
$$

- $\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^n$ の内積： $\boldsymbol{A} \bullet \boldsymbol{X} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} A_{ij} X_{ij} = \text{trace } \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}.$

(SDP) min $\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$

sub.to $\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \mathbb{S}^n \ni \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}$.

$\mathbb{R}^n_+ \equiv \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}\}$ と $\mathbb{S}^n_+ \equiv \{\boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^n : \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}\}$ 共通点.

- $\mathbb{R}^n_+$ は閉凸錐
- 自己双対; $(\mathbb{R}^n_+)^* \equiv \left\{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n : \boldsymbol{y} \bullet \boldsymbol{x} \geq 0, \ \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n_+\right\} = \mathbb{R}^n_+$.
- $\boldsymbol{x}, \ \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n_+, \ \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y} = 0 \Longrightarrow x_i y_i = 0 \ (i = 1, \ldots, n)$.

- $\mathbb{S}^n_+$ は閉凸錐
- 自己双対; $(\mathbb{S}^n_+)^* \equiv \left\{\boldsymbol{Y} \in \mathbb{S}^n : \boldsymbol{Y} \bullet \boldsymbol{X} \geq 0, \forall \boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^n_+\right\} = \mathbb{S}^n_+$.
- $\boldsymbol{X}, \ \boldsymbol{Y} \in \mathbb{S}^n_+, \ \boldsymbol{X} \bullet \boldsymbol{Y} = 0 \Longrightarrow \boldsymbol{X}\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{O}$.

$\mathbb{R}^n_+, \mathbb{S}^n_+$ は対称錐の特殊な場合 $\Rightarrow$ 対称錐上の線形計画問題 [15] .

第 1 部 SDP の基礎

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

等式標準形 min $\quad \boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$

(SDP) sub.to $\quad \boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \ \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}.$

$$\Uparrow$$

複数の行列変数をもった等式標準形：

(SDP)' min $\quad \sum_{q=1}^{t} \boldsymbol{A}_0^q \bullet \boldsymbol{X}^q$

sub.to $\quad \sum_{q=1}^{t} \boldsymbol{A}_p^q \bullet \boldsymbol{X}^q = b_p \ (p = 1, \ldots, m),$

$\mathbb{S}^{n^q} \ni \boldsymbol{X}^q \succeq \boldsymbol{O} \ (q = 1, \ldots, t).$

$$\boldsymbol{A}_p \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_p^1 & \boldsymbol{O} & \cdots & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_p^2 & \cdots & \boldsymbol{O} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \cdots & \boldsymbol{A}_p^t \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{X} \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}^1 & \boldsymbol{O} & \cdots & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{X}^2 & \cdots & \boldsymbol{O} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \cdots & \boldsymbol{X}^t \end{pmatrix}.$$

等式標準形 (SDP)

$$\begin{array}{lll} \text{min} & \boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X} \\ \text{sub.to} & \boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}. \end{array}$$

$\Uparrow$

複数の行列変数をもった等式標準形：

(SDP)'

$$\begin{array}{ll} \text{min} & \sum_{q=1}^{t} \boldsymbol{A}_0^q \bullet \boldsymbol{X}^q \\ \text{sub.to} & \sum_{q=1}^{t} \boldsymbol{A}_p^q \bullet \boldsymbol{X}^q = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \\ & \mathbb{S}^{n^q} \ni \boldsymbol{X}^q \succeq \boldsymbol{O} \ (q = 1, \ldots, t). \end{array}$$

- $n^q = 1 \ (q = 1, \ldots, t) \Rightarrow$, (SDP)' は LP の等式標準形．ここで，$\boldsymbol{A}_p^q \in \mathbb{R}$, $X^q \in \mathbb{R}$.
- <u>一般の SDP</u> は等式標準形 (SDP) に帰着出来るか?

等式標準形 min $\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$

(SDP) sub.to $\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}.$

$$\Uparrow \quad ?$$

システムと制御からの例

$$\begin{array}{ll} \text{min} & \lambda \\ \text{sub.to} & \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{X} + \boldsymbol{C}^T\boldsymbol{C} & \boldsymbol{X}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{C}^T\boldsymbol{D} \\ \boldsymbol{B}^T\boldsymbol{X} + \boldsymbol{D}^T\boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}^T\boldsymbol{D} - \boldsymbol{I} \end{pmatrix} \preceq \lambda \boldsymbol{I}, \\ & \boldsymbol{X} \succeq -\lambda \boldsymbol{I}. \end{array}$$

ただし，$\boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^n$ and $\lambda \in \mathbb{R}$ は変数, $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{C}$, $\boldsymbol{D}$ はデータ行列.

$$\boldsymbol{U} \succeq \boldsymbol{V} \ \text{ or } \boldsymbol{V} \preceq \boldsymbol{U} \iff \boldsymbol{U} - \boldsymbol{V} \succeq \boldsymbol{O}$$

等式標準形	min	$\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$
(SDP)	sub.to	$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}.$

- 一般に，任意の SDP を等式標準形 (SDP) に帰着出来るか?
- 理論的には “Yes”. しかし，非実用的，困難.
- むしろ， 等式条件付き LMI (Linear Matrix Inequality) 標準形に変換するほうが容易で，かつ，実用的な場合が多い.

一般の SDP

min	$x_1, \ldots, x_k$, $\boldsymbol{X}^q$ $(q = 1, \ldots, t)$ の線形関数
sub.to	$x_1, \ldots, x_k$, $\boldsymbol{X}^q$ $(q = 1, \ldots, t)$ の線形等式,
	$x_1, \ldots, x_k$, $\boldsymbol{X}^q$ $(q = 1, \ldots, t)$ の線形（行列）不等式,
	$x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{R}$ (実変数),
	$\mathbb{S}^{n^q} \ni \boldsymbol{X}^q \succeq \boldsymbol{O}$ $(q = 1, \ldots, t)$ (半正定値行列変数).

等式条件付き LMI (Linear Matrix Inequality) 標準形への変換

各 $\boldsymbol{X}^q \in \mathbb{S}^{n^q}$ を $\mathbb{S}^{n^q}$ の基底 $\boldsymbol{E}^q_{ij}$ $(1 \leq i \leq j \leq n^q)$ を用いて

$$\boldsymbol{X}^q = \sum_{1 \leq i \leq j \leq n^q} \boldsymbol{E}^q_{ij} y^q_{ij},$$

と表現し，一般の SDP に代入する．ただし y^q_{ij} : 実変数, $\boldsymbol{E}^q_{ij}$: (i, j), (j, i) 要素のみが 1 でその他の要素が 0 の $n^q \times n^q$ 行列.

一般の SDP

min	$x_1, \ldots, x_k$, $\boldsymbol{X}^q$ $(q = 1, \ldots, t)$ の線形関数
sub.to	$x_1, \ldots, x_k$, $\boldsymbol{X}^q$ $(q = 1, \ldots, t)$ の線形等式,
	$x_1, \ldots, x_k$, $\boldsymbol{X}^q$ $(q = 1, \ldots, t)$ の線形（行列）不等式,
	$x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{R}$ (実変数),
	$\mathbb{S}^{n^q} \ni \boldsymbol{X}^q \succeq \boldsymbol{O}$ $(q = 1, \ldots, t)$ (半正定値行列変数).

等式条件付き LMI (Linear Matrix Inequality) 標準形

minimize	$y_1, \ldots, y_\ell$ の線形関数
subject to	$y_1, \ldots, y_\ell$ の線形等式,
	$y_1, \ldots, y_\ell$ の線形 (行列) 不等式,
	$y_1, \ldots, y_\ell \in \mathbb{R}$ (実変数).

- 双対をとると $\Rightarrow$ 自由変数をもった等式標準形.
- CSDP, PENON, SDPA, SDPT3, SeDuMi を適用可能.

第 1 部 SDP の基礎

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

対称行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値

$$\begin{aligned}
\text{最大固有値} &= \min\{\lambda : \lambda \boldsymbol{I} \succeq \boldsymbol{A}\} \\
&= \min\{\lambda : \lambda \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A} \succeq \boldsymbol{O}\}. \\
\text{最小固有値} &= \max\{\lambda : \boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I} \succeq \boldsymbol{O}\}.
\end{aligned}$$

- 対称行列の固有値を含んだ問題を SDP として定式化.
- Linear Matrix inequality (LMI) $\boldsymbol{A}(\cdot) \succeq \boldsymbol{O}$

$$\max \lambda \text{ sub.to } \boldsymbol{A}(\cdot) - \lambda \boldsymbol{I} \succeq \boldsymbol{O}.$$

ただし, $\boldsymbol{A}(\cdot)$ は行列, ベクトル変数の線形写像. 例えば

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{X}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{X} + \boldsymbol{C}^T\boldsymbol{C} & \boldsymbol{X}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{C}^T\boldsymbol{D} \\ \boldsymbol{B}^T\boldsymbol{X} + \boldsymbol{D}^T\boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}^T\boldsymbol{D} - \boldsymbol{I} \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}.$$

[12] S. Boyd, L. El Ghaui, E. Feron and V. Balakrishnan, Linear Matrix Inequalities in System and Control Theory, SIAM, Philadelphia, 1994.

Schur complement

$$\boldsymbol{A} \in \mathbb{S}^k,\ \text{正定値},\quad \boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{k\times\ell},\ \boldsymbol{Y} \in \mathbb{S}^\ell.$$

$\Rightarrow$

$$\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O} \iff \begin{pmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{X} \\ \boldsymbol{X}^T & \boldsymbol{Y} \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}.$$

$\boldsymbol{X}$ に関して２次　　　　$\boldsymbol{X}$ に関して線形

- $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$, $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^k$, $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}$ のとき,

$$\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} \geq 0 \iff \begin{pmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{x}^T & \boldsymbol{y} \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}.$$

分数凸計画問題

$$\min \frac{(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c)^T(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c)}{\boldsymbol{d}^T\boldsymbol{x}} \text{ sub.to } \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b}.$$

$\boldsymbol{L}, \ \boldsymbol{A}$: 行列, $\ c$: 実数, $\boldsymbol{d}, \ \boldsymbol{b}$: 列ベクトル, $\boldsymbol{d}^T\boldsymbol{x} > 0$ if $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b}$.

$$\Updownarrow$$

$$\min \zeta \text{ sub.to } \zeta \geq \frac{(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c)^T(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c)}{\boldsymbol{d}^T\boldsymbol{x}}, \ \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b}.$$

$$\Updownarrow \ \zeta - \frac{(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c)^T(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c)}{\boldsymbol{d}^T\boldsymbol{x}} \geq 0 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} (\boldsymbol{d}^T\boldsymbol{x})\boldsymbol{I} & \boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c \\ (\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c)^T & \zeta \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}.$$

$$\text{SDP: min. } \zeta \text{ sub.to } \begin{pmatrix} \boldsymbol{d}^T\boldsymbol{x}\boldsymbol{I} & \boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c \\ (\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}-c)^T & \zeta\boldsymbol{x} \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}, \ \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b}.$$

$\Rightarrow$ SOCP (Second-order cone program)

第 1 部 SDP の基礎

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

LP の主問題，双対問題

P	min	$\boldsymbol{a}_0 \cdot \boldsymbol{x}$	s.t	$\boldsymbol{a}_p \cdot \boldsymbol{x} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}$.
D	max	$\sum_{p=1}^m b_p y_p$	s.t	$\sum_{p=1}^m \boldsymbol{a}_p y_p + \boldsymbol{s} = \boldsymbol{a}_0, \ \boldsymbol{s} \geq \mathbf{0}$.

SDP の主問題，双対問題

P	min	$\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$	s.t	$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}$.
D	max	$\sum_{p=1}^m b_p y_p$	s.t	$\sum_{p=1}^m \boldsymbol{A}_p y_p + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_0, \ \boldsymbol{S} \succeq \boldsymbol{O}$.

弱双対性

LP ： $\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{s} = \boldsymbol{a}_0 \cdot \boldsymbol{x} - \sum_{j=1}^m b_p y_p \geq 0$ for $\forall$ feasible $\boldsymbol{x}, \ \boldsymbol{y}, \ s$.

SDP ： $\boldsymbol{X} \bullet \boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X} - \displaystyle\sum_{j=1}^m b_p y_p \geq 0$ for $\forall$ feasible $\boldsymbol{X}, \ \boldsymbol{y}, \ \boldsymbol{S}$.

$$
\begin{aligned}
0 \leq \boldsymbol{X} \bullet \boldsymbol{S} &= \boldsymbol{S} \bullet \boldsymbol{X} = \left(\boldsymbol{A}_0 - \sum_{p=1}^m \boldsymbol{A}_p y_p \right) \bullet \boldsymbol{X} \\
&= \boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X} - \sum_{p=1}^m (\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X}) y_p \\
&= \boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X} - \sum_{j=1}^m b_p y_p.
\end{aligned}
$$

LP の主問題，双対問題

P	min	$\boldsymbol{a}_0 \cdot \boldsymbol{x}$	s.t	$\boldsymbol{a}_p \cdot \boldsymbol{x} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}.$
D	max	$\sum_{p=1}^m b_p y_p$	s.t	$\sum_{p=1}^m \boldsymbol{a}_p y_p + \boldsymbol{s} = \boldsymbol{a}_0, \ \boldsymbol{s} \geq \mathbf{0}.$

SDP の主問題，双対問題

P	min	$\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$	s.t	$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}.$
D	max	$\sum_{p=1}^m b_p y_p$	s.t	$\sum_{p=1}^m \boldsymbol{A}_p y_p + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_0, \ \boldsymbol{S} \succeq \boldsymbol{O}.$

強双対性　$\exists$ feasible $(\boldsymbol{x}, \ \boldsymbol{y}, \boldsymbol{s})$ $(\boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}, \ \boldsymbol{s} \geq \mathbf{0}) \Rightarrow$

LP ： $\bar{\boldsymbol{x}} \cdot \bar{\boldsymbol{s}} = \boldsymbol{a}_0 \cdot \boldsymbol{x} - \sum_{j=1}^m b_p \bar{y}_p = 0$ at $\forall$ optimal $(\bar{\boldsymbol{x}}, \ \bar{\boldsymbol{y}}, \ \bar{s})$.

$\exists$ interior feasible $(\boldsymbol{X}, \ \boldsymbol{y}, \ \boldsymbol{S})$ $(\boldsymbol{X} \succ \boldsymbol{O}, \ \boldsymbol{S} \succ \boldsymbol{O}) \Rightarrow$

SDP ： $$\bar{\boldsymbol{X}} \bullet \bar{\boldsymbol{S}} = \boldsymbol{A}_0 \bullet \bar{\boldsymbol{X}} - \sum_{j=1}^m b_p \bar{y}_p = 0$$ at $\forall$ optimal $(\bar{\boldsymbol{X}}, \ \bar{\boldsymbol{y}}, \ \bar{\boldsymbol{S}})$.

