半正定値計画と内点法

村松　正和

1. はじめに

半正定値計画問題（SemiDefinite Programming Problem；以下SDP問題と呼ぶ）とは，1990年代に現れた新しいタイプの最適化問題であり，ここしばらく研究者の間では興味の的となっている．応用も続々と発表され，また，内点法を用いて効率よく解くことができるので，「21世紀の線形計画問題」と言われることもある．しかしながら，数学的にやや高度な概念（行列の半正定値性）を用いるため，旧来の線形計画問題（以下LP問題と呼ぶ）ほどには親しみやすいわけではない．そのためか，一般のOR実務家がSDP問題を用いた，という話はあまり聞かないし，最適化パッケージやモデリング言語も，SDP問題を扱えるものは少ないようである．

SDPおよび内点法の研究者として，SDP問題がただ「難しそうだ」ということで敬遠されるのは悲しい．そこで本稿では，とりあえずSDP問題についてなるべく具体的なイメージをもっていただくことを目標とした．SDP問題と言えば「ああ，あれね」と言えるようになっていただければ，と願っている．

各節の構成は，本節と次節を除き，SDP問題に関する定義と，それに続く例題の解説の繰り返しとなっている．定義の意味を，例題によって確認することで，SDP問題に関するイメージを固めていってほしい．

SDPはLPの拡張であり，LPで成り立つほとんどの事柄が（内点法により効率よく解けることまで含めて）SDPにおいても成り立つ．しかし，ときどき成り立たない事柄もあり，そのことが落とし穴として初心者を待ち受けている．そのあたりの微妙な差異についても考えながら，読んでいってほしい．

2. 対称行列の半正定値性

実数を成分にもつ $n \times n$ 行列 X を考える．行列 X が対称であるとは，$X = X^T$ が成り立っていることである．ここで，X^T は X の転置を表す．この定義はわかりやすく，迷う人はあまりいない．

一方，対称行列 X が半正定値であるとは，多くの線形代数の教科書に書かれている通り，

$$\text{任意の } \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \text{ に対して } \boldsymbol{x}^T X \boldsymbol{x} \geq 0 \tag{1}$$

が成り立つことである．私の経験ではこの定義の時点で多くの学生が理解不能に陥る．X が対称かどうかは見ればわかる．しかし，(1)のような定義では，どうやってチェックすればいいのだ？　と考え，わからなくなる人が多いようである[1]．

もちろん，チェックの仕方がわからないことと，定義がわからないことは本来別次元の話のはずだが，いずれにせよ「チェックできないこと」が定義の理解を困難にしている．というわけなので，本稿ではもっと手軽な，チェックしやすい条件を用意した．ただし，この条件は2×2行列のときしか使えない．しかし本稿で扱う具体例では，行列といえば2×2行列しか考えないので，これで十分である．

$$\begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \text{が半正定値} \Leftrightarrow a \geq 0,\ b \geq 0,\ ab - c^2 \geq 0. \tag{2}$$

この条件を満たす2×2行列が(1)を満たすことは，おそらく高校レベルの数学である．

以下では，行列 X が半正定値であることを $X \succeq O$ と表す．右辺の O は（X と同じサイズの）ゼロ行列である．

3. SDP問題

（一般論）等式標準形のSDP問題とは，次の形をした最適化問題である：

$$\begin{aligned} &\text{最小化 } \mathrm{tr}(CX) \\ &\text{条件 } \mathrm{tr}(A_i X) = b_i (i = 1, \cdots, m),\ X \succeq O. \end{aligned} \tag{3}$$

[1] 条件(1)は，「X の固有値がすべて0以上」という条件と等価であることもよく言われることである．しかし，この定義でピンと来るようなら，そもそも定義(1)でも迷わないはずであろう．

むらまつ　まさかず
電気通信大学 電気通信学部
〒182-8585 調布市調布ヶ丘1-5-1

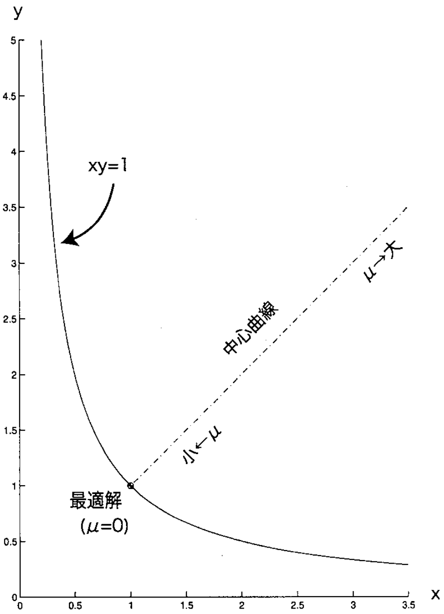

図1　問題(4)

