

非負半正定値計画問題に対する主バリア関数法

筑波大学大学院システム情報工学研究科 松川 恭明 (Yasuaki Matsukawa)
Graduate School of Systems and Information Engineering,
University of Tsukuba
筑波大学大学院システム情報工学研究科 吉瀬 章子 (Akiko Yoshise)
Graduate School of Systems and Information Engineering,
University of Tsukuba

1 はじめに

本稿では非負半正定値計画問題に対するアルゴリズムの提案を行う。近年の研究で、非凸二次 0-1 混合線形計画問題が等価な完全正値錐線形計画問題として定式化できる事が明らかになった [2]。さらに、その定式化された問題を非負半正定値計画問題に緩和する手法が提案されている [2, 7]。非負半正定値計画問題は以下のように与えられる。

$$\begin{array}{ll} \min & \langle C, X \rangle \\ \text{s.t.} & A(X) = b \\ & X \in S_+^n \cap \mathbb{R}_+^{n \times n} \end{array}$$

ここで、 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は行列の内積 ($\langle C, X \rangle := \text{trace}(C^T X)$), $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $A(X)$ は $\mathbb{R}^{n \times n}$ から $\mathbb{R}^m$ への線形写像であり、 S_+^n は n 次半正定値行列錐 ($S_+^n := \{X | X = X^T, \forall y \in \mathbb{R}_+^n, y^T X y \geq 0\}$), $\mathbb{R}_+^{n \times n}$ は n 次非負対称行列錐を表す。この問題は等価な半正定値計画問題へと帰着できる。その性質を用いて、非負半正定値緩和の効果を計算機実験により確かめた。その結果非負半正定値緩和が強力である事が明らかになった [6]。しかし、帰着された半正定値計画問題は非常に大きくなるため、必ずしも実用的ではない。そこで、非負半正定値計画問題を半正定値計画問題に帰着せず、直接解くためのアルゴリズムを提案する。

本稿の構成を述べる。2 節では非負半正定値計画問題に関する性質を述べる。3 節では非負半正定値緩和を二次割当問題に対して適用した結果を紹介する。4 節で非負半正定値計画問題に対するアルゴリズムについて提案手法を説明し、5 節で結論を述べる。

2 非負半正定値計画問題

この節では非負半正定値計画問題について説明する。この問題は、錐線形計画問題というクラスに含まれる。錐線形計画の主問題 (CP) と双対問題 (CD) は以下のように記述される。

$$(\text{CP}) \quad \begin{array}{ll} \min & \langle c, x \rangle \\ \text{s.t.} & A(x) = b \\ & x \in \mathcal{K} \end{array}$$

$$(CD) \quad \begin{cases} \min & b^T y \\ \text{s.t.} & \mathcal{A}^*(y) + z = c \\ & z \in \mathcal{K}^* \end{cases}$$

ここで, $\mathcal{A}^*(y)$ は $\mathcal{A}$ に対する随伴作用素である. $\mathcal{K}$ は閉凸錐であり, $\mathcal{K}^*$ は $\mathcal{K}$ に対する双対錐である ($\mathcal{K}^* := \{x \mid \forall y \in \mathcal{K}, \langle x, y \rangle \geq 0\}$). 非負半正定値行列錐 $\mathcal{S}_+^n \cap \mathbb{R}_+^{n \times n}$ に対する双対錐は $\mathcal{S}_+^n + \mathbb{R}_+^{n \times n}$ で与えられるため [6], 非負半正定値計画問題の主問題と双対問題はそれぞれ,

$$\begin{cases} \min & \langle C, X \rangle \\ \text{s.t.} & \mathcal{A}(X) = b \\ & X \in \mathcal{S}_+^n \cap \mathbb{R}_+^{n \times n} \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \min & b^T y \\ \text{s.t.} & \mathcal{A}^*(y) + Z = C \\ & Z \in \mathcal{S}_+^n + \mathbb{R}_+^{n \times n} \end{cases} \quad (2)$$