- 強双対性のためには，
  "$\exists$ interior feasible $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{S})$" が必要! $\Rightarrow$ 例 — [73]

自由変数をもった等式標準形とその双対問題

自由変数をもった等式標準形

$$
\begin{array}{lll}
\text{P} & \min & \boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X} + \boldsymbol{d}_0^T \boldsymbol{z} \\
& \text{sub.to} & \boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} + \boldsymbol{d}_p^T \boldsymbol{z} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \\
& & \mathbb{S}^n \ni \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}, \ \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^\ell \ (\text{自由変数}).
\end{array}
$$

ただし，$\boldsymbol{d}_p \in \mathbb{R}^\ell \ (p = 0, 1, \ldots, m)$.

$\Updownarrow$ 双対

等式条件付き LMI 標準形

$$
\begin{array}{lll}
\text{D} & \max & \displaystyle\sum_{p=1}^{m} b_p y_p \\
& \text{sub.to} & \boldsymbol{A}_0 - \displaystyle\sum_{p=1}^{m} \boldsymbol{A}_p y_p \succeq \boldsymbol{O}, \ \displaystyle\sum_{p=1}^{m} \boldsymbol{d}_p y_p = \boldsymbol{d}_0.
\end{array}
$$

第 1 部 SDP の基礎

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

既存の数値解法 — NEOS Solver [57]

- 内点法
  - 主双対スケーリング, CSDP(Borchers [10]), SDPA(Fujisawa et al. [17, 18, 76]), SDPT3(Toh-Todd-Tutuncu [69]), SeDuMi(Sturm [64])
  - 双対スケーリング, DSDP(Benson-Ye-Zhang [3])
- 非線形最適化に基づく方法
  - Spectral bundle method(Helmberg-Rendl [24])
  - Gradient-based log-barrier method(Burer-Monteiro [13])
  - PENON(Kocvara [32]) — Generalized augmented Lagrangian
  - Saddle point mirror-prox algorithm (Lu-Nemirovski-Monteiro [48])

- 中規模までの SDP (e.g. $n,\ m \leq 5000$), 高精度
- 大規模 SDP (e.g., $n,\ m \geq 10,000$), 低精度

既存の数値解法 — NEOS Solver [57]

- 内点法
  - 主双対スケーリング, CSDP(Borchers [10]), SDPA(Fujisawa et al. [17, 18, 76]), SDPT3(Toh-Todd-Tutuncu [69]), SeDuMi(Sturm [64])
  - 双対スケーリング, DSDP(Benson-Ye-Zhang [3])
- 非線形最適化に基づく方法
  - Spectral bundle method(Helmberg-Rendl [24])
  - Gradient-based log-barrier method(Burer-Monteiro [13])
  - PENON(Kocvara [32]) — Generalized augmented Lagrangian
  - Saddle point mirror-prox algorithm (Lu-Nemirovski-Monteiro [48])

- 並列化:

SDPA $\Rightarrow$ SDPARA (Y-F-K [77]), SDPARA-C (N-Y-F-K [55]
DSDP $\Rightarrow$ PDSDP (Benson [2])
CSDP $\Rightarrow$ Borchers-Young [11]

Spectral bundle method $\Rightarrow$ Nayakkankuppam [56]

既存の数値解法 — NEOS Solver [57]

- 内点法
  - 主双対スケーリング, CSDP(Borchers [10]), SDPA(Fujisawa et al. [17, 18, 76]), SDPT3(Toh-Todd-Tutuncu [69]), SeDuMi(Sturm [64])
  - 双対スケーリング, DSDP(Benson-Ye-Zhang [3])
- 非線形最適化に基づく方法
  - Spectral bundle method(Helmberg-Rendl [24])
  - Gradient-based log-barrier method(Burer-Monteiro [13])
  - PENON(Kocvara [32]) — Generalized augmented Lagrangian
  - Saddle point mirror-prox algorithm (Lu-Nemirovski-Monteiro [48])
- Online Solver
  - NEOS Solver — CSDP, SDPA, SDPT3, DSDP, PENON, SeDuMi
  - SDPA Online [18] — SDPA
    その並列版 SDPARA, SDPARA-C

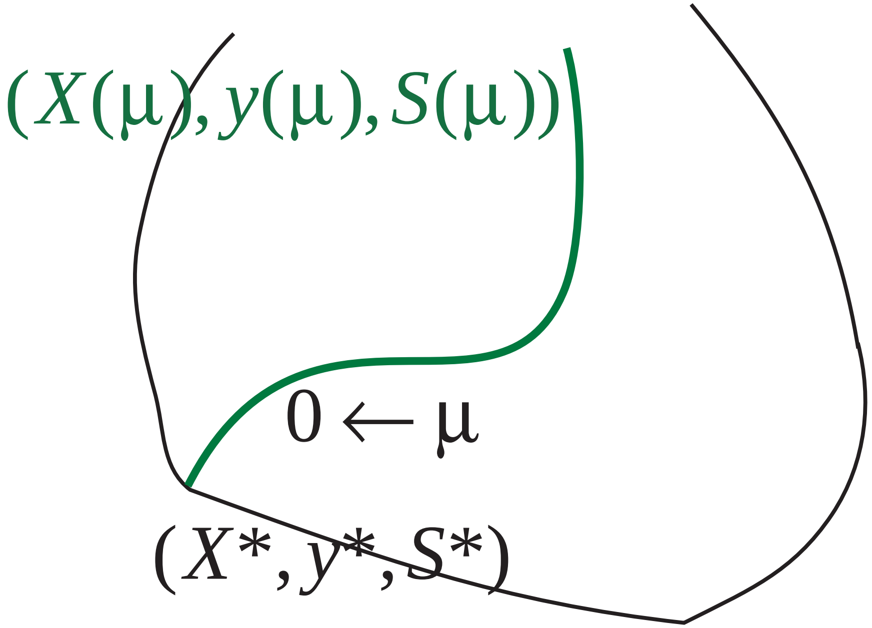
第 1 部 SDP の基礎

1. LP vs SDP
2. SDP の魅力
3. 等式標準形
4. 半正定値行列および対称行列の内積
5. 一般の SDP
6. SDP の例
7. 双対定理
8. SDP に対する数値解法，ソフトウェア
9. 主双対内点法の基本的な考え方

基本的な考え方線形計画問題に対する主双対内点法と同じ

$$\begin{array}{llll} \text{P} & \min & \boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X} & \text{s.t.} \quad \boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (\forall p), \ \boldsymbol{X} \in \mathcal{S}^n_+. \\ \text{D} & \max & \sum_{p=1}^m b_p y_p & \text{s.t.} \quad \sum_{p=1}^m \boldsymbol{A}_p y_p + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_0, \ \boldsymbol{S} \in \mathcal{S}^n_+. \end{array}$$

中心パス を追跡 $\rightarrow$ an opt. sol. in the primal-dual space.



- 中心パスの定義？

中心パスの追跡法 — 参考文献 [82]

P	min	$\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$	s.t.	$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (\forall p), \ \boldsymbol{X} \in \mathcal{S}^n_+$.
D	max	$\sum_{p=1}^m b_p y_p$	s.t.	$\sum_{p=1}^m \boldsymbol{A}_p y_p + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_0, \ \boldsymbol{S} \in \mathcal{S}^n_+$.

対数 barrier 付き主双対 SDP, $\mu > 0$.

P(μ)	min	$\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X} - \mu \log\det \boldsymbol{X}$
	s.t.	$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \boldsymbol{X} \succ \boldsymbol{O}$.
D(μ)	max	$\sum_{p=1}^m b_p y_p + \mu \log\det \boldsymbol{S}$
	s.t.	$\sum_{p=1}^m \boldsymbol{A}_p y_p + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_0, \ \boldsymbol{S} \succ \boldsymbol{O}$.

- $-\log\det \boldsymbol{X}$: 境界に近づかないための対数 barrier 項

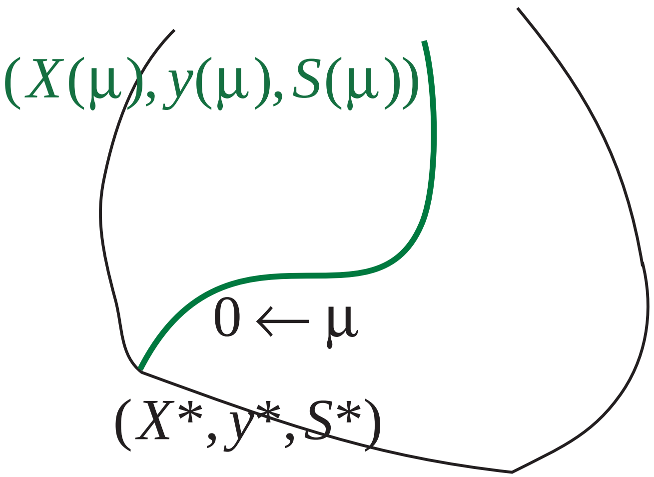
$\boldsymbol{X} \in$ the interior of $\mathcal{S}^n_+ \equiv \{\boldsymbol{X} \in \mathbb{S}^n : \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O}\} \Leftrightarrow$ det $\boldsymbol{X} > 0$.
$\boldsymbol{X} \in$ the boundary of $\mathcal{S}^n_+$ $\Leftrightarrow$ det $\boldsymbol{X}$ = 0.

P	min	$\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X}$	s.t.	$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (\forall p), \ \boldsymbol{X} \in \mathcal{S}^n_+.$
D	max	$\sum_{p=1}^m b_p y_p$	s.t.	$\sum_{p=1}^m \boldsymbol{A}_p y_p + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_0, \ \boldsymbol{S} \in \mathcal{S}^n_+.$

対数 barrier 付き主双対 SDP, $\mu > 0$.

P(μ)	min	$\boldsymbol{A}_0 \bullet \boldsymbol{X} - \mu \log\det \boldsymbol{X}$
	s.t.	$\boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (p = 1, \ldots, m), \ \boldsymbol{X} \succ \boldsymbol{O}.$
D(μ)	max	$\sum_{p=1}^m b_p y_p + \mu \log\det \boldsymbol{S}$
	s.t.	$\sum_{p=1}^m \boldsymbol{A}_p y_p + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_0, \ \boldsymbol{S} \succ \boldsymbol{O}.$

$$C = \{(\boldsymbol{X}(\mu), y(\mu), \boldsymbol{S}(\mu)) : \mu > 0\}$$: 中心パス



$$(X(\mu), y(\mu), S(\mu)) \in C$$
$$\Updownarrow$$
$$\begin{cases} \boldsymbol{A}_p \bullet \boldsymbol{X} = b_p \ (\forall p), \ \boldsymbol{X} \succ 0, \\ \sum_{p=1}^m \boldsymbol{A}_p y_p + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_0, \ \boldsymbol{S} \succ 0, \\ \boldsymbol{X}\boldsymbol{S} = \mu \boldsymbol{I}. \end{cases}$$

第 2 部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題 (POP)
2. 非負多項式と 2 乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
   - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

- SOS — Sum of Squares

POP: min $f_0(\boldsymbol{x})$ sub.to $f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0 \ (j = 1, \ldots, m)$.

$\mathbb{R}^n$: n-次元 Euclid 空間，n-次元ベクトルの空間.

$\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$: ベクトル変数.

$f_j(\boldsymbol{x})$: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に関する n 変数多項式 $(j = 0, 1, \ldots, m)$.

例. $n = 3$

$$
\begin{array}{ll}
\text{min} & f_0(\boldsymbol{x}) \equiv x_1^3 - 2x_1x_2^2 + x_1^2x_2x_3 - 4x_3^2 \\
\text{sub.to} & f_1(\boldsymbol{x}) \equiv -x_1^2 + 5x_2x_3 + 1 \geq 0, \\
 & f_2(\boldsymbol{x}) \equiv x_1^2 - 3x_1x_2x_3 + 2x_3 + 2 \geq 0, \\
 & f_3(\boldsymbol{x}) \equiv -x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 + 1 \geq 0, \\
 & x_1(x_1 - 1) = 0 \ \text{(0-1 整数条件)}, \\
 & x_2 \geq 0, \ x_3 \geq 0, \ x_2x_3 = 0 \ \text{(相補性条件)}.
\end{array}
$$

- 多項式最適化問題の記述力は高い.
- 非線形最適化+組合せ最適化での大域的最適化の数理モデル.

POP: min $f_0(\boldsymbol{x})$ sub.to $f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0 \ (j = 1, \ldots, m)$.

SDP 緩和 (＝多項式 2 乗緩和) に対する 2 種類の approach

Primal approach		Dual approach
POP	$\Rightarrow$	一般化 Lagrange 双対問題
$\Updownarrow$ 自明な不等式の追加	双対	$\Downarrow$
Polynomial SDP		$\Downarrow$ SOS 緩和
$\Downarrow$ 線形化	双対	$\Downarrow$
SDP(緩和) [41, 27]	$\Leftrightarrow$	SDP(緩和) [60, 61, 41]

- [41] J.B.Lasserre, *SIAM J. on Optimization*, **11** (2001) 796–817. [27] GloptiPoly.
- [60] P.A.Parrilo, *Math. Prog.*, **96** (2003) 293–320. [61] SOSTOOLS.
- 解説 — [83] 小島, システム／制御／情報 48 (2004) 477-482. [71] SparsePOP.

POP: min $f_0(\boldsymbol{x})$ sub.to $f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0 \ (j = 1, \ldots, m)$.

SDP 緩和 (＝多項式 2 乗緩和) に対する 2 種類の approach

Primal approach　　　　Dual approach

POP　$\Rightarrow$　一般化 Lagrange 双対問題

$\Updownarrow$ 自明な不等式の追加　双対　$\Downarrow$

Polynomial SDP　　$\Downarrow$ SOS 緩和

$\Downarrow$ 線形化　双対　$\Downarrow$

SDP(緩和) [41, 27]　$\Leftrightarrow$　SDP(緩和) [60, 61, 41]

- 主双対内点法を用いると，SDP, SDP を同時に解く．
- 近似最適解は SDP から得られる．

$\boxed{\text{POP: min } f_0(\boldsymbol{x}) \text{ sub.to } f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0 \ (j = 1, \ldots, m).}$

SDP 緩和 (＝多項式 2 乗緩和) に対する 2 種類の approach

Primal approach		Dual approach
POP	$\Rightarrow$	一般化 Lagrange 双対問題
$\Updownarrow$ 自明な不等式の追加	双対	$\Downarrow$
Polynomial SDP		$\Downarrow$ SOS 緩和
$\Downarrow$ 線形化	双対	$\Downarrow$
SDP(緩和) [41, 27]	$\Leftrightarrow$	SDP(緩和) [60, 61, 41]

- 制約付き POP では，SDP の列，$\{\text{SDP}^r\}$ を生成．各 SDP^r は POP の目的関数値の下界 ζ^r と近似最小解 $\boldsymbol{x}^r$ を生成する．
- 理論的には，比較的緩い条件の下で，$\zeta^r \to$ POP の最適値，$\boldsymbol{x}^r \to$ POP の最適解.
- SDP^r のサイズは急激に増大，発散する $\Rightarrow$ 実用上の困難.