ここで X は $n\times n$ 対称行列であり，tr は行列のトレース，$\mathrm{tr}\,V=\sum_{i=1}^{n}V_{ii}$ を表す．この問題の双対問題は

$$\text{最大化}\ \sum_{i=1}^{m}b_iu_i\quad \text{条件}\ S+\sum_{i=1}^{m}u_iA_i=C,\ S\succeq O$$

で定義される．等式標準形の LP 問題およびその双対問題が

$$\text{最小化}\ \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x}\quad \text{条件}\ \boldsymbol{a}_i^T\boldsymbol{x}=b_i(i=1,\cdots,m),\ \boldsymbol{x}\geq\boldsymbol{0},$$

$$\text{最大化}\ \sum_{i=1}^{m}b_iu_i\quad \text{条件}\ \boldsymbol{s}+\sum_{i=1}^{m}u_i\boldsymbol{a}_i=\boldsymbol{c},\ \boldsymbol{s}\geq\boldsymbol{0}$$

で表されることを考えれば，SDP 問題は LP 問題の行列変数への拡張であることが類推できるかもしれない．

(例題) 本稿では一貫して次の問題を扱う：

$$\text{最小化}\ x+y\quad \text{条件}\ xy\geq 1,\ x\geq 0,\ y\geq 0. \tag{4}$$

図1はこの問題の図である．容易にわかるように，最適解は(1,1)である．

さて(2)より，問題(4)の条件は次の 2×2 行列の半正定値条件と同値である：

$$\begin{pmatrix}x & 1\\ 1 & y\end{pmatrix}\succeq O.$$

したがって，問題(4)は次の形の SDP 問題と見なせる：

$$\text{最小化}\ \mathrm{tr}(CX)\quad \text{条件}\ \mathrm{tr}(AX)=2,\ X\succeq O, \tag{5}$$

ただし，

$$C=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\ A=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}.$$

ここで，(5)の等式条件は，行列の非対角成分を1に固定させる効果をもっている．

問題(5)の双対問題を定義通りに書けば

$$\text{最大化}\ 2u\quad \text{条件}\ S+uA=C,\ S\succeq O \tag{6}$$

となる．行列を成分ごとに書くと，条件は

$$S=\begin{pmatrix}1 & -u\\ -u & 1\end{pmatrix}\succeq O$$

ということになり，これは

$$1-u^2\geq 0$$

と同値であるので，結局双対問題は

$$\text{最大化}\ u\quad \text{条件}\ -1\leq u\leq 1 \tag{7}$$

と等価となる．最適解は $u=1$，最適値は2であり，これは主問題(4)の最適値と一致している．

以下 (x,y) で主問題(5)の実行可能解を表し，u で双対問題(6)の実行可能解を表すことにする．

4. 双対定理

(一般論) LP の場合と同様に，SDP においても次の弱双対定理が成り立つ．

弱双対定理． 主問題の実行可能解 X，双対問題の実行可能解 (u,S) に対し，

$$\mathrm{tr}(CX)\geq\sum_{i=1}^{m}b_iu_i$$

が成り立つ．■

この定理から，主問題が非有界ならば双対問題が実行不可能であることなど，主問題と双対問題の関係に関していろいろ言えることがある．

しかし，LP の場合のいわゆる双対定理，すなわち「主問題と双対問題に実行可能解があれば，最適解が存在し，最適値が一致する」は成り立たない．SDP の場合は，次の形となる．

双対定理． 主問題と双対問題に内点実行可能解が存在すれば，最適解が存在し，最適値が一致する．■

ここで SDP 問題における内点とは，「正定値行列」のことである．正定値行列とは，一般の場合で言えば

任意の $\boldsymbol{x}\neq 0$ に対して $\boldsymbol{x}^TX\boldsymbol{x}>0$

であるし，2×2 行列ならば

$$\begin{pmatrix}a & c\\ c & b\end{pmatrix}\text{が正定値}\Leftrightarrow a>0,\ b>0,\ ab-c^2>0$$