と記述される. この他, 近年研究が行われている錐として, 共正値行列錐 [4], 完全正値行列錐 [1] がある. これらは相互に双対錐の関係にあり, 共正値行列錐 $\mathcal{C}_n$, 完全正値行列錐 $\mathcal{C}_n^*$ はそれぞれ以下のように定義される.

$$\mathcal{C}_n := \{X \mid X = X^T, \forall y \in \mathbb{R}_+^n, y^T X y \geq 0\},$$

$$\mathcal{C}_n^* := \{X \mid \exists m, y_1, \dots, y_m \in \mathbb{R}_+^n, X = \sum_{k=1}^m y_k y_k^T\}.$$

以上の4つの錐には以下の包含関係が成立する.

$$\mathcal{C}_n^* \subseteq (\mathcal{S}_+^n \cap \mathbb{R}_+^{n \times n}) \subseteq \mathcal{S}_+^n \subseteq \mathcal{C}_n \quad (3)$$

性質 (3) は, 完全正値行列錐上の問題に対して非負半正定値緩和が適用できることを意味している. この緩和が適用可能な問題を次節で説明する.

3 二次割当問題に対する非負半正定値緩和

ここでは Burer[2] による結果を紹介する. 以下の非凸二次0-1 混合線形計画問題 (P) を考える.

$$(P) \quad \begin{cases} \min & x^T Q x + 2c^T x \\ \text{s.t.} & x \in \mathbb{R}_+^n \\ & a_i^T x = b_i \quad \forall i = 1, \dots, m \\ & x_j \in \{0, 1\} \quad \forall j \in B \end{cases}$$

ここで, B は0-1 変数を示す所与の添字集合である ($B \subseteq \{1, \dots, n\}$). また, 問題 (P) に対して次の仮定をおく.

$$x \in \{x \geq 0 \mid a_i^T x = b_i, \forall i = 1, \dots, m\} \implies 0 \leq x_j \leq 1, \forall j \in B \quad (4)$$

問題 (P) は非凸最適化問題である。次に以下の完全正値錐 $\mathcal{C}_n^*$ 上の最適化問題 (C) を考える。

$$(C) \quad \begin{cases} \min & \langle Q, X \rangle + 2c^T x \\ \text{s.t.} & a_i^T x = b_i \quad \forall i = 1, \dots, m \\ & a_i^T X a_i = b_i^2 \quad \forall i = 1, \dots, m \\ & x_j = X_{jj} \quad \forall j \in B \\ & \begin{pmatrix} 1 & x^T \\ x & X \end{pmatrix} \in \mathcal{C}_{1+n}^* \end{cases}$$

完全正値錐 $\mathcal{C}_n^*$ は凸集合であるので、問題 (C) は凸最適化問題である。論文 [2] では仮定 (4) の下で、問題 (P) の許容解集合の凸包が問題 (C) の許容解集合と一致し、さらに最適解も一致することを示している。問題 (C) は二次割当問題を含んでいる。二次割当問題は与えられた 2 つの行列 A, B に対して $\text{trace}(AXBX^T)$ を最小化する置換行列 X を求める問題である。二次割当問題は、以下のように等価な完全正値錐上の最適化問題 (QAP_{CP}) として記述できる。

$$(QAP_{CP}) \quad \begin{cases} \min & \langle B \otimes A, Y \rangle \\ \text{s.t.} & \sum_i Y^{ii} = I \\ & \langle I, Y^{ij} \rangle = \delta_{ij} \quad \forall i = 1, \dots, n \quad \forall j = 1, \dots, n \\ & \langle ee^T, Y \rangle = n^2 \\ & Y = \begin{pmatrix} Y^{11} & \dots & Y^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ Y^{n1} & \dots & Y^{nn} \end{pmatrix} \in \mathcal{C}_{n^2}^* \end{cases}$$