POP: min $f_0(\boldsymbol{x})$ sub.to $f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0 \ (j = 1, \ldots, m)$.

SDP 緩和 (＝多項式 2 乗緩和) に対する 2 種類の approach

Primal approach		Dual approach
POP	$\Rightarrow$	一般化 Lagrange 双対問題
$\Updownarrow$ 自明な不等式の追加	双対	$\Downarrow$
Polynomial SDP		$\Downarrow$ SOS 緩和
$\Downarrow$ 線形化	双対	$\Downarrow$
SDP(緩和) [41, 27]	$\Leftrightarrow$	SDP(緩和) [60, 61, 41]

- 多項式の疎性の活用 — Kim, Kojima, Muramatsu and Waki [30, 35, 72], SparsePOP [71], Lasserre [42].
- 多項式 SDP への拡張 — Kojima [33], Hol and Scherer [29], Henrion and Lasserre [27].
- 対称錐上の多項式多項式最適化問題への拡張— Kojma and Muramatsu [38, 39]

疎性を持った多項式 SDP-SOCP 問題の例

$$\min \quad \sum_{i=1}^{n} a_i x_i$$

$$\text{s.t.} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_j & c_j \\ c_j & d_j \end{pmatrix} x_j + \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} x_j x_{j+1} + \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} x_{j+1} \succeq \boldsymbol{O},$$

(多項式行列不等式)

$$0.3(x_k^3 + x_n) + 1 - \|(x_k + \beta_i, x_n)\| \geq 0 \ (j, k = 1, \ldots, n-1),$$

(多項式２次錐不等式)

$$1 - x_p^2 - x_{p+1}^2 - x_n^2 \geq 0 \ (p = 1, \ldots, n-2).$$

ここで $a_i, b_j, d_j \in (-1, 0)$, $c_j, \beta_j \in (0, 1)$ は乱数で定める.

第 2 部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と 2 乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
   - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

- SOS — Sum of Squares

$f(\boldsymbol{x})$: n 変数非負多項式 $\Leftrightarrow$ $f(\boldsymbol{x}) \geq 0 \ (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n)$.
$\mathcal{N}$: n 変数非負多項式の集合.

n 変数多項式 $f(\boldsymbol{x})$: SOS (Sum of Squares of Polynomials)

$$\Updownarrow$$

$f(\boldsymbol{x})$: (複数個の) n 変数多項式の 2 乗和，すなわち

$$\exists \text{ 有限本の } n \text{ 変数多項式 } g_1(\boldsymbol{x}), \ldots, g_k(\boldsymbol{x});\ f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{k} g_i(\boldsymbol{x})^2.$$

Σ : SOS の集合. $\Sigma_{2r} \subset \Sigma$: 高々 r 次の n 変数多項式の 2 乗和.

例. $n = 2.\ f(\boldsymbol{x}) = (x_1^2 - 2x_2 + 1)^2 + (3x_1x_2 + x_2 - 4)^2 \in \Sigma_4$.

例. $n = 2.\ f(x_1, x_2) = (x_1x_2 - 1)^2 + x_1^2 \in \Sigma_4$.

$$\inf\{f(x_1, x_2) : (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2\} = 0; 0 < x_1 \to 0,\ x_2 = 1/x_1,$$

$\nexists$ 最小点

$f(\boldsymbol{x})$: n 変数非負多項式 $\Leftrightarrow$ $f(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n)$.
$\mathcal{N}$: n 変数非負多項式の集合.

n 変数多項式 $f(\boldsymbol{x})$: SOS (Sum of Squares of Polynomials)

$\Updownarrow$

$f(\boldsymbol{x})$: (複数個の) n 変数多項式の 2 乗和，すなわち

$$\exists \text{ 有限本の } n \text{ 変数多項式 } g_1(\boldsymbol{x}), \ldots, g_k(\boldsymbol{x});\ f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{k} g_i(\boldsymbol{x})^2.$$

Σ : SOS の集合. $\Sigma_{2r} \subset \Sigma$: 高々 r 次の n 変数多項式の 2 乗和.

- 理論的には，$\Sigma \subset \mathcal{N}$，$\Sigma \neq \mathcal{N}$. ただし，$f(\boldsymbol{x}) \notin \Sigma$ なる $f(\boldsymbol{x}) \in \mathcal{N}$ は稀少.
- 実用的上これを同一視 $\Longrightarrow$ SOS 最適化, 緩和.
- $n = 1$ のときは，$\Sigma = \mathcal{N}$. $\forall n \geq 1$ で，2 次 n 変数非負多項式の集合 $= \Sigma_2$.

第２部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と２乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
   - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

$$\boxed{\mathcal{P}:\quad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x}) \text{ (ただし } f(\boldsymbol{x}) \text{ は } \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n \text{ の } 2r \text{ 次 } n \text{ 変数多項式)}}$$

!! 復習 !!

SDP 緩和 (＝多項式 2 乗緩和) に対する 2 種類の approach

Primal approach		Dual approach
$\boxed{\mathcal{P}}$	$\Rightarrow$	$\boxed{\text{双対問題}}$
$\Updownarrow$ 自明な不等式の追加	双対	$\Downarrow$
$\boxed{\text{Polynomial SDP}}$		$\Downarrow$ SOS 緩和
$\Downarrow$ 線形化	双対	$\Downarrow$
$\boxed{\text{SDP(緩和)}}$	$\Leftrightarrow$	$\boxed{\text{SDP(緩和)}}$

第２部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と２乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
   - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

$\mathcal{P}$: $\displaystyle\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})$ (ただし $f(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ の $2r$ 次 n 変数多項式)

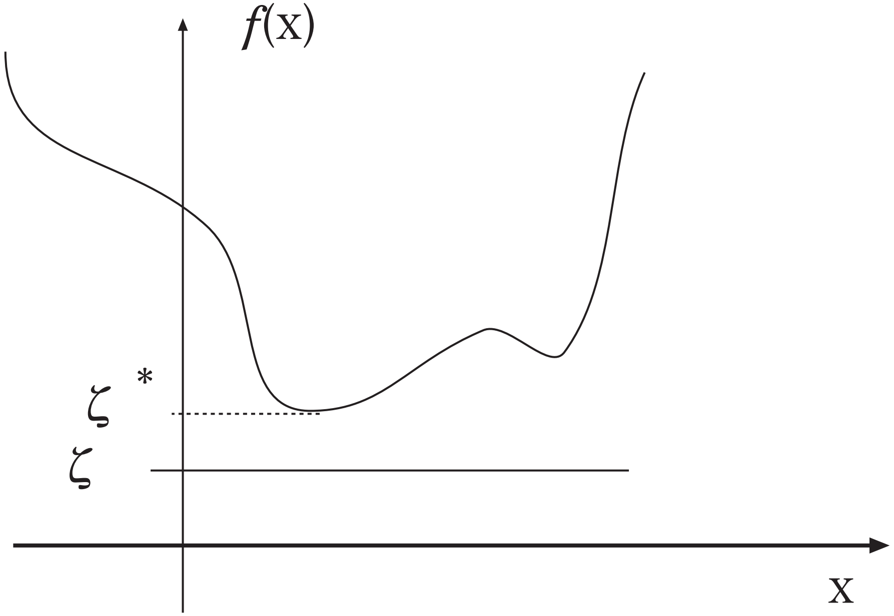
半無限計画 ($\mathcal{P}$の双対問題) $\Updownarrow$

$\mathcal{P}$': $\max\ \zeta$ sub.to $f(\boldsymbol{x}) - \zeta \geq 0\ (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n)$

$\Updownarrow$

$f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \mathcal{N}$ (n 変数非負多項式の集合)

ここで，$\boldsymbol{x}$ は変数ではない！不等式を記述するインデックス．



$\mathcal{P}$: $\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})$ (ただし $f(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ の $2r$ 次 n 変数多項式)

半無限計画 ($\mathcal{P}$の双対問題) $\Updownarrow$

$\mathcal{P}$': $\max\ \zeta$ sub.to $f(\boldsymbol{x}) - \zeta \geq 0\ (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n)$

$\Updownarrow$

$f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \mathcal{N}$ (n 変数非負多項式の集合)

$\Sigma_{2r} \subset \Sigma \subset \mathcal{N}$ $\Downarrow$ $\mathcal{P}'$ の部分問題 $=$ $\mathcal{P}$ の緩和

$\mathcal{P}$": max ζ

sub.to $f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \Sigma_{2r}$ (高々 r 次の n 変数多項式の 2 乗和)

$\mathcal{P}$ の最小値 $=$ $\mathcal{P}'$ の最大値 $\geq$ $\mathcal{P}$" の最大値

$\Downarrow$

SDP(半正定値計画問題) に帰着

- f の次数 $2r$ に対応して，SDP 緩和問題が 1 つ作られる．
  SDP 緩和問題の列が作られるのは制約付き POP の場合．
- POP の (近似) 最適解は，SDP の双対問題から得られる．

第 2 部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と 2 乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
   - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

高々 r 次の n 変数多項式の 2 乗和の集合

$$\Sigma_{2r} \equiv \left\{ \sum_{i=1}^{k} g_i(\boldsymbol{x})^2 \ : \ k \geq 1, \ g_i(\boldsymbol{x}) \text{ は } \underline{\text{高々 } r \text{ 次の } n \text{ 変数多項式}} \right\}$$

高々 r 次の n 変数多項式の基底をなす単項式よりなるベクトル

$$\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T = (1, x_1, x_2, \ldots, x_n, x_1^2, x_1x_2, x_1x_3, \ldots, x_n^2, \ldots, x_1^r, \ldots, x_n^r)^T$$

とすると，任意の r 次の n 変数多項式 $g(\boldsymbol{x})$ は,

$$g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x}) \text{ for } \exists \boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^{d(r)}$$

と表現できる．ただし，$d(r) \equiv \begin{pmatrix} n+r \\ r \end{pmatrix}$ は $\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})$ の次元.

例: $n = 2, r = 2$

$$\begin{aligned} g(x_1, x_2) &= 1 - 2x_1 - 4x_1^2 + 5x_1x_2 - 6x_2^2 \\ &= (1, \ -2, \ 0, \ -4, \ 5, -6)(1, \ x_1, \ x_2, \ x_1^2, \ x_1x_2, \ x_2^2)^T \\ &= \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x}), \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\Sigma_{2r} &\equiv \left\{ \sum_{i=1}^{k} g_i(\boldsymbol{x})^2 \ : \ k \geq 1,\ g_i(\boldsymbol{x}) \text{ は } \underline{\text{高々 } r \text{ 次}} \right\} \\
&= \left\{ \sum_{i=1}^{k} \left(\boldsymbol{a}_i^T \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x}) \right)^2 \ : \ k \geq 1,\ \boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^{d(r)} \right\} \\
&= \left\{ \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T \left(\sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{a}_i \boldsymbol{a}_i^T \right) \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x}) \ : \ k \geq 1,\ \boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^{d(r)} \right\} \\
&= \left\{ \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T \boldsymbol{V} \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x}) \ : \ \boldsymbol{V} \text{ は } d(r) \times d(r) \text{ 半正定値行列} \right\}.
\end{aligned}
$$

例１．$\underline{\text{高々３次の１変数多項式}}$ の２乗和の集合

$$\Sigma_6 \equiv \left\{ \sum_{i=1}^{k} g_i(\boldsymbol{x})^2 \;:\; k \geq 1,\ g_i(\boldsymbol{x}) \text{ は } \underline{\text{高々３次}} \right\}$$

$$= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}^T \boldsymbol{V} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \;:\; \boldsymbol{V} \text{ は } 4 \times 4 \text{ 半正定値行列} \right\}$$

例２．$\underline{\text{高々２次の２変数多項式}}$の２乗和の集合

$$\Sigma_4 \equiv \left\{ \sum_{i=1}^{k} g_i(\boldsymbol{x})^2 \;:\; k \geq 1,\ g_i(\boldsymbol{x}) \text{ は } \underline{\text{高々 2 次}} \right\}$$

$$= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix}^T \boldsymbol{V} \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_1^2 \\ x_1 x_2 \\ x_2^2 \end{pmatrix} \;:\; \boldsymbol{V} \text{ は } 6 \times 6 \text{ 半正定値行列} \right\}$$

例 3．SOS 最適化 $\Longrightarrow$ SDP ：$f(\boldsymbol{x}) = -11x + 2x^2 - 3x^3 + 4x^4$

$\max \zeta$ sub.to $f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \Sigma_4$ (高々 2 次の 1 変数多項式の 2 乗和)

$$\Updownarrow$$

Sum of Squares

$$\begin{array}{lll} \max & \zeta & \\ \text{sub.to} & f(\boldsymbol{x}) - \zeta = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ V_{12} & V_{22} & V_{23} \\ V_{13} & V_{23} & V_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix} \\ & 3 \times 3\ \boldsymbol{V} \succeq \boldsymbol{O} & \end{array}$$

$\Updownarrow$ 等式の両辺での $1,\ x,\ x^2,\ x^3,\ x^4$ の係数が一致

SDP (半正定値計画問題)

$$\max\ \zeta\ \text{sub.to}\ -\zeta = V_{11},\ -11 = 2V_{12},\ 2 = 2V_{13} + V_{22},$$
$$-3 = 2V_{23},\ 4 = V_{33},\ \boldsymbol{V} \succeq \boldsymbol{O}$$

一般には，等式条件は ζ と $\boldsymbol{V}$ の要素に関する線形方程式系.

例 4．SOS 最適化 $\Longrightarrow$ SDP：$f(\boldsymbol{x}) = -11x_1 + 2x_1x_2 + 3x_1^2 + 4x_2^2$

$\max \zeta$ sub.to $f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \Sigma_2$ (高々 1 次の 2 変数多項式の 2 乗和)

$$\Downarrow$$

Sum of Squares

$$\begin{array}{ll} \max & \zeta \\ \text{sub.to} & f(\boldsymbol{x}) - \zeta = \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ V_{12} & V_{22} & V_{23} \\ V_{13} & V_{23} & V_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \\ & 3 \times 3 \ \boldsymbol{V} \succeq \boldsymbol{O} \end{array}$$

$\Updownarrow$ 等式の両辺での $1,\ x_1,\ x_2,\ x_1x_2,\ x_1^2,\ x_2^2$ の係数が一致

SDP (半正定値計画問題)

$$\begin{array}{lll} \max & \zeta \ \text{sub.to} & -\zeta = V_{11},\ -11 = 2V_{12},\ 0 = 2V_{13}, \\ & & 2 = 2V_{23},\ 3 = V_{22},\ 4 = V_{33}, \boldsymbol{V} \succeq \boldsymbol{O} \end{array}$$

一般には，等式条件は ζ と $\boldsymbol{V}$ の要素に関する線形方程式系.