である．

LP 問題の場合には単なる実行可能解で良かったのが，SDP 問題では「内点」実行可能解でなければならないところが異なる．

(例題) 主問題の実行可能解を (x,y)，双対問題の実行可能解を u とすれば，弱双対定理は $x+y-2u\geq 0$ を表す．また，$xy>1$ なる (x,y)，および $-1<u<1$

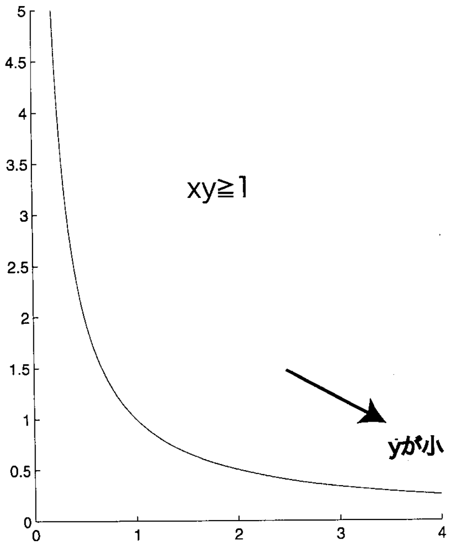

図2　y に関する最小化問題

なる u に対して

$$X=\begin{pmatrix} x & 1 \\ 1 & y \end{pmatrix},\ S=\begin{pmatrix} 1 & -u \\ -u & 1 \end{pmatrix}$$

は正定値であるので，主問題にも双対問題にも内点実行可能解が存在する．その帰結として，両者の最適値は一致し，両者に最適解が存在しているのは先に見た通りである．

問題(5)の目的関数を少し変え，

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

とする．すなわち，実行可能領域は同じで，y を最小化する問題である（図2）．この場合，目的関数値をいくらでも0に近づけることができるが，0にはできない．すなわち，最適解は存在しない．

実際，双対問題を考えると

$$\text{最大化}\ 2u \quad \text{条件}\ S=\begin{pmatrix} 0 & -u \\ -u & 1 \end{pmatrix}\succeq O$$

となるが，実行可能解は $u=0$ のみであり，このとき S は正定値ではない．すなわち，双対問題には内点実行可能解が存在しない．

また，ここでは示さないが，SDP問題の主問題と双対問題の間には，双対ギャップ（主問題と双対問題の最適値の差）がある例も知られている．

5．中心曲線

（一般論）中心曲線とは，実行可能領域内の滑らかな曲線で，最適解へ通ずる．主双対内点法においては，これを離散的に追いかけることによって最適解を求める．

一般のSDP問題(3)およびその双対問題に対する中心曲線 $\{(X(\mu), u(\mu), S(\mu)) : \mu>0\}$ は，パラメータ $\mu>0$ に対応する点が次の式で定義される．

$$\mathrm{tr}(A_iX)=b_i(i=1, \cdots, m) \tag{8}$$

$$S+\sum_{i=1}^{m} u_iA_i=C \tag{9}$$

$$XS=\mu I \tag{10}$$

$$X\succeq O, S\succeq O. \tag{11}$$

（例題）パラメータ μ に対応する点は

$$XS=\begin{pmatrix} x-u & 1-ux \\ 1-uy & y-u \end{pmatrix}=\mu\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

より，

$$x=1/u, y=1/u, 1/u-u=\mu$$

を満たす点 (x, y, u) となる．この曲線の (x, y) 部分が図1に描かれており，それは $x=y$ の直線の一部となっている．$\mu\to0$ とすれば，$u\to1$ となり，したがって $x\to1, y\to1$ となる．逆に $\mu\to\infty$ とすれば，$u\to0$ となり，$x\to\infty, y\to\infty$ となる．

6．探索方向

（一般論）SDP問題(4)およびその双対問題の実行可能解 (X, u, S) が与えられたとき，もしそれが中心曲線上の点ならば $\mathrm{tr}(XS)=\mathrm{tr}(\mu I)=n\mu$ より $\mu=\mathrm{tr}(XS)/n$ が成り立っているはずである．実際には中心曲線上になくても，現在の点 (X, u, S) に対応する中心曲線上のパラメータを $\mu=\mathrm{tr}(XS)/n$ とおき，それよりも一定比率 $\sigma(<1)$ だけ小さなパラメータに対応する中心曲線上の点を目指して探索方向を生成する．