ここで、 $e \in \mathbb{R}^{n^2}$ は全ての要素が 1 であるベクトル、 $Y^{ij} \in \mathbb{R}^{n \times n} (\forall i, j = 1, \dots, n)$ である。(QAP_{CP}) に対して、非負半正定値緩和を適用した。以下は二次割当問題のライブラリ [3] のインスタンスに対して、非負半正定値緩和を適用した計算機実験の結果である。特に、インスタンス Rou12 に対する結果は以下ようになった。

$$X^* = \begin{pmatrix} .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .9997 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 \\ .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .9998 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 \\ .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .9998 & .0000 \\ .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .9997 & .0000 & .0000 & .0000 \\ .0000 & .9998 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 \\ .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .9998 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 \\ .0000 & .0000 & .9998 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 \\ .9996 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0002 & .0000 \\ .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .9997 \\ .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .9998 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 \\ .0000 & .0000 & .0000 & .9997 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 \\ .0002 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .0000 & .9996 & .0000 & .0000 \end{pmatrix}$$

Rou12 に対する最適解 X_{opt} は以下であることが知られている [3]。

$$X_{\text{opt}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

行列 X^* は X_{opt} とほぼ一致していることがわかる. このインスタンス以外にも, いくつかの規模の小さいインスタンスに対しては同様に元問題の最適解に非常に近い解が得られた. このように非負半正定値緩和は強力である可能性がある.

しかし, 元問題の変数行列が $n \times n$ 行列であるとき, 等価な半正定値計画問題の変数行列は $n^4 \times n^4$ 行列となり非常に大きな問題となる. 必要とされる計算時間やメモリの容量を考慮すると, 大規模な問題に対して半正定値計画問題への帰着を用いる手法は実用的でない. そこで等価な半正定値計画問題に帰着しない非負半正定値計画問題の解法を提案する.

4 アルゴリズム

本節では非負半正定値計画問題に対するアルゴリズムを提案する. 非負半正定値行列錐は, その錐と双対錐が一致する自己双対性をもたず, 問題 (1) とその双対問題 (2) に主双対内点法を直接適用することはできない. 本稿では, 主問題 (1) のみに着目し Newton 方向を利用する非許容主内点法を提案する. 非負半正定値行列錐の内部に点列 $\{X_k\}$ を生成するため, 以下のバリア関数 $\phi: S_{++}^n \cap \mathbb{R}_{++}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}$ を導入する.

$$\phi(X) := -(\log \det X + \sum_{i,j=1}^n \log X_{ij})$$

この関数は非負半正定値行列錐に対する自己整合障壁関数であることが知られている [8]. 正の実数値をとるバリアパラメータ μ を用いて $\phi(X)$ を目的関数に組み込んだ問題を考える.

$$\begin{cases} \min & f(X) = \langle C, X \rangle + \mu \phi(X) \\ \text{s.t.} & \mathcal{A}(X) = b \end{cases} \quad (5)$$

μ を 0 に近づくよう更新しながら問題 (5) を繰り返し解くことによって元問題 (1) の最適解を探索する.

問題 (1) に対して内点法を実行するためには錐制約と線形制約を同時に満たす初期許容内点を見つける必要があるが, 問題のインスタンスによってはそのような初期許容内点を見つける事が難しい. そこで, 錐制約のみの内点である点列を発生させ, X_k における残差 $r_k := b - \mathcal{A}(X_k)$ と目的関数値を同時に減少させる探索方向を使用する. 初期許容内点として,

$$X_0 = pI + qee^T \quad (I: \text{単位行列}, e: \text{全ての要素が1であるベクトル}, p > 0, q > 0) \quad (6)$$

とおくと, X_0 は全ての要素が正である正定値行列になるため非負半正定値行列錐の内点になる. 各 X_k に対して次の方程式系 (7) を解くことにより線形制約 $A(X) = b$ の核空間上に射影された Newton 方向を計算し, それを探索方向として使用する.

$$\begin{cases} \nabla^2 f(X_k) \Delta X_k + \nabla f(X_k) = A^*(y) \\ A(\Delta X_k) = r_k \end{cases} \quad (7)$$

この連立方程式の解 $(y, \Delta X_k)$ を使い $X_{k+1} = X_k + \alpha_k \Delta X_k$ と X_k を更新する. ただし, α_k は k 回目の反復における探索方向のステップサイズである. α_k を選ぶ基準として Armijo 条件を採用する. 具体的には, 定数 $\xi \in (0, 1)$ を用い, 次の3つの式を満足する α_k を求める.