第 2 部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と 2 乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
   - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

$\mathcal{P}$: $\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})$ (ただし $f(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ の $2r$ 次 n 変数多項式)

Polynomial SDP $\Updownarrow$ 自明な不等式の追加

$\mathcal{P}$': min $f(\boldsymbol{x})$ sub.to $\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T \succeq \boldsymbol{O}$ (常に成り立つ条件).

$$\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T = (1, x_1, x_2, \ldots, x_n, x_1^2, x_1x_2, x_1x_3, \ldots, x_n^2, \ldots, x_1^r, \ldots, x_n^r)^T$$

$\Updownarrow$ $\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T$ を展開して書き直す

$\mathcal{P}$": min $\sum_{\alpha \in \mathcal{F}} c_\alpha \boldsymbol{x}^\alpha$ sub.to $\sum_{\alpha \in \mathcal{F}} \boldsymbol{G}_\alpha \boldsymbol{x}^\alpha \succeq \boldsymbol{O}$.

$c_\alpha \in \mathbb{R}$, $\boldsymbol{G}_\alpha$: $\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T$ と同じサイズの行列,
$\boldsymbol{x}^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$: 単項式.

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_2(\boldsymbol{x})^T &= (1\ x_1\ x_2)^T(1\ x_1\ x_2) \\
&= \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_2 \\ x_1 & x_1^2 & x_1x_2 \\ x_2 & x_1x_2 & x_2^2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\boldsymbol{x}^{(0,0)} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\boldsymbol{x}^{(1,0)} \\
&+ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\boldsymbol{x}^{(0,1)} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\boldsymbol{x}^{(1,1)} \\
&+ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\boldsymbol{x}^{(2,0)} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\boldsymbol{x}^{(0,2)}
\end{aligned}
$$

$\mathcal{P}$: $\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})$ (ただし $f(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ の $2r$ 次 n 変数多項式)

Polynomial SDP $\Updownarrow$ 自明な不等式の追加

$\mathcal{P}$': min $f(\boldsymbol{x})$ sub.to $\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T \succeq \boldsymbol{O}$ (常に成り立つ条件).

$$\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T = (1, x_1, x_2, \ldots, x_n, x_1^2, x_1x_2, x_1x_3, \ldots, x_n^2, \ldots, x_1^r, \ldots, x_n^r)^T$$

$\Updownarrow$ $\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T$ を展開して書き直す

$\mathcal{P}$": min $\sum_{\alpha \in \mathcal{F}} c_\alpha \boldsymbol{x}^\alpha$ sub.to $\sum_{\alpha \in \mathcal{F}} \boldsymbol{G}_\alpha \boldsymbol{x}^\alpha \succeq \boldsymbol{O}$.

線形化 $\Downarrow$ 各 $\boldsymbol{x}^\alpha$ を実数変数 y_α で置き換える

SDP: min $\sum_{\alpha \in \mathcal{F}} c_\alpha y_\alpha$ sub.to $\sum_{\alpha \in \mathcal{F}} \boldsymbol{G}_\alpha y_\alpha \succeq \boldsymbol{O}$.

- $\boldsymbol{x}$: $\mathcal{P}$の許容解 $\Rightarrow$ $\boldsymbol{x}$: $\mathcal{P}$" の許容解 $\Rightarrow$ $y_\alpha = \boldsymbol{x}^\alpha$ $(\alpha \in \mathcal{F})$: SDP の許容解; 目的関数値は同じ．ゆえに，SDP は$\mathcal{P}$の緩和問題.
- $x_1 = y_{(1,0,\ldots,0)}, \ldots, x_n = y_{(0,\ldots,0,1)}$ が $\mathcal{P}$の近似解.

例 3 の SDP 緩和：$f(\boldsymbol{x}) = -11x + 2x^2 - 3x^3 + 4x^4 \rightarrow$ 最小化

Polynomial SDP $\Updownarrow$ 自明な不等式の追加

$$\begin{array}{ll} \text{min} & f(\boldsymbol{x}) = -11x + 2x^2 - 3x^3 + 4x^4 \\ \text{sub.to} & \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix}^T \equiv \begin{pmatrix} 1 & x & x^2 \\ x & x^2 & x^3 \\ x^2 & x^3 & x^4 \end{pmatrix} \succeq \boldsymbol{O}. \end{array}$$

線形化 $\Updownarrow$ 各 x^α を y_α で置き換える

$$\begin{array}{ll} \text{min} & -11y_1 + 2y_2 - 3y_3 + 4y_4 \\ \text{sub.to} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} y_1 + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} y_2 \\ & + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} y_3 + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} y_4 \succeq \boldsymbol{O}. \end{array}$$

$$\boxed{\mathcal{P}: \quad \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \; f(\boldsymbol{x}) \text{ (ただし } f(\boldsymbol{x}) \text{ は } \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \text{ の } 2r \text{ 次 } n \text{ 変数多項式)}}$$

!! 復習 !!

- SDP は SOS 緩和から導かれる SDP の双対問題.

SDP 緩和 (＝多項式 2 乗緩和) に対する 2 種類の approach

Primal approach		Dual approach
$\boxed{\mathcal{P}}$	$\Rightarrow$	双対問題
$\Updownarrow$ 自明な不等式の追加	双対	$\Downarrow$
Polynomial SDP		$\Downarrow$ SOS 緩和
$\Downarrow$ 線形化	双対	$\Downarrow$
SDP(緩和)	$\Leftrightarrow$	SDP(緩和)

第 2 部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と 2 乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   5-1. 無制約多項式最適化の場合
   5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

POP: min $f_0(\boldsymbol{x})$ sub.to $f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0 \ (j = 1, \ldots, m)$.

!! 復習!!

SDP 緩和 (＝多項式 2 乗緩和) に対する 2 種類の approach

Primal approach		Dual approach
POP	$\Rightarrow$	一般化 Lagrange 双対問題
$\Updownarrow$ 自明な不等式の追加	双対	$\Downarrow$
Polynomial SDP		$\Downarrow$ SOS 緩和
$\Downarrow$ 線形化	双対	$\Downarrow$
SDP(緩和) [41, 27]	$\Leftrightarrow$	SDP(緩和) [60, 61, 41]

- SDP の列，$\{\text{SDP}^r\}$ を生成．各 SDP^r は POP の目的関数値の下界 ζ^r と近似最小解 $\boldsymbol{x}^r$ を生成する．
- 理論的には，比較的緩い条件の下で，$\zeta^r \to$ POP の最適値，$\boldsymbol{x}^r \to$ POP の最適解．

第２部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と２乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
    - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
    - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
    - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
    - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
    - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
    - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
    - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

$$\boxed{\text{POP: } \min\ f_0(\boldsymbol{x}) \text{ s.t. } \boldsymbol{x} \in S \equiv \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m)\}}$$

!! 通常の Lagrange 関数，Lagrange 緩和 !!

Lagrange 関数: $L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) = f_0(\boldsymbol{x}) - w_1 f_1(\boldsymbol{x}) \ \cdots\ - w_m f_m(\boldsymbol{x})$.

ただし，$\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^m_+ \equiv \{\boldsymbol{w} = (w_1, \ldots, w_m) \in \mathbb{R}^m : w_j \geq 0\}$.

Lagrange 関数の性質： $\forall \boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^m_+$ に対して，

$$\boldsymbol{x} \in S \Rightarrow f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (\forall j) \Rightarrow$$

$$L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) = f_0(\boldsymbol{x}) - w_1 f_1(\boldsymbol{x}) \ \cdots\ - w_m f_m(\boldsymbol{x}) \leq f_0(\boldsymbol{x})$$

$$\boxed{\text{Lagrange 緩和問題： } \forall \boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^m_+ \text{ を固定して，} \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w})}$$

したがって， $\displaystyle \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) \leq \min_{\boldsymbol{x} \in S} f_0(\boldsymbol{x})\ (\forall \boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^m_+)$

$$\boxed{\text{Lagrange 双対問題： } \max_{\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^m_+} \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w})}$$

$w_j \geq 0$ を $\varphi_j(\boldsymbol{x}) \in \Sigma$ に $\Rightarrow$ 一般化 Lagrange 緩和, 双対問題

POP: $\min\ f_0(\boldsymbol{x})$ s.t. $\boldsymbol{x} \in S \equiv \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m)\}$

一般化 Lagrange 関数:

$L(\boldsymbol{x}, \varphi) = f_0(\boldsymbol{x}) - \varphi_1(\boldsymbol{x}) f_1(\boldsymbol{x})\ \cdots\ - \varphi_m(\boldsymbol{x}) f_m(\boldsymbol{x})$.

ただし，$\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m \equiv \{\varphi(\boldsymbol{x}) = (\varphi_1(\boldsymbol{x}), \ldots, \varphi_m(\boldsymbol{x})) : \varphi_j \in \Sigma\}$.

一般化 Lagrange 緩和問題： $\displaystyle\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \varphi)$

一般化 Lagrange 関数の性質： $\forall \varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m$ に対して，

$$\boldsymbol{x} \in S \Rightarrow f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m) \Rightarrow L(\boldsymbol{x}, \varphi) \leq f_0(\boldsymbol{x})$$

したがって， $\displaystyle\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \varphi) \leq \min_{\boldsymbol{x} \in S} f_0(\boldsymbol{x})\ (\forall \varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m)$

一般化 Lagrange 双対問題： $\displaystyle\max_{\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m} \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \varphi)$

- 適当な条件のもとで， $\displaystyle\max_{\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m} \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \varphi) = \min_{\boldsymbol{x} \in S} f_0(\boldsymbol{x})$
- $\displaystyle\max_{\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m} \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} L(\boldsymbol{x}, \varphi)$ の近似 $\Rightarrow$ SDP.

POP: $\min\ f_0(\boldsymbol{x})$ s.t. $\boldsymbol{x} \in S \equiv \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m)\}$

一般化 Lagrange 関数:

$$L(\boldsymbol{x}, \varphi) = f_0(\boldsymbol{x}) - \varphi_1(\boldsymbol{x}) f_1(\boldsymbol{x}) \ \cdots \ - \varphi_m(\boldsymbol{x}) f_m(\boldsymbol{x}).$$

ただし，$\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m \equiv \{\varphi(\boldsymbol{x}) = (\varphi_1(\boldsymbol{x}), \ldots, \varphi_m(\boldsymbol{x})) : \varphi_j \in \Sigma\}$.

一般化 Lagrange 双対問題： $\max_{\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m} \ \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \ L(\boldsymbol{x}, \varphi)$

部分問題： $\max_{\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m_{2r}} \ \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \ L(\boldsymbol{x}, \varphi)$

ただし，$\Sigma^m_{2r} = \{\varphi(\boldsymbol{x}) = (\varphi_1(\boldsymbol{x}), \ldots, \varphi_m(\boldsymbol{x})) : \varphi_j(\boldsymbol{x}) \in \Sigma_{2r}\}$.

$$\Updownarrow$$

$\max \zeta$ sub.to $L(\boldsymbol{x}, \varphi) - \zeta \geq 0,\ \varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m_{2r}$.

$$\Downarrow$$

SOS 緩和 ^{r}：$\max \zeta$ sub.to $L(\boldsymbol{x}, \varphi) - \zeta = \psi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma_{2\omega},\ \varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m_{2r}$.

ただし，2ω は $L(\boldsymbol{x}, \varphi)$ の次数.

$$\boxed{\text{POP: } \min\ f_0(\boldsymbol{x}) \text{ s.t. } \boldsymbol{x} \in S \equiv \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m)\}}$$

一般化 Lagrange 関数:

$$L(\boldsymbol{x}, \varphi) = f_0(\boldsymbol{x}) - \varphi_1(\boldsymbol{x}) f_1(\boldsymbol{x}) \ \cdots \ - \varphi_m(\boldsymbol{x}) f_m(\boldsymbol{x}).$$

ただし, $\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m \equiv \{\varphi(\boldsymbol{x}) = (\varphi_1(\boldsymbol{x}), \ldots, \varphi_m(\boldsymbol{x})) : \varphi_j \in \Sigma\}$.

一般化 Lagrange 双対問題： $\displaystyle \max_{\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m} \ \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \ L(\boldsymbol{x}, \varphi)$

$$\Downarrow$$

SOS 緩和 ^{r}：$\max \zeta$ sub.to $L(\boldsymbol{x}, \varphi) - \zeta = \psi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma_{2\omega}$, $\varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma^m_{2r}$.

ただし,

$$\Sigma^m_{2r} = \{\varphi(\boldsymbol{x}) = (\varphi_1(\boldsymbol{x}), \ldots, \varphi_m(\boldsymbol{x})) : \varphi_j(\boldsymbol{x}) \in \Sigma_{2r}\},$$

2ω は $L(\boldsymbol{x}, \varphi)$ の次数

- $r \uparrow \Rightarrow$ 精度$\uparrow$, SOS 緩和 ^{r} のサイズ$\uparrow\uparrow$.

さらに, $\varphi_j(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T \boldsymbol{V}^j \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})$, $\boldsymbol{V}^j \succeq \boldsymbol{O}$,

$\psi(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}_\omega(\boldsymbol{x})^T \boldsymbol{V}^{m+1} \boldsymbol{u}_\omega(\boldsymbol{x})$, $\boldsymbol{V}^{m+1} \succeq \boldsymbol{O}$ を代入 $\Rightarrow$ SDP^r.

SOS 緩和の例

min $f_0(\boldsymbol{x}) = -11x + 2x^2 - 3x^3 + 4x^4$ sub.to $1 - x^2 \geq 0$.

$r = 1$, $\omega = 2$.

$$\boxed{\text{SOS 緩和}^r: \max \zeta \text{ sub.to } L(x,\varphi) - \zeta = \psi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma_4,\ \varphi(x) \in \Sigma_{2\times 1}.}$$

$$\begin{aligned}
L(x,\varphi) &= f_0(x) - \varphi(x)(1-x^2), \\
\Sigma_{2\times 1} &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 & x \end{pmatrix} \boldsymbol{V}_1 \begin{pmatrix} 1 & x \end{pmatrix}^T : \boldsymbol{V}_1 \succeq \boldsymbol{O} \right\}, \\
\Sigma_4 &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 & x & x^2 \end{pmatrix} \boldsymbol{V}_2 \begin{pmatrix} 1 & x & x^2 \end{pmatrix}^T : \boldsymbol{V}_2 \succeq \boldsymbol{O} \right\}.
\end{aligned}$$

$$\boxed{\begin{aligned}
\max \quad & \zeta \\
\text{sub.to} \quad & f_0(x) - \begin{pmatrix} 1 & x \end{pmatrix} \boldsymbol{V}_1 \begin{pmatrix} 1 & x \end{pmatrix}^T (1-x^2) - \zeta \\
& = \begin{pmatrix} 1 & x & x^2 \end{pmatrix} \boldsymbol{V}_2 \begin{pmatrix} 1 & x & x^2 \end{pmatrix}^T \text{ for } \forall x \in \mathbb{R}, \\
& \boldsymbol{V}_1 \succeq \boldsymbol{O},\ \boldsymbol{V}_2 \succeq \boldsymbol{O}.
\end{aligned}}$$

= の両辺を比較 $\Rightarrow$ SDP^r.