SDPにおける主双対内点法の探索方向には実は数種類ある．そのうち，本稿ではHKM方向と呼ばれる探索方向について説明する．まず，探索方向 $(\Delta X, \Delta y, \Delta S)$ が満たすべき次の方程式を考える：

$$\mathrm{tr}(A_i\Delta X)=0\ (i=1, \cdots, m) \tag{12}$$

$$\Delta S+\sum_{i=1}^{m} \Delta u_iA_i=O \tag{13}$$

$$X\Delta S+\Delta XS=\sigma\mu I-XS. \tag{14}$$

ここで(12)，(13)はそれぞれ，探索方向にステップしたとき実行可能であるための条件であり，最後の条件(14)は(10)より導かれるものである．

当然ながら ΔX，ΔS は対称行列であるので，それぞれ $n(n+1)/2$ 個の変数をもつ．すると(12)～(14)は，変数の数が $m+n(n+1)$，方程式の数が $m+n(n+1)/2+n^2$ と，方程式の数の方が多いので，一般には解が存在しない．これは(14)において X，ΔS が対称であっても，$X\Delta S$ は一般には対称にならないことに

起因する．

この困難を克服するために，HKM 方向では相当手荒いことをやる．まず，ΔX を対称行列と見ずに，一般の行列と見る．こうすることにより，変数の数が $m+n(n+1)/2+n^2$ 個となり，方程式の数に一致する．そのように見なして得られた解を $(\Delta X, \Delta u, \Delta S)$ とすれば，ΔX は対称ではないが，これを

$$\Delta X \leftarrow (\Delta X + \Delta X^T)/2$$

と対称化することにより，実際の探索方向を得る[2]．

（例題） 探索方向の方程式(12)-(14)は

$$\mathrm{tr}(A\Delta X)=0 \tag{15}$$

$$\Delta S+\Delta uA=O \tag{16}$$

$$X\Delta S+\Delta XS=\sigma\mu I-XS \tag{17}$$

である．上の 2 式は，

$$\Delta X=\begin{pmatrix} \Delta x & \Delta w \\ -\Delta w & \Delta y \end{pmatrix}, \Delta S=\begin{pmatrix} 0 & -\Delta u \\ -\Delta u & 0 \end{pmatrix}$$

であることを意味する．さきほど述べたように，ΔX は対称行列ではなく，Δw という変数をもっている．式(17)は 4 つの方程式からなり，これに対する変数は $(\Delta x, \Delta y, \Delta w, \Delta u)$ の 4 つである．実際，(17)を書き下すと $\lambda=\sigma\mu=\sigma(x+y-2u)/2$ と置いて

$$\begin{aligned} \Delta x-u\Delta w-\Delta u &= \lambda-x+u \\ -u\Delta x+\Delta w-x\Delta u &= ux-1 \\ -u\Delta y-\Delta w-y\Delta u &= uy-1 \\ \Delta y+u\Delta w-\Delta u &= \lambda-y+u \end{aligned}$$

となる．これを解くと，

$$\Delta x=\frac{1}{x+y+2u}(2-x^2-xy)+\frac{\lambda(x+y-2u^2x)}{(1-u^2)(x+y+2u)}$$

$$\Delta y=\frac{1}{x+y+2u}(2-y^2-xy)+\frac{\lambda(x+y-2u^2y)}{(1-u^2)(x+y+2u)}$$

$$\Delta u=\frac{2(1-u^2)}{x+y+2u}-\frac{2\lambda u}{x+y+2u}$$

となる．これらのベクトル場を，$u=0$ のときにプロットしたのが図 3 および 4 である．図 3 では $\sigma=0.5$ の場合を，図 4 では $\sigma=0$ の場合をプロットしている．$\sigma=0$ の場合，探索方向は特にアフィンスケーリング方向と呼ばれる．感覚的なものだが，アフィンスケーリング方向のベクトル場は全体に最適解を目指しているのに対し，$\sigma=0.5$ の場合には，最適解からやや離れた中心曲線上の点を目指しているように見える．一般に $\sigma>0$ の場合には，中心曲線に近づこうとする方向が加わる．