$$\begin{cases} f(X_k + \alpha_k \Delta X_k) \leq f(X_k) + \xi \alpha_k \langle \nabla f(X_k), \Delta X_k \rangle \\ f(X_k + \alpha_k \Delta X_k) \in \text{int}(S_+^n \cap \mathbb{R}_+^{n \times n}) \\ \alpha_k \in (0, 1) \end{cases} \quad (8)$$

このステップサイズを用いると k 回の反復の後, 初期残差 $r_0 = b - A(X_0)$ と比較して

$$r_k = r_0 \prod_{j=0}^{k-1} (1 - \alpha_j) \quad (9)$$

まで残差が減少する.

停止条件として, 目的関数の変動と線形制約の残差が十分小さくなったときに元問題 (1) の最適解に対する近似解が得られたとしてアルゴリズムを停止させることを考える. 具体的な条件式の記述は次のようになる.

$$\frac{|\langle C, X_{k+1} \rangle - \langle C, X_k \rangle|}{\max\{1, |\langle C, X_k \rangle|\}} < \varepsilon_o \quad (10)$$

$$\|r_k\| < \varepsilon_f \quad (11)$$

アルゴリズムをまとめると以下のように記述できる.

非負半正定値計画問題 (1) に対するアルゴリズム

-
- step.0: 初期許容内点 X_0 , 初期バリアパラメータ μ_0 , 停止条件パラメータ $\varepsilon_o, \varepsilon_f$ の決定.
 - step.1: 暫定解 X_k が停止条件 (10), (11) 式を満たす場合, アルゴリズムの停止.
 - step.2: (7) 式により探索方向 ΔX_k を計算.
 - step.3: (8) 式を満たすステップサイズ α_k を用い, 解を $X_{k+1} = X_k + \alpha_k \Delta X_k$ と更新.
 - step.4: $0 < \mu_{k+1} < \mu_k$ となるように μ の値を更新. $k := k + 1$ において step.1 へ戻る.
-

5 まとめと結論

本稿では, 非負半正定値計画問題の性質と重要性について紹介した. 非負半正定値計画問題を等価な半正定値計画問題に帰着せず解くことにより, 大規模な組合せ最適化に対しても非負半

正定値緩和を用いて良い下界値及び解を得ることが期待できる。今後の研究の課題として、アルゴリズムにおける各種パラメータの更新方法や問題に合わせた性質の良い初期点の選び方、点列の収束性の議論があげられる。また、予備的な数値実験も必要である。

参考文献

- [1] A. Berman and N. S. Monderer. *Completely Positive Matrices*. World Scientific Publishing, 2003.
- [2] S. Burer. On the copositive representation of binary and continuous nonconvex quadratic programs. *Mathematical Programming*, vol. 120, 2009, pp.479-495.
- [3] R. E. Burkard, E. Cela, S. E. Karisch and F. Rendl. QAPLIB -A Quadratic Assignment Problem Library. <http://www.seas.upenn.edu/qaplib/>
- [4] M. Dür. Copositive Programming - a Survey. *Recent Advances in Optimization and its Applications in Engineering*, Springer, 2010, pp.3-20, available at http://www.optimization-online.org/DB_FILE/2009/11/2464.pdf
- [5] C. C. Gonzaga. On lower bound updates in primal potential reduction methods for linear programming. *Mathematical Programming*, vol. 52, 1991, pp.415-428.
- [6] Y. Matsukawa and A. Yoshise. On Optimization over the Doubly Nonnegative Cone. *Proceedings of 2010 IEEE Multi-conference on Systems and Control*, 2010, pp.13-19.
- [7] J. Povh and F. Rendl. Copositive and semidefinite relaxations of quadratic assignment problem. *Discrete Optimization*, vol. 6, 2009, pp.223-241.
- [8] J. Renegar. *A Mathematical View of Interior-point Methods in Convex Optimization*. MPS-SIAM Series on Optimization, 2001.
- [9] SDPA Online Solver. <http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/portal/>