第 2 部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と 2 乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
   - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

$$\boxed{\text{POP: } \min\ f_0(\boldsymbol{x}) \text{ s.t. } \boldsymbol{x} \in S \equiv \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m)\}}$$

$$\Downarrow\ r \geq 0, \quad \begin{array}{rcl} 2\omega & \approx & \max\{2r + \text{deg} f_j\ (j = 1, \ldots, m),\ \text{deg} f_0\} \\ & = & \text{一般化 Lagrange 関数の次数} \end{array}$$

$$\boxed{\begin{array}{rl} \text{Poly. SDP}^r\text{: } \min & f_0(\boldsymbol{x}) \\ \text{sub.to} & \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T f_j(\boldsymbol{x}) \succeq \boldsymbol{O}\ (j = 1, \ldots, m), \\ & \boldsymbol{u}_\omega(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_\omega(\boldsymbol{x})^T \succeq \boldsymbol{O}. \end{array}}$$

$$\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T = (1, x_1, x_2, \ldots, x_n, x_1^2, x_1 x_2, x_1 x_3, \ldots, x_n^2, \ldots, x_1^r, \ldots, x_n^r)^T$$

$\Updownarrow$ $\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T f_j(\boldsymbol{x}),\ \boldsymbol{u}_\omega(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_\omega(\boldsymbol{x})^T$ を展開して書き直す

$$\boxed{\min \sum_{\alpha \in \mathcal{F}} c_\alpha \boldsymbol{x}^\alpha \text{ sub.to } \sum_{\alpha \in \mathcal{F}} \boldsymbol{G}_{j\alpha} \boldsymbol{x}^\alpha \succeq \boldsymbol{O}, \ \sum_{\alpha \in \mathcal{F}} \boldsymbol{H}_\alpha \boldsymbol{x}^\alpha \succeq \boldsymbol{O}.}$$

線形化 $\Downarrow$ 各 $\boldsymbol{x}^\alpha$ を実数変数 y_α で置き換える $\Rightarrow$ SDP

$$\boxed{\min \sum_{\alpha \in \mathcal{F}} c_\alpha y_\alpha \text{ sub.to } \sum_{\alpha \in \mathcal{F}} \boldsymbol{G}_{j\alpha} y_\alpha \succeq \boldsymbol{O}, \ \sum_{\alpha \in \mathcal{F}} \boldsymbol{H}_\alpha y_\alpha \succeq \boldsymbol{O}.}$$

$$\boxed{\text{POP: } \min\ f_0(\boldsymbol{x}) \text{ s.t. } \boldsymbol{x} \in S \equiv \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (j = 1,\ldots,m)\}}$$

緩和の精度を決めるパラメータ r について

$$\boxed{\text{SOS 緩和}^r\text{: } \max \zeta \text{ sub.to } L(\boldsymbol{x},\varphi) - \zeta = \psi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma_{2\boldsymbol{\omega}},\ \varphi(\boldsymbol{x}) \in \Sigma_{2r}^m.}$$

ただし， $\Sigma_{2r}^m = \{\varphi(\boldsymbol{x}) = (\varphi_1(\boldsymbol{x}),\ldots,\varphi_m(\boldsymbol{x})) : \varphi_j(\boldsymbol{x}) \in \Sigma_{2r}\}$.

SDP 緩和 ^{r} — 以下の問題の展開・線形化

$$\begin{array}{lll} \text{Poly. SDP}^r\text{:} & \min & f_0(\boldsymbol{x}) \\ & \text{sub.to} & \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T f_j(\boldsymbol{x}) \succeq \boldsymbol{O}\ (j = 1,\ldots,m), \\ & & \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{\omega}}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{\omega}}(\boldsymbol{x})^T \succeq \boldsymbol{O}. \end{array}$$

$$\boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T = (1, x_1, x_2, \ldots, x_n, x_1^2, x_1x_2, x_1x_3, \ldots, x_n^2, \ldots, x_1^r, \ldots, x_n^r)^T$$

- r をすべての j に共通にとったが，SOS 緩和 ^{r}，Poly. SDP^r の多項式次数のバランスをとるため，$f_j(\boldsymbol{x})$ の次数に依存:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega}_{\max} &= \max\{\lceil \text{deg } f_j(\boldsymbol{x})/2 \rceil : j = 0,1,\ldots,m\}, \\ \boldsymbol{\omega} &\geq \boldsymbol{\omega}_{\max},\ r_j = \omega - \lceil \text{deg } f_j(\boldsymbol{x})/2 \rceil\ (j = 1,\ldots,m). \end{aligned}$$

- $\boldsymbol{\omega}$ が Poly. SDP$^{\boldsymbol{\omega}}$, SOS 緩和 $^{\boldsymbol{\omega}}$ のサイズと POP の近似解の精度を決める — 最大で次数 $2\boldsymbol{\omega}$ の SOS を使用.

POP: $\min\ f_0(\boldsymbol{x})$ s.t. $\boldsymbol{x} \in S \equiv \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : f_j(\boldsymbol{x}) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m)\}$

複数個の最適解をもつ場合について

- これまで述べた方法で，最適値は近似できるが，最適解は近似出来ない.
- Gloptipoly [27] 最適解が有限個である場合には，Henrion and Lassere [28] の方法を使ってすべての最適解を近似計算出来るが，規模の大きい問題に対してはコストが高い.
- SparsePOP [71] 目的関数に微小な線形関数を加えて最適解を 1 つにする; 目的関数を

$$f_0(\boldsymbol{x}) + \epsilon \sum_{i=1}^{n} p_i x_i$$

で置き換える．ただし，$p_i \in [0, 1]$ は乱数，ϵ は微小な正数，例えば $\epsilon =$1.e-4.

第２部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と２乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
    - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
    - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
    - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
    - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
    - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
    - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
    - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

第 2 部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と 2 乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
    - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
    - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
    - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
    - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
    - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
    - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
    - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

$$\boxed{\mathcal{P}:\quad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}\ f(\boldsymbol{x})\ \text{(ただし } f(\boldsymbol{x}) \text{ は } \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n \text{ の } 2r \text{ 次 } n \text{ 変数多項式)}}$$

!! 復習 !!

SDP 緩和 (＝多項式 2 乗緩和) に対する 2 種類の approach

Primal approach		Dual approach
$\mathcal{P}$	$\Rightarrow$	双対問題
$\Updownarrow$ 自明な不等式の追加	双対	$\Downarrow$
Polynomial SDP		$\Downarrow$ SOS 緩和
$\Downarrow$ 線形化	双対	$\Downarrow$
SDP(緩和)	$\Leftrightarrow$	SDP(緩和)

- 多項式の疎性の活用 — Kim, Kojima, Muramatsu and Waki [30, 35, 72], SparsePOP [71], Lasserre [42].

例題: 一般化した Rosenbrock 関数の最小化

$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=2}^{n} \left(100(x_i - x_{i-1}^2)^2 + (1 - x_i)^2\right).$

SOS 緩和

$$\begin{array}{ll} \max & \zeta \\ \text{s.t.} & f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in (\text{SOS of deg-2. poly. in } x_1, \ldots, x_n) \end{array}$$

- SOS 緩和のサイズ $x_1, \ldots, x_n$ の高々4 次の単項式の種類 = ${}_{(n+4)}C_4$; $n \geq 20$ の問題は解くことが困難.
- 目的関数 $f(\boldsymbol{x})$ の Hesse 行列は sparse Cholesky 分解可能!

sparse SOS 緩和

$$\begin{array}{ll} \max & \zeta \\ \text{s.t.} & f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \sum_{i=2}^{n} (\text{SOS of deg-2. poly. in } x_{i-1},\ x_i) \end{array}$$

- sparse SOS 緩和のサイズ $\leq$ "2 変数の高々4 次の単項式の種類" $\times(n-1) = 15(n-1)$.
- $f(\boldsymbol{x})$ の Hesse 行列は 3 重対角；sparse Cholesky 分解可能.

$\Longrightarrow$ 一般化

$\mathcal{P}$: $\displaystyle\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})$ (ただし $f(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ の $2r$ 次 n 変数多項式)

$\boldsymbol{H}f$: $f(\boldsymbol{x})$ の Hessian 行列の疎パターン

$$\boldsymbol{H}f_{ij} = \star \text{ if } i = j \text{ or } \partial^2 f(\boldsymbol{x})/\partial x_i \partial x_j \neq 0,\ 0 \text{ otherwise.}$$

$f(\boldsymbol{x})$: c-sparse $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{H}f$ が sparse Cholesky 分解可能.

例. $f(\boldsymbol{x}) = x_1^4 + 2x_1^2x_2^2 - x_2x_3 + x_3^4 - 3x_3x_4^2 + x_4^4 - x_4x_5 + x_5^6$.

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \star & \star & 0 & 0 & 0 \\ \star & \star & \star & 0 & 0 \\ 0 & \star & \star & \star & 0 \\ 0 & 0 & \star & \star & \star \\ 0 & 0 & 0 & \star & \star \end{pmatrix} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T,\ \boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} \star & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \star & \star & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \star & \star & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \star & \star & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \star & \star \end{pmatrix}.$$

この Cholesky 分解では fill-in が起きない.

$$\mathcal{P}: \quad \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \; f(\boldsymbol{x}) \text{ (ただし } f(\boldsymbol{x}) \text{ は } \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \text{ の } 2r \text{ 次 } n \text{ 変数多項式)}$$

$\boldsymbol{H}f$: $f(\boldsymbol{x})$ の Hessian 行列の疎パターン

$$\boldsymbol{H}f_{ij} = \star \text{ if } i = j \text{ or } \partial^2 f(\boldsymbol{x})/\partial x_i \partial x_j \neq 0, \; 0 \text{ otherwise.}$$

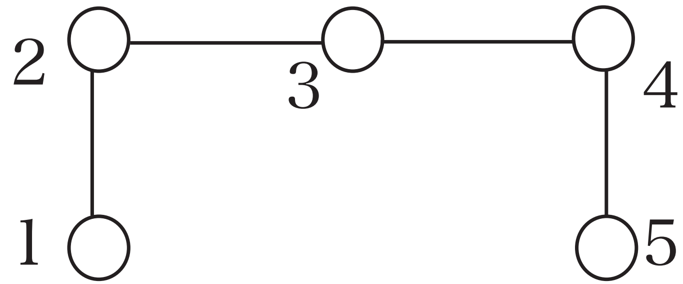
$f(\boldsymbol{x})$: c-sparse $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{H}f$ が sparse Cholesky 分解可能.

(a) sparse Cholesky 分解は chordal graph $G(N, E)$ で特徴付けられる; $N = \{1, \ldots, n\}$, $E = \{(i, j) : \boldsymbol{H}f_{ij} = \star\} +$ “fill-in”.

chordal $\Leftrightarrow$ 4 本以上の edge からなる $\forall$ サイクルは chord をもつ.

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \star & \star & 0 & 0 & 0 \\ \star & \star & \star & 0 & 0 \\ 0 & \star & \star & \star & 0 \\ 0 & 0 & \star & \star & \star \\ 0 & 0 & 0 & \star & \star \end{pmatrix}$$

chordal



$C_1 = \{i, i+1\}$ $(i = 1, \ldots, 4)$
— 最大クリーク族

$\boxed{\mathcal{P}\text{:}\quad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x})}$ (ただし $f(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ の $2r$ 次 n 変数多項式)

$\boldsymbol{H}f$: $f(\boldsymbol{x})$ の Hessian 行列の疎パターン

$$\boldsymbol{H}f_{ij} = \star \text{ if } i = j \text{ or } \partial^2 f(\boldsymbol{x})/\partial x_i \partial x_j \neq 0,\ 0 \text{ otherwise.}$$

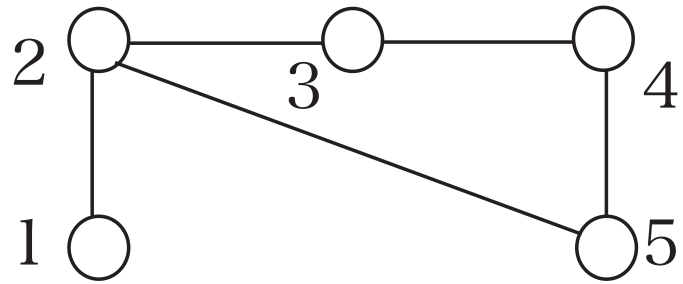
$f(\boldsymbol{x})$: c-sparse $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{H}f$ が sparse Cholesky 分解可能.

(a) sparse Cholesky 分解は chordal graph $G(N, E)$ で特徴付けられる; $N = \{1, \ldots, n\}$, $E = \{(i, j) : \boldsymbol{H}f_{ij} = \star\} +$ "fill-in".

chordal $\Leftrightarrow$ 4 本以上の edge からなる $\forall$ サイクルは chord をもつ.

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \star & \star & 0 & 0 & 0 \\ \star & \star & \star & 0 & \star \\ 0 & \star & \star & \star & 0 \\ 0 & 0 & \star & \star & \star \\ 0 & \star & 0 & \star & \star \end{pmatrix}$$

chordal でない



$$\boxed{\mathcal{P}:\quad \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x}) \text{ (ただし } f(\boldsymbol{x}) \text{ は } \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n \text{ の } 2r \text{ 次 } n \text{ 変数多項式)}}$$

$\boldsymbol{H}f$: $f(\boldsymbol{x})$ の Hessian 行列の疎パターン

$$\boldsymbol{H}f_{ij} = \star \text{ if } i = j \text{ or } \partial^2 f(\boldsymbol{x})/\partial x_i \partial x_j \neq 0,\ 0 \text{ otherwise.}$$

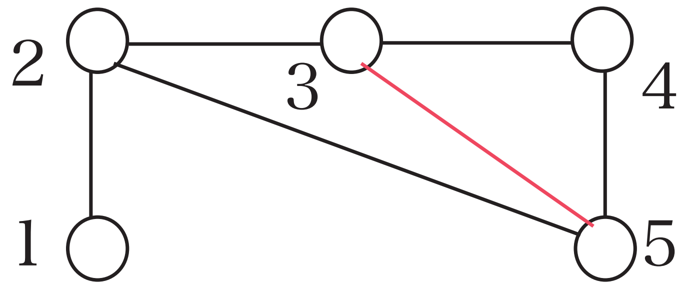
$f(\boldsymbol{x})$: c-sparse $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{H}f$ が sparse Cholesky 分解可能.

(a) sparse Cholesky 分解は chordal graph $G(N, E)$ で特徴付けられる; $N = \{1, \ldots, n\}$, $E = \{(i, j) : \boldsymbol{H}f_{ij} = \star\} +$ "fill-in".

chordal $\Leftrightarrow$ 4 本以上の edge からなる $\forall$ サイクルは chord をもつ.