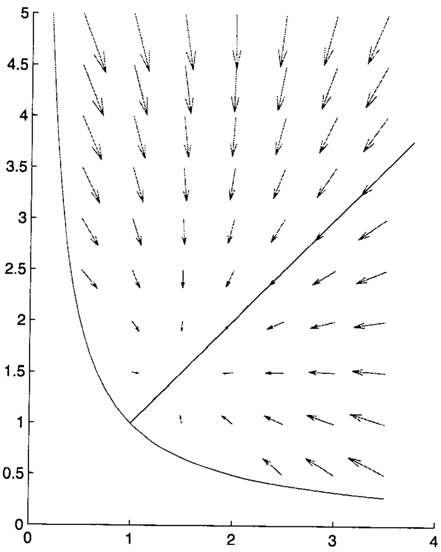

図 3　HKM 方向のベクトル場（$\sigma=0.5$）

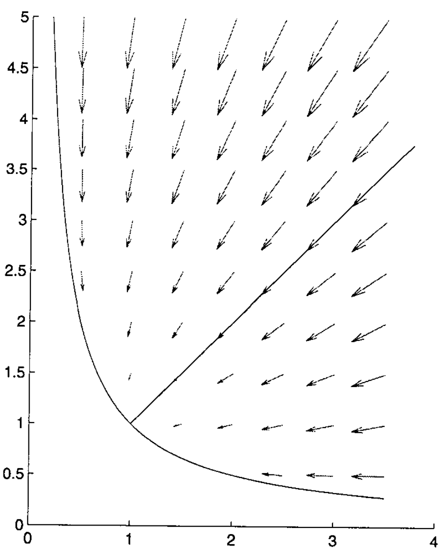

図 4　HKM 方向のベクトル場（$\sigma=0$）

主双対内点法では，内点実行可能解 $(x, y, 2u)$（すなわち，$xy>1, u^2<1$）が与えられたとき，パラメータ σ を用いて λ を計算し，これを用いて上記の探索方向を求め，そちらの方向にステップする．様々な初期点（ただし，いずれの初期点においても $u=0$）からアルゴリズムを出発させ，$\sigma=0.5$ かつ

$$x \leftarrow x+0.5\Delta x,\ y \leftarrow y+0.5\Delta y,\ u \leftarrow u+0.5\Delta u$$

として (x, y) をプロットした結果が図 5 である．中心曲線に近づいたあと，最適解へ収束しているのが観

[2] 一見すると，とても雑な作り方をしているように思われるかもしれないが，実はこの探索方向には別の見方もできて，理論的にはかなりすっきり説明することができる．詳しくは文献[1]などを参照せよ．