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \star & \star & 0 & 0 & 0 \\ \star & \star & \star & 0 & \star \\ 0 & \star & \star & \star & \star \\ 0 & 0 & \star & \star & \star \\ 0 & \star & \star & \star & \star \end{pmatrix}$$

a chordal extension



$C_1 = \{1, 2\}, C_2 = \{2, 3, 5\},$
$C_3 = \{3, 4, 5\}$ — 最大クリーク族

$\mathcal{P}$: $\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \; f(\boldsymbol{x})$ (ただし $f(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ の $2r$ 次 n 変数多項式)

$\boldsymbol{H}f$: $f(\boldsymbol{x})$ の Hessian 行列の疎パターン

$$\boldsymbol{H}f_{ij} = \star \text{ if } i = j \text{ or } \partial^2 f(\boldsymbol{x})/\partial x_i \partial x_j \neq 0, \; 0 \text{ otherwise.}$$

$f(\boldsymbol{x})$: c-sparse $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{H}f$ が sparse Cholesky 分解可能.

(a) sparse Cholesky 分解は chordal graph $G(N, E)$ で特徴付けられる; $N = \{1, \ldots, n\}$, $E = \{(i, j) : \boldsymbol{H}f_{ij} = \star\} +$ “fill-in”.

(b) $C_1, C_2, \ldots, C_q \subset N$ を $G(N, E)$ の最大クリークの族とする.

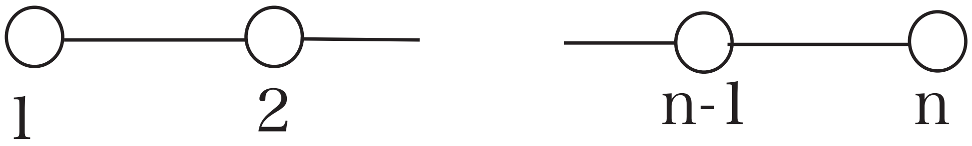
sparse SOS 緩和

$\max \quad \zeta$

s.t. $\quad f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \sum_{k=1}^{q}$ (SOS of polynomials in x_i $(i \in C_k)$)

例題: 一般化した Rosenbrock 関数の最小化 — 再出

$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=2}^{n} \left(100(x_i - x_{i-1}^2)^2 + (1-x_i)^2\right)$, deg $f = 2\boldsymbol{\omega}$, $\boldsymbol{\omega} = 2$.
$f(\boldsymbol{x})$ の Hesse 行列の疎パターン行列 $\boldsymbol{H}f$ は 3 重対角で，対応する chordal graph は



$C_i = \{i-1, i\}$ $(i = 2, \ldots, n)$: 最大クリーク族

sparse SOS 緩和

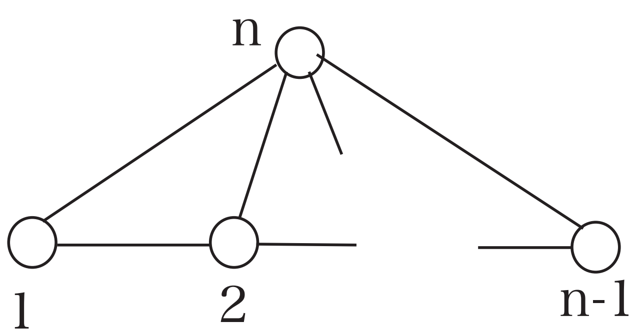
$$\max \quad \zeta$$

$$\text{s.t.} \quad f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \sum_{i=2}^{n} (\text{SOS of deg-}\boldsymbol{\omega}\text{. poly. in } x_{i-1},\ x_i)$$

例題: さらに一般化した Rosenbrock 関数の最小化

$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=2}^{n} \left(100(x_i - x_{i-1}^2)^2 + (1 - x_i + x_n)^2\right).$

$f(\boldsymbol{x})$ の Hesse 行列の疎パターン行列 $\boldsymbol{H}f$ は 3 重対角で，対応する chordal graph は



$C_i = \{i-1, i, n\}$ $(i = 2, \ldots, n-1\}$: 最大クリーク族

sparse SOS 緩和

$$\max \quad \zeta$$

$$\text{s.t.} \quad f(\boldsymbol{x}) - \zeta \in \sum_{i=2}^{n-1} (\text{SOS of deg-2. poly. in } x_{i-1},\ x_i, x_n)$$

第 2 部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と 2 乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
   - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

POP: $\min\ f_0(\boldsymbol{x})$ s.t. $f_j(\boldsymbol{x}_{I_j}) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m)$. Dual approach

仮定 f_0 : c-sparse, i.e., $\boldsymbol{H}f_0$ が sparse Cholesky 分解可能,
f_j : $x_i\ (i \in I_j \subset \{1, \ldots, n\})$ のみの関数.

$\Downarrow$ 一般化 Lagrange 関数 $L(\boldsymbol{x}, \varphi)$ が c-sparse になるように構成

例: min $f_0(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{4}(-x_i^3)$
s.t. $f_j(x_j, x_4) = -j \times x_j^2 - x_4^2 + 1 \geq 0\ (j = 1, 2, 3)$.

$$L(x, \varphi) = f_0(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^{4} \varphi_j(x_j, x_4) f_j(x_j, x_4)$$

Hesse 行列の疎パターン $\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \star & 0 & 0 & \star \\ 0 & \star & 0 & \star \\ 0 & 0 & \star & \star \\ \star & \star & \star & \star \end{pmatrix}$

POP: $\min\ f_0(\boldsymbol{x})$ s.t. $f_j(\boldsymbol{x}_{I_j}) \geq 0\ (j = 1, \ldots, m)$. **Dual approach**

仮定	f_0 : c-sparse, i.e., $\boldsymbol{H}f_0$ が sparse Cholesky 分解可能,
	f_j : $x_i\ (i \in I_j \subset \{1, \ldots, n\})$ のみの関数.

$\Downarrow$ 一般化 Lagrange 関数 $L(\boldsymbol{x}, \varphi)$ が c-sparse になるように構成

$$L(\boldsymbol{x}, \phi) = f_0(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^{m} \varphi_j(\boldsymbol{x}_{I_j}) f_j(\boldsymbol{x}_{I_j}).$$

ここで, $\varphi_j \in \Sigma_{2r_j}^{I_j} \equiv$ "$x_i\ (i \in I_J)$ の高々 r_j 次の多項式の 2 乗和".

sparse SOS 緩和 $\boldsymbol{\omega}$ — Dual approach：

$$\begin{array}{ll} \max & \zeta \\ \text{s.t.} & L(\boldsymbol{x}, \varphi) - \zeta \in \displaystyle\sum_{i=1}^{q} \text{"SOS of poly.(deg} \leq \boldsymbol{\omega}\text{) in } x_i\ (i \in C_k)\text{"} \\ & \varphi_j \in \Sigma_{2r}^{I_j}\ (j = 1, \ldots, m). \end{array}$$

ただし, $\boldsymbol{\omega} = \lceil \deg L(\boldsymbol{x}, \varphi)/2 \rceil$.

例: min $f_0(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^4 (-x_i^3)$
s.t. $f_j(x_j, x_4) = -j \times x_j^2 - x_4^2 + 1 \geq 0 \ (j = 1, 2, 3)$.

$\boldsymbol{\omega} = 2 \geq \lceil \{\max\{\text{deg } f_j(\boldsymbol{x})/2 \ (j = 0, 1, \ldots, 3)\}\rceil$, $r_j = 1$

$$L(x, \varphi) = f_0(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^3 \begin{pmatrix} 1 \\ x_j \\ x_4 \end{pmatrix}^T \boldsymbol{V}_j \begin{pmatrix} 1 \\ x_j \\ x_4 \end{pmatrix} f_j(x_j, x_4)$$

sparse SOS 緩和 $\boldsymbol{\omega}$ — Dual approach：

$$\begin{array}{ll} \max & \zeta \\ \text{s.t.} & L(\boldsymbol{x}, \varphi) - \zeta \in \displaystyle\sum_{i=1}^3 \begin{pmatrix} 1 \\ x_i \\ x_4 \\ x_i^2 \\ x_i x_4 \\ x_4^2 \end{pmatrix}^T \boldsymbol{W}_j \begin{pmatrix} 1 \\ x_i \\ x_4 \\ x_i^2 \\ x_i x_4 \\ x_4^2 \end{pmatrix} \ (\forall \boldsymbol{x}), \\ & \boldsymbol{V}_j \succeq \boldsymbol{O}, \boldsymbol{W}_j \succeq \boldsymbol{O} \ (j = 1, 2, 3). \end{array}$$

例: min $f_0(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{4}(-x_i^3)$
s.t. $f_j(x_j, x_4) = -j \times x_j^2 - x_4^2 + 1 \geq 0 \ (j = 1, 2, 3)$.

$\boldsymbol{\omega} = 2 \geq \lceil \{\max\{\text{deg } f_j(\boldsymbol{x})/2 \ (j = 0, 1, \ldots, 3)\}\rceil$, $r_j = 1$

sparse SDP 緩和 ω — Primal approach : 以下の展開・線形化：

$$\begin{array}{ll} \min & f_0(\boldsymbol{x}) \\ \text{s.t.} & \begin{pmatrix} 1 \\ x_j \\ x_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_j \\ x_4 \end{pmatrix}^T f_j(x_j, x_4) \succeq \boldsymbol{O} \ (j = 1, 2, 3), \\ & \begin{pmatrix} 1 \\ x_i \\ x_4 \\ x_i^2 \\ x_i x_4 \\ x_4^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x_i \\ x_4 \\ x_i^2 \\ x_i x_4 \\ x_4^2 \end{pmatrix}^T \succeq \boldsymbol{O} \ (i = 1, 2, 3). \end{array}$$

第２部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と２乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   - 3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   - 3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   - 4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   - 4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   - 5-1. 無制約多項式最適化の場合
   - 5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

ソフトウェア

- SparsePOP (Waki-Kim-Kojima-Muramatsu [71]) — MATLAB, dense and sparse SDP 緩和
- SeDuMi — SDP の主双対内点法

ハードウェア

- CPU — 2 x 2.66GHz Intel Xeon, 主記憶 — 4.0GB

記号： $\omega = 2 \Rightarrow$ 使われた次数最大の自乗和多項式 $\Sigma_{2\omega}$.

$$\epsilon_{\text{obj}} = \frac{|\,\text{最適値の下界値} - \text{近似最適値}\,|}{\max\{1, |\,\text{最適値の下界値}\,|\}},$$

$$\epsilon_{\text{feas}} = \text{等号，不等号条件での最大誤差}.$$

一般化 Rosenbrock 関数の最小化

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=2}^{n} \left(100(x_i - x_{i-1}^2)^2 + (1 - x_i)^2\right), \ \text{deg}\ f = 2\boldsymbol{\omega},\ \boldsymbol{\omega} = 2.$$

		計算時間，秒	
n	ϵobj	Sparse	Dense
4	4.5e-7	0.1	0.1
8	8.8e-7	0.1	0.8
16	4.0e-7	0.1	996.3
200	1.2e-5	1.4	—
400	2.3e-5	2.7	—
800	6.7e-5	5.3	—

$$\epsilon\text{obj} = \frac{|\,\text{最適値の下界値} - \text{近似最適値}\,|}{\max\{1, |\,\text{最適値の下界値}\,|\}}.$$

Chained Singular 関数の最小化

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i \in J} ((x_i + 10x_{i+1})^2 + 5(x_{i+2} - x_{i+3})^2$$
$$+(x_{i+1} - 2x_{i+2})^4 + 10(x_i - 10x_{i+3})^4), \text{ deg } f = 2\omega, \ \omega = 2.$$
$$J = \{1, 3, 5, \ldots, n-3\}$$

		計算時間，秒	
n	ϵ_{obj}	Sparse	Dense
4	1.4e-7	0.1	0.2
8	1.0e-7	0.2	1.7
16	3.9e-8	0.3	1526.8
200	4.2e-8	3.9	—
400	8.4e-8	7.9	—
800	4.4e-8	17.4	—

$$\epsilon_{\text{obj}} = \frac{|\,\text{最適値の下界値} - \text{近似最適値}\,|}{\max\{1, |\,\text{最適値の下界値}\,|\}}.$$

Global Library [21] からのテスト問題 67 題

- 変数の個数 ≤ 20, ほとんどの問題で，2 次目的関数，2 次等式，2 次不等式条件.
- 各変数の下界値，上界値を強化.
- dense SDP 緩和で近似解が得られた問題は 66/67.
- sparse SDP 緩和で近似解が得られた問題は 66/67; 解けなかった問題は異なる.
- ほとんどの問題で sparse SDP 緩和 が速い．いくつかの問題では圧倒的に速い.

記号： $\omega = 2 \Rightarrow$ 使われた次数最大の自乗和多項式 $\Sigma_{2\omega}$.

$$\epsilon_{\text{obj}} = \frac{|\,\text{最適値の下界値} - \text{近似最適値}\,|}{\max\{1, |\,\text{最適値の下界値}\,|\}},$$

$$\epsilon_{\text{feas}} = \text{等号，不等号条件での最大誤差.}$$

ex5_4_2.gms — Global Library [21] のテスト問題

$$
\begin{array}{ll}
\min & x_1 + x_2 + x_3 \\
\text{sub.to} & x_4 + x_6 \leq 400,\ -x_4 + x_5 + x_7 \leq 300, \\
& -x_5 + x_8 \leq 100,\ x_1 - x_1 x_6 + 833.33 x_4 \leq 83333.33, \\
& x_2 x_4 - x_2 x_7 - 1250 x_4 + 1250 x_5 \leq 0, \\
& x_3 x_5 - x_3 x_8 - 2500 x_5 \leq -1250000, \\
& \text{lbd}_i \leq x_i \leq \text{ubd}_i \ (i = 1, 2, \ldots, 8).
\end{array}
$$

$\omega \Rightarrow$ 使われた次数最大の自乗和多項式 $\Sigma_{2\omega}$.

	Sparse			Dense (Lasserre)		
ω	ϵobj	ϵfeas	秒	ϵobj	ϵfeas	秒
2	4.9e-10	4.5e5	0.2	2.3e-10	4.4e5	0.9
3	2.2e-9	6.4e-03	0.99	2.0e-11	2.0e-2	143.0

alkyl.gms — Global Library [21] のテスト問題

$$
\begin{array}{ll}
\text{min} & -6.3x_5x_8 + 5.04x_2 + 0.35x_3 + x_4 + 3.36x_6 \\
\text{sub.to} & -0.820x_2 + x_5 - 0.820x_6 = 0, \\
& 0.98x_4 - x_7(0.01x_5x_{10} + x_4) = 0, \\
& -x_2x_9 + 10x_3 + x_6 = 0, \\
& x_5x_{12} - x_2(1.12 + 0.132x_9 - 0.0067x_9^2) = 0, \\
& x_8x_{13} - 0.01x_9(1.098 - 0.038x_9) - 0.325x_7 = 0.574, \\
& x_{10}x_{14} + 22.2x_{11} = 35.82,\ x_1x_{11} - 3x_8 = -1.33, \\
& \text{lbd}_i \leq x_i \leq \text{ubd}_i \ (i = 1, 2, \ldots, 14).
\end{array}
$$

$\omega \Rightarrow$ 使われた次数最大の自乗和多項式 $\Sigma_{2\omega}$.

	Sparse			Dense (Lasserre)		
ω	ϵobj	ϵfeas	秒	ϵobj	ϵfeas	秒
2	1.3e-2	7.6e-1	0.5	6.6e-3	7.1e-1	25.7
3	1.8e-9	9.6e-9	4.2	out of	memory	

ex5_2_2_case1 — Global Library [21] のテスト問題

$$\begin{array}{ll} \min & -9x_1 - 15x_2 + 6x_3 + 16x_4 + 10x_5 + 10x_6 \\ \text{sub.to} & -x_3 - x_4 + x_8 + x_9 = 0,\ x_1 - x_5 - x_8 = 0, \\ & x_2 - x_6 - x_9 = 0,\ x_7x_8 - 2.5x_1 + 2x_5 \leq 0, \\ & x_7x_9 - 1.5x_2 + 2x_6 \leq 0, \\ & x_7x_8 + x_7x_9 - 3x_3 - x_4 = 0, \\ & \text{lbd}_i \leq x_i \leq \text{ubd}_i\ (i = 1, 2, \ldots, 9). \end{array}$$

$\omega \Rightarrow$ 使われた次数最大の自乗和多項式 $\Sigma_{2\omega}$.

	Sparse			Dense (Lasserre)		
ω	ϵobj	ϵfeas	秒	ϵobj	ϵfeas	秒
2	8.8e-4	1.8e+2	1.3	4.6e-7	1.3e-2	1.1
3	9.3e-7	8.3e-2	6.7	2.8e-10	6.9e-3	456.5

最適制御問題 [14] に対する sparse SDP 緩和

$$\left.\begin{array}{ll} \min & \dfrac{1}{M}\displaystyle\sum_{i=1}^{M-1}\left(y_i^2 + x_i^2\right) \\ \text{s.t.} & y_{i+1} = y_i + \dfrac{1}{M}(y_i^2 - x_i), \quad (i = 1, \ldots, M-1), \quad y_1 = 1. \end{array}\right\}$$

$\omega = 2 \Rightarrow$ 使われた次数最大の自乗和多項式 $\Sigma_{2\omega}$.

M	変数の個数	ϵobj	ϵfeas	秒
600	1198	3.4e-08	2.2e-10	3.4
800	1598	5.9e-08	1.6e-10	3.8
1000	1998	6.3e-08	2.7e-10	5.0

$$\epsilon_{\text{obj}} = \frac{|\,\text{最適値の下界値} - \text{近似最適値}\,|}{\max\{1, |\,\text{最適値の下界値}\,|\}},$$

$$\epsilon_{\text{feas}} = \text{等号条件での最大誤差}.$$

微分代数方程式

$$\frac{dy_1(t)}{dt} = y_3(t), \;\; y_2(t)(1 - y_2(t)) = 0,$$

$$y_1(t)y_2(t) + (1 - y_2(t))y_3(t) - t = 0, \;\; y_1(0) = y_1^0 \text{ (初期条件)}.$$

$y_1, \; y_2, \; y_3 : [0,2] \to \mathbb{R}$: 未知関数, t : 独立変数

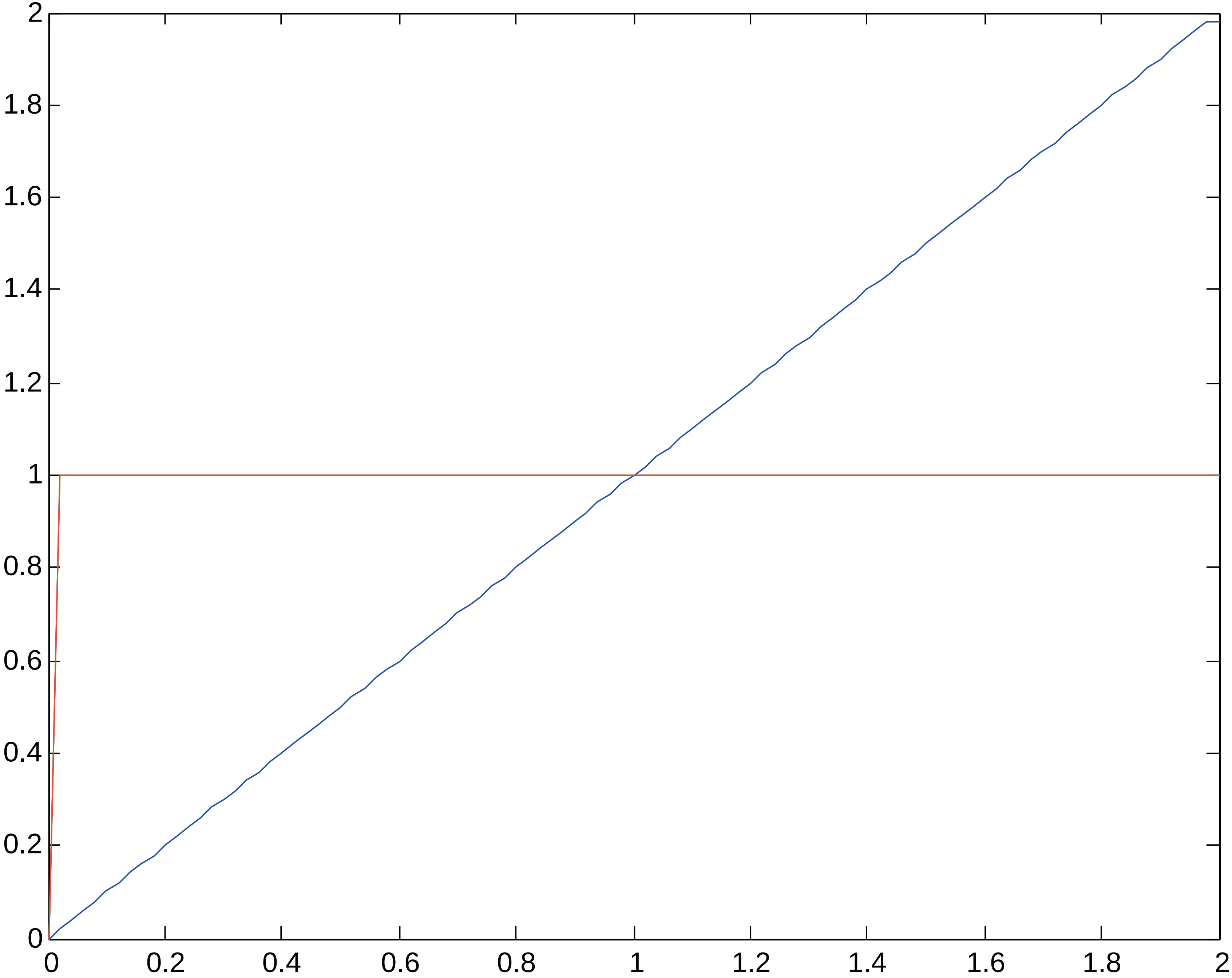
既知な 2 つの解: $\boldsymbol{y}(t) = (t, 1, 1), \;\; \boldsymbol{y}(t) = (y_1^0 + t^2, 0, t)$

$\Downarrow$ 離散化 ($\Delta t = 0.02$) ＋目的関数

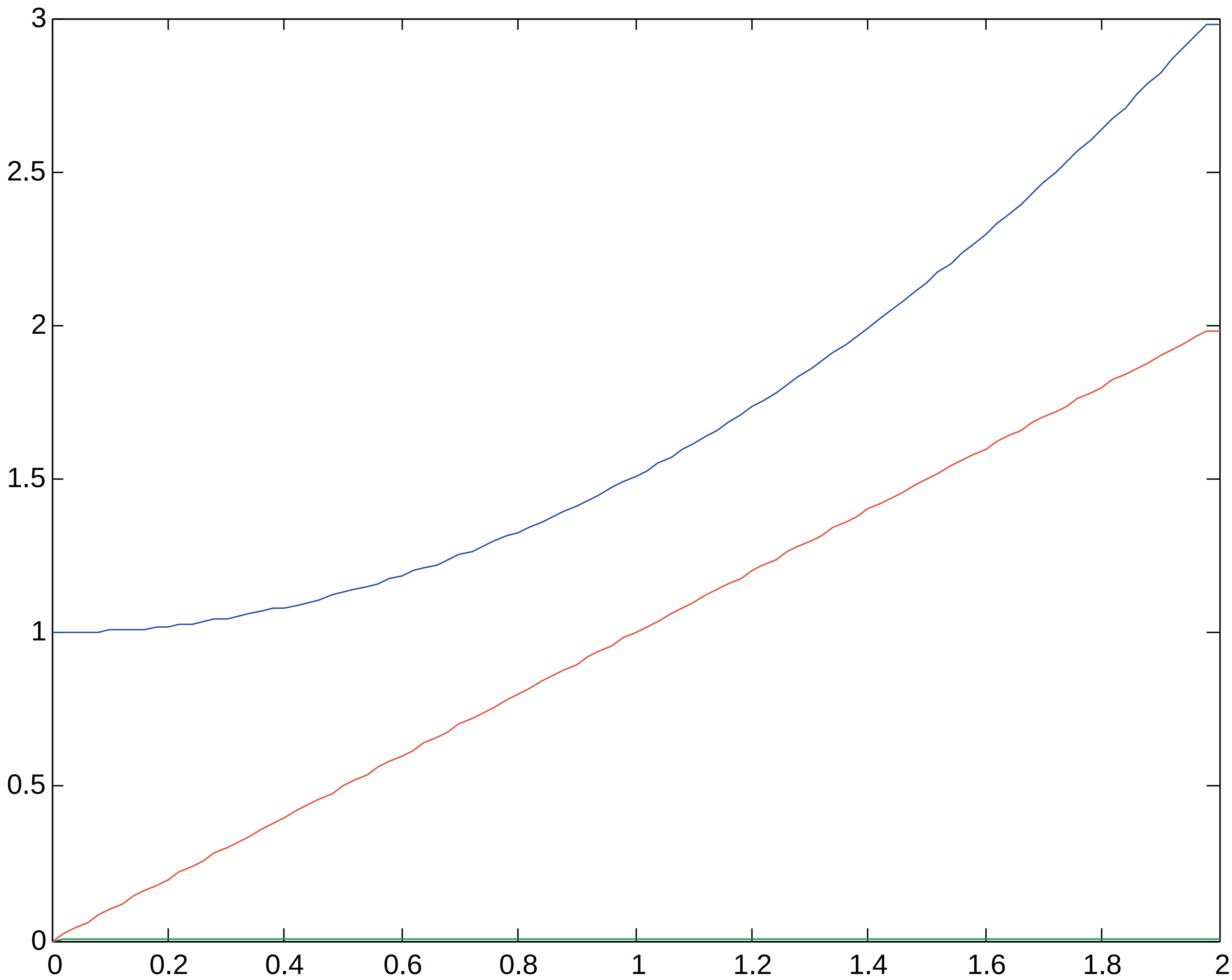
多項式最適化問題 ($n = 297$)

$\boldsymbol{\omega} = 2 \Rightarrow$ 使われた次数最大の自乗和多項式 $\Sigma_{2\boldsymbol{\omega}}$.

y_1^0	目的関数	relax. order r	秒
0	$\sum y_2(t_i) \uparrow$	2	30.9
1	$\sum y_1(t_i) \uparrow$	2	33.9



既知な解の 1 つ　$\boldsymbol{y}(t) = (t, 1, 1)$, を近似



既知な解の 1 つ　$\boldsymbol{y}(t) = (y_1^0 + t^2, 0, t)$ を近似

第２部 多項式最適化問題への応用

1. 多項式最適化問題
2. 非負多項式と２乗和多項式 (SOS)
3. 無制約多項式最適化問題
   3-1. SOS 緩和 — Dual approach
   3-2. SOS 緩和の SDP への変換
   3-3. SDP 緩和 — Primal approach
4. 不等式制約条件付き多項式最適化問題
   4-1. SOS 緩和 — Dual approach
   4-2. SDP 緩和 — Primal approach
5. 疎性の活用
   5-1. 無制約多項式最適化の場合
   5-2. 不等式制約条件付き多項式最適化の場合
6. 数値計算結果
7. おわりに

(a) Lasserre’s SDP 緩和 [41]
— 理論的な収束，しかし，実用上は膨大な計算量が必要

(b) Sparse SDP 緩和 [36, 30, 72]
= Lasserre’s SDP 緩和 + sparsity
— 少ない計算量，より大きな POP, 理論的な収束 [42]

(c) (Sparse) SDP 緩和を解く際の数値的な安定性

(d) 大規模 POP $\Rightarrow$ 大規模 (Sparse) SDP 緩和
$\Rightarrow$ より大規模な SDP の解法，並列計算

(e) 応用

- 多項式 SDP [27, 29, 33, 38, 39]
  — システムと制御への応用
- 確率過程，確率を含んだ最適化問題
  [6, 7, 8, 44, 45, 46, 84]
- 偏微分方程式，微分代数方程式，最適制御 [42, 50]
-

References

[1] F. Alizadeh, J.-P.A. Haeberly and M.L. Overton, Primal-dual interior-point methods for semidefinite programming: convergence rates, stability and numerical results, *SIAM J. on Optim.*, 8 (1998) 746–768.

[2] S. J. Benson, Parallel Computing on Semidefinite Programs, Preprint ANL/MCS-P939-0302, http://www.msc.anl.gov/∼benson/dsdp/pdsdp.ps (2002).

[3] S. J. Benson, Y. Ye and X. Zhang, Solving large-scale sparse semidefinite programs for combinatorial optimization, *SIAM J. on Optim*, 10 (2000) 443–461.

[4] A. Ben-Tal and A. Nemirovski, Robust convex optimization, *Math. of Oper. Res.*, 23 (1998) 769–805.

[5] A. Ben-Tal, M. Kocava, A. Nemirovski, and J. Zowe, Free material optimization via semidefinite programming: the multiload case with contact conditions, *SIAM J. on Optim.*, 9 (1999) 813–832.

[6] D. Bertsimas, K. Natara jan, and C.P. Teo, Probabilistic combinatorial optimization: Moments, semidefinite programming, and asymptotic bounds, *SIAM J. on Optim*, 15 (2004) 185?209.

[7] D. Bertsimas and I. Popescu, On the relation between option and stock prices: A convex optimization approach, *Operations Research*, 50 (2002) 358?374.

[8] D. Bertsimas and J. Sethuraman, Moment problems and semidefinite programming, in *Semidefinite programming*, H. Wolkowicz, R. Saigal and L. Vandenberghe, eds., 469–509, 2000.