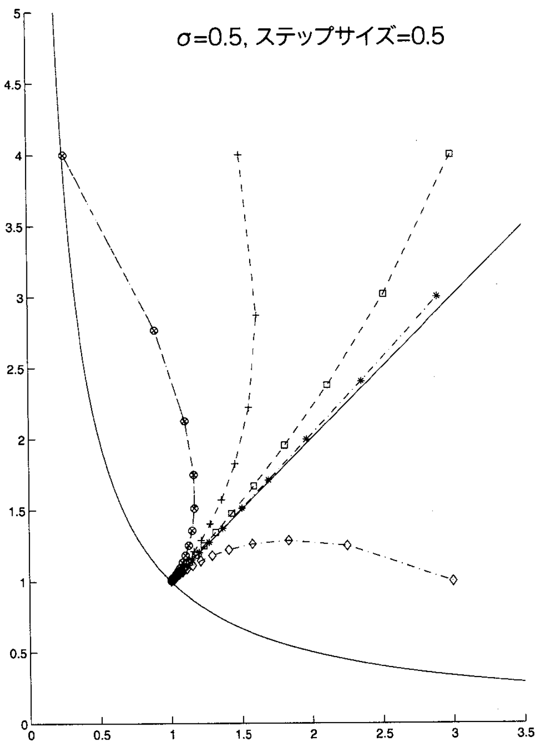

図5　HKM 方向を用いた主双対内点法の軌跡

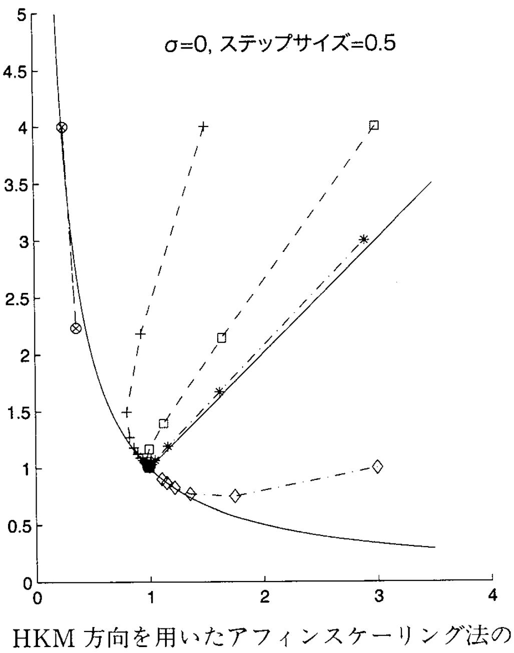

図6　HKM 方向を用いたアフィンスケーリング法の軌跡

察できる．

一方，$\sigma=0$ としたとき，すなわち，アフィンスケーリング方向を用いたときに，同じアルゴリズムを用いてプロットしたのが図6である．あきらかに，中心曲線と関係なく，最適解へ直接接近しようとしている．またこの場合，左上の非常に境界に近い点から出発した点列は，境界を飛び出している．もちろん，実行可能領域の境界までいかないようなステップサイズを毎回計算すれば，このようなことは避けられるが，そのときには，境界でスタックしてしまい，最適解へ収束しなくなる．中心曲線の重要性がわかる例である．

7.　2次錐計画

2次錐とは

$$\left\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{1+n_0}:\ x_0\geq\sqrt{\sum_{j=1}^{n_0}x_j^2}\right\}$$

という集合である．「いくつかの変数が2次錐に入っている」という2次錐制約は，実は半正定値制約の子分のようなものであり，これを用いた「2次錐計画問題（Second-Order Cone Programming；以下 SOCP 問題と呼ぶ）」は SDP 問題と同様，主双対内点法により効率よく解かれる．これも「21世紀の線形計画問題」と呼ばれているが，本稿で使われている例題は実は2次錐計画問題の例ともなっている．実際，

$$xy\geq 1\Leftrightarrow\frac{(x+y)^2}{4}\geq\frac{(x-y)^2}{4}+1$$

であるので，

$$\text{最小化}\ x+y\quad\text{条件}\ s_0=\frac{x+y}{2},\ s_1=\frac{x-y}{2},$$

$$s_2=1,\ s_0\geq\sqrt{s_1^2+s_2^2},\ x\geq 0,\ y\geq 0$$

という2次錐計画問題を考えればこれは例題と等価である．中心曲線，探索方向は（いくつか補助的なパラメータがあるものの）本質的には本稿で調べたものと同一となる．

8.　おわりに

最後に，例題を素直に不等式制約をもつ非線形計画問題と見なしてみよう．ラグランジュ関数は

$$L(x,y\,;\,\lambda_0,\lambda_1,\lambda_2)=x+y+\lambda_0(1-xy)-\lambda_1x-\lambda_2y$$

である．すると，双対問題は

$$\text{最大化}\ \lambda_0\quad\text{条件}\ \lambda_0=0,\ \lambda_1=1,\ \lambda_2=1$$

となり，最適値は0であるので，主問題と双対問題の間に双対ギャップが生じる．

また，従来からの凸計画の概念では，制約には凸関数が使われていなければならないが，関数 $1-xy$ は凸関数でないので，通常の非線形計画問題のソルバーでは，この最適化問題が「凸計画問題」であることには気づかないかもしれない．

一方，本稿で述べてきた SDP 問題や SOCP 問題によるモデリングは，問題の中に存する凸性をうまく検出し，効率的なアルゴリズムに結びつけている．これ

が，SDP 問題や SOCP 問題の強みであろう．現在，凸計画の世界は，半正定値計画や 2 次錐計画という概念の出現で変わりつつある．これらの最適化問題は応用上も非常に重要で，確かに「21 世紀の線形計画問題」と呼ばれるにふさわしいと筆者は考えている．

興味をもった人たちのために，文献を 2 つだけ挙げておく．文献[1]は内点法全般の解説があり，その中に半正定値計画や 2 次錐計画の話も出てくる．文献[2]は私も著者に入っているが，4 章で，これらの新しい凸最適化問題に関する双対定理などについて解説をしている．より詳しい解説書，オリジナルの論文などについては，これらの書籍の文献を参照されたい．

参考文献

[1] 小島政和，土谷隆，水野眞治，矢部博：「内点法」（経営科学のニューフロンティア 9）朝倉書店（2001）．

[2] 田村明久，村松正和：「最適化法」（工系数学講座 17）共立出版（2002）．