[9] B. Borchers, SDPLIB (SDP test problems), http://infohost.nmt.edu/∼borchers/sdplib.html.

[10] B. Borchers, CSDP 2.3 user's guide, *Optimization Methods and Software*, 11 & 12 (1999) 597–611. Available at http://www.nmt.edu/˜borchers/csdp.html.

[11] B. Borchers and J. Young, Implementation of a primal-dual method for SDP on a parallel architecture, Dept. of Mathematics, New Mexico Tech, Socorro, NM 87801, September 2005.

[12] S. Boyd, L. El Ghaui, E. Feron and V. Balakrishnan, *Linear Matrix Inequalities in System and Control Theory*, SIAM, Philadelphia, 1994.

[13] S. Burer and R.D.C. Monteiro, A nonlinear programming algorithm for solving semidefinite programs via low-rank factorization, *Math. Prog.*, 95 (2003) 329–357.

[14] T. F. Coleman and A. Liao, An efficient trust region method for unconstrained discrete-time optimal control problems, *Comput. Optim. Appl.*, 4 (1995) 47–66.

[15] L. Faybusovich, Linear systems in Jordan algebra and primal-dual interior-point algorithms, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 86 (1997) 149–75.

[16] K. Fujisawa, M. Kojima and K. Nakata, Exploiting sparsity in primal-dual interior-point methods for semidefinite programming, *Math. Prog.*, 79 (1997) 235–253.

[17] K. Fujisawa, M. Fukuda, M. Kojima and K. Nakata, Numerical evaluation of SDPA (SemiDefinite Programming Algorithm), in: H. Frenk, K. Roos, T. Terlaky and S. Zhang eds., *High Performance Optimization*, (Kluwer Academic Press, 2000) 267–301.

[18] K. Fujisawa, M.Fukuda, Y.Futakata, K.Kobayashi, M.Kojima, K.Nakata, M.Nakata, M.Yamashita, SDPA Online Homepage, http://homepage.mac.com/klabtitech/sdpa-homepage/

[19] M. Fukuda, M. Kojima, K. Murota and K. Nakata, Exploiting sparsity in semidefinite programming via matrix completion I: General framework, *SIAM J. on Optim.*, 11 (2000) 647–674.

[20] M. Fukuda, B.J. Braams, M. Nakata, M.L. Overton, J.K. Percus,M. Yamashita and Z. Zhao, Large-scale semidefinite programs in electronic structure calculation, B-413, Dept. of Math. and Comp. Sciences, Tokyo Inst. of Tech., Meguro, Tokyo 152-8552, Feb. 2005.

[21] Global Library, http://www.gamsworld.org/global/globallib.htm.

[22] M. X. Goemans and D. P. Williamson, Improved approximation algorithms for maximum cut and satisfiability problems using semidefinite programming, *Journal of the ACM*, 42 (1995) 1115–1145.

[23] C. Helmberg, SDP home page, http://www-user.tu-chemnitz.de/∼helmberg/semidef.html

[24] C. Helmberg and F. Rendl, A spectral bundle method for semidefinite programming, *SIAM J. on Optim.*, 10 (2000) 673–696.

[25] C. Helmberg, F. Rendl, R. J. Vanderbei and H. Wolkowicz, An interior-point method for semidefinite programming, *SIAM J. on Optim.*, 6 (1996) 342–361.

[26] D. Henrion and J.-B. Lasserre, GloptiPoly: Global optimization over polynomials with Matlab and SeDuMi, *ACM Trans. Math. Software*, 29 (2003) 165–194.

[27] D. Henrion and J. B. Lasserre, Convergent relaxations of polynomial matrix inequalities and static output feedback, *IEEE Transactions on Automatic Control*, 51 (2006) 192–202.

[28] D. Henrion and J.-B. Lasserre, Detecting global optimality and extracting solutions in Glop- tiPoly, in Positive Polynomials in Control, D. Henrion and A. Garulli, eds., *Lecture Notes in Control and Inform. Sci.* 312, Springer-Verlag, Berlin, 2005, pp. 293?310.

[29] C. W. J. Hol and C. W. Scherer, Sum of squares relaxations for polynomial semidefinite programming, *Proc. Symp. on Mathematical Theory of Networks and Systems (MTNS)*, Leuven, Belgium, 2004.

[30] S. Kim, M. Kojima and H. Waki, Generalized Lagrangian Duals and Sums of Squares Relaxations of Sparse Polynomial Optimization Problems, *SIAM J. on Optim.*, 15 (2005) 697–719.

[31] E. de. Klerk, T. Terlaky and K. Roos, Self-dual embeddings, in H. Wolkowicz, R. Saigal and L. Vandenberghe, eds., *Handbook of Semidefinite Programming, Theory, Algorithms, and Applications*, Kluwer Academic Publishers, Massachusetts (2000).

[32] M. Kockvara, http://www2.am.uni-erlangen.de/∼kocvara/pennon/

[33] M. Kojima, Sums of Squares Relaxations of Polynomial Semidefinite Programs, B-397, Dept. of Math. and Comp. Science, Tokyo Institute of Technology, Meguro, Tokyo 152-8552, November 2003.

[34] M. Kojima, Tutorial lectures "Introduction to semidefinite programs, Semidefinite Programming and Its Applications", Singapore, January 9-13, 2006. http://www.is.titech.ac.jp/∼kojima/talkJ.html

[35] M. Kojima, S. Kim and H. Waki, A general framework for convex relaxation of polynomial optimization problems over cones, *Journal of Operations Research Society of Japan*, 46 (2003) 125–144.

[36] M. Kojima, S. Kim and H. Waki, Sparsity in Sums of Squares of Polynomials, *Math. Prog.* 103 (2005) 45–62.

[37] M. Kojima, S. Shindoh and S. Hara, Interior-point methods for the monotone semidefinite linear complementarity problem in symmetric matrices, *SIAM J. on Optim.*, 7 (1997) 86–125.

[38] M. Kojima and M. Muramatsu, An Extension of Sums of Squares Relaxations to Polynomial Optimization Problems over Symmetric Cones, *Math. Prog.*, 110 (2007) 315–336.

[39] M. Kojima and M. Muramatsu, A Note on Sparse SOS and SDP Relaxations for Polynomial Optimization Problems over Symmetric Cones, *Computational Optimization and Applications*, to appear.

[40] M. Kojima, M. Shida and S. Shindoh, Local convergence of predictor-corrector infeasible-interior-point algorithms for SDPs and SDLCPs, *Math. Prog.*, 80 (1998) 129–161.

[41] J. B. Lasserre, Global optimization with polynomials and the problems of moments, *SIAM J. on Optim.*, 11 (2001) 796–817.

[42] J. B. Lasserre, Convergent Semidefinite Relaxation in Polynomial Optimization with Sparsity, *SIAM J. on Optim.*, to appear.

[43] J. B. Lasserre, D. Henrion, C. Prieur, E. Tr?lat, Nonlinear optimal control via occupation measures and LMI-relaxations, to be registered as a LAAS-CNRS report, March 2007.

[44] J. B. Lasserre and T. Prieto-Rumeau, SDP vs. LP Relaxations for the moment approach in some performance evaluation problems, *Stochastic Models*, 20 (2004) 439–456.

[45] J.B. Lasserre and T.P. Rumeau, SDP vs. LP relaxations for the moment approach in some performance evaluation problems, *Stochastic Models*, 19 (2003) 1?27.

[46] J.B. Lasserre, T.P. Rumeau and M. Zervos, Pricing a class of exotic options via moments and SDP relaxations, *Mathematical Finance*, 16 (2006) 469?494.

[47] L. Lovasz and A. Schrijver, Cones of matrices and set-functions and 0-1 optimization, *SIAM J. on Optim.*, 1 (1991) 166–190.

[48] Z. Lu, A. Nemirovski and R.D.C. Monteiro. Large-Scale Semidefinite Programming via Saddle Point Mirror-Prox Algorithm, Technical report, School of Industrial and Systems Engineering, Georgia Institute of Technology, Atlanta, Georgia 30332, USA, November, 2004.

[49] Z.-Q. Luo, J. F. Sturm and S. Zhang, Conic convex programming and self-dual embedding, *Optimization Methods and Software*, 14 (2000) 169–218.

[50] M. Mevissen, M. Kojima, J. Nie and N. Takayama, Solving partial differential equations via sparse SDP relaxations, B-442, Dept. of Math. and Comp. Sciences, Tokyo Institute of Technology, Oh-Okayama, Meguro, Tokyo 152-8552, June 2007.

[51] R. D. C. Monteiro, Primal-dual path-following algorithms for semidefinite programming, *SIAM J. on Optim.*, 7 (1997) 663–678.

[52] R. D. C. Monteiro and Y. Zhang, A unified analysis for a class of a new family of primal-dual interior-point algorithms for semidefinite programming, *Math. Prog.*, 81 (1998) 281–299.

[53] R.D.C. Monteiro, First- and second-order methods for semidefinite programming, *Math. Prog.*, 97 (2003) 209–244.

[54] K. Nakata, K. Fujisawa, M. Fukuda, M. Kojima and K. Murota, Exploiting sparsity in semidefinite programming via matrix completion II: Implementation and numerical results, *Math. Prog.*, 95 (2003) 303–327.

[55] K. Nakata, M. Yamashita, K. Fujisawa and M. Kojima, A parallel primal-dual interior-point method for semidefinite programs using positive definite matrix completion, *Parallel Computing*, 32 (2006) 24–43.

[56] M. V. Nayakkankuppam. Solving Large-Scale Semidefinite Programs in Parallel, Technical Report, Department of Mathematics and Statistics, University of Maryland, Baltimore County, March 2005.

[57] NEOS Solver, http://neos.mcs.anl.gov/neos/solvers/index.html

[58] Yu. E. Nesterov and A. Nemirovski, *Interior Point Polynomial Algorithms in Convex Programming*, SIAM Publication, Philadelphia, 1994.

[59] Yu. E. Nesterov and M. J. Todd, Primal-dual interior-point methods for self-scaled cones, *SIAM J. on Optim.*, 8 (1998) 324–364.

[60] P. A. Parrilo, Semidefinite programming relaxations for semialgebraic problems', *Math. Prog.*, 96 (2003) 293–320.

[61] S. Prajna, A. Papachristodoulou, and P. A. Parrilo, SOSTOOLS: Sum of Squares Optimization Toolbox for MATLAB—User's Guide, Control and Dynamical Systems, California Institute of Technology, Pasadena, CA, 2002; available online from http://www.mit.edu/∼parrilo/sostools/.

[62] M. Putinar, Positive polynomials on compact semi-algebraic sets, *Indiana University Mathematics Journal*, 42 (1993) 969–984.

[63] S. Schmieta and F. Alizadeh, Associative and Jordan algebras, and polynomial time interior-point algorithms for symmetric cones, *Mathematics of Operations Research*, 26 (2001) 543–564.

[64] J. F. Sturm, Using SeDuMi 1.02, a MATLAB toolbox for optimization over symmetric cones, *Optimization Methods and Software*, 11 & 12 (1999) 625–653.

[65] M. J. Todd, A study of search directions in primal-dual interior-point methods for semidefinite programming, *Optimization Methods and Software*, 11 & 12 (199) 1–46.

[66] M. J. Todd, Semidefinite optimization, *Acta Numerical* 10 (2001) 515–560.

[67] K. C. Toh, Solving large scale semidefinite programs via an iterative solver on the augmented systems, *SIAM J. on Optim.*, 14 (2004) 670–698.

[68] K.C. Toh and M. Kojima, Solving some large scale semidefinite programs via the conjugate residual method, *SIAM J. on Optim.*, 12 (2002) 669–691.

[69] K. C. Toh, M. J. Todd and R. H. Tütüncü, SDPT3 — a MATLAB software package for semidefinite programming, version 1.3, *Optimization Methods and Software*, 11 & 12 (1999) 545–581. Available at http://www.math.nus.edu.sg/˜mattohkc.

[70] L. Tuncel, Potential reduction and primal-dual methods, in H. Wolkowicz, R. Saigal and L. Vandenberghe, eds., *Handbook of Semidefinite Programming, Theory, Algorithms, and Applications*, Kluwer Academic Publishers, Massachusetts (2000).

[71] H. Waki, S. Kim, M. Kojima and M. Muramatsu, SparsePOP : a Sparse Semidefinite Programming Relaxation of Polynomial Optimization Problems, B-414, Dept. of Math. and Comp. Sciences, Tokyo Institute of Technology, Meguro, Tokyo, 152-8552, Japan, March 2005, Revised June 2007.

[72] H. Waki, S. Kim, M. Kojima and M. Muramatsu, Sums of squares and semidefinite programming relaxations for polynomial optimization problems with structured sparsity, *SIAM J. on Optim.*, 17 (2006) 218–242.

[73] L. Vandenberghe and S. Boyd, Semidefinite Programming, *SIAM Review* 38 (1996) 49–95.

[74] H. Wolkowicz, R. Saigal and L. Vandenberghe, eds., *Handbook of Semidefinite Programming, Theory, Algorithms, and Applications*, *Kluwer Academic Publishers*, Massachusetts (2000).

[75] H. Wolkowicz, http://liinwww.ira.uka.de/bibliography/Math/psd.html

[76] M. Yamashita, K. Fujisawa and M. Kojima, Implementation and Evaluation of SDPA6.0 (SemiDefinite Programming Algorithm 6.0), *Optimization Methods and Software*, 18 (2003) 491–505.

[77] M. Yamashita, K. Fujisawa and M. Kojima, SDPARA: SemiDefinte Programming Algorithm Parallel version, *Parallel Computing*, 29 (2003) 1053–1067.

[78] Y. Ye and K. Anstreicher, On quadratic an d$O(nL)$ convergence of a predictor-corrector algorithm for LCP, *Math. Prog.*, 62 (1993) 537–551.

[79] Z. Zhao, B.J. Braams, M. Fukuda, M.L. Overton and J.K. Percus, The reduced density matrix method for electronic structure calculations and the role of three-index representability, *The Journal of Chemical Physics*, 120 (2004) 2095–2104.

[80] 小島政和, 半正定値計画問題と内点法, 応用数理, 6 (1996) 270–279.

[81] 小島政和, 半正定値計画の組み合わせ最適化への応用に向けて，オペレーションズ・リサーチ, 40 (1997) 216–221.

[82] 小島政和, 土谷隆, 水野眞治, 矢部博, 内点法, 朝倉書店, 2001.

[83] 小島政和, 脇隼人, 多項式最適化問題に対する半正定値計画緩和, システム／制御／情報, 48 (2004) 477–482.

[84] K. Suzuki, N. Miyoshi and M. Kojima, 拡散過程の生存確率に対する半正定値計画を用いた数値計算手法, B-438, Dept. of Math. and Comp. Sciences, Tokyo Institute of Technology, Meguro, Tokyo, 152-8552, Japan, January 2007