

半正定値計画問題に対する交互方向乗数法

01012143 名古屋市立大学 * 茨木 智 IBARAKI Satoru

01502094 京都大学 福島雅夫 FUKUSHIMA Masao

1 はじめに

$n \times n$ 実行列の空間を $R^{n \times n}$ とする. $X, Y \in R^{n \times n}$ に対して, $R^{n \times n}$ 上の内積 $X \cdot Y$ を $X \cdot Y = \text{tr} X^T Y$ で, X のノルムを $\|X\| = (X \cdot X)^{\frac{1}{2}}$ で定義する. また, $S^n \subset R^{n \times n}$ を $n \times n$ 対称行列の空間とする. $X \in S^n$ に対して, X が半正定値のとき $X \succeq 0$ と表す. 行列 X の i 行 j 列を X_{ij} と表す.

ここで, 半正定値対称行列を変数に持つ関数 $f: S^n \rightarrow (-\infty, +\infty]$ を考える. 関数 f が凸であるとは, 任意の $X, Y \in S^n$ と $\alpha \in [0, 1]$ に対して

$$\alpha f(X) + (1 - \alpha)f(Y) \geq f(\alpha X + (1 - \alpha)Y)$$

が成立することをいう. 関数 f のレベル集合 $\{X \in S^n \mid f(X) \leq \alpha\}$ があらゆる α に対して閉集合であるとき, f を閉凸関数とよぶ. 凸関数 f が, $f(X) > -\infty, \forall X \in S^n$ かつある $X \in S^n$ に対して $f(X) < +\infty$ のとき, f を真凸関数とよぶ.

$X \in S^n$ に関する次の半正定値凸計画問題を考える.

$$\begin{aligned} \min & f_0(X) \\ \text{s.t.} & A_i \cdot X = b_i, \quad i = 1, \dots, m, \\ & X \succeq 0 \end{aligned} \quad (1)$$

ただし, 関数 $f_0: S^n \rightarrow (-\infty, +\infty]$ は閉真凸関数とし, すべての i に対して, $A_i \in S^n$ は定数行列, b_i は定数である. もし関数 f_0 が定数行列 $C \in S^n$ を用いて,

$$f_0(X) = C \cdot X \quad (2)$$

と表されるとき, 問題 (1) は半正定値線形計画問題となり, 内点法を適用することが試みられている [2].

本報告では, 半正定値凸計画問題 (1) に対して, 非線形最適化アルゴリズムの1つである交互方向乗数法を適用することを提案する. このアルゴリズムは分解法であり, その性質が問題 (1) において効果的に利用できることを示す.

2 交互方向乗数法

問題 (1) と等価な以下の問題を考える.

$$\min f(X) + g(Y) \quad \text{s.t.} \quad X = Y. \quad (3)$$

ただし

$$f(X) = \begin{cases} f_0(X) & \text{if } X \succeq 0 \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4)$$

$$g(Y) = \begin{cases} 0 & \text{if } A_i \cdot Y = b_i, \quad i = 1, \dots, m \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5)$$

である. (3) のような形に定式化された問題に対しては, 交互方向乗数法 [1] を適用することが可能である.

交互方向乗数法

Step 0 : 初期値 $Y^0, P^0 \in S^n$ および定数 $\lambda > 0$ を定める. $k := 0$ とする.

Step 1 : X に関する最小化問題

$$\min \left\{ f(X) + P^k \cdot X + \frac{\lambda}{2} \|X - Y^k\|^2 \right\} \quad (6)$$

を解き, その解を X^{k+1} とする.

Step 2 : Y に関する最小化問題

$$\min \left\{ g(Y) - P^k \cdot Y + \frac{\lambda}{2} \|X^{k+1} - Y\|^2 \right\} \quad (7)$$

を解き, その解を Y^{k+1} とする.

Step 3 : P^k を

$$P^{k+1} := P^k + \frac{1}{\lambda} (X^{k+1} - Y^{k+1})$$

と更新し, $k := k + 1$ として Step 1 に戻る.

交互方向乗数法の各ステップを詳しく見てみよう. (4)

より Step 1 の問題 (6) は

$$\begin{aligned} \min & f_0(X) + P^k \cdot X + \frac{\lambda}{2} \|X - Y^k\|^2 \\ \text{s.t.} & X \succeq 0 \end{aligned}$$

と書ける. 特に, 関数 f が (2) で与えられる場合は, 上の問題は次のように書き換えられる.

$$\begin{aligned} \min & (C + P^k) \cdot X + \frac{\lambda}{2} \|X - Y^k\|^2 \\ \text{s.t.} & X \geq 0. \end{aligned}$$

このときの解 X^{k+1} は

$$X^{k+1} = [Y^k - \frac{1}{\lambda}(C + P^k)]_+ \quad (8)$$

と表すことができる. ただし, $[\cdot]_+$ は集合 $\mathcal{K} = \{X | X \geq 0\}$ への直交射影である.

一方, Step 2 の問題 (7) は

$$\begin{aligned} \min & -P^k \cdot Y + \frac{\lambda}{2} \|X^{k+1} - Y\|^2 \\ \text{s.t.} & A_i \cdot Y = b_i, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

と書ける. この問題は Y に対する 2 次計画問題であるから, その解は, 制約 $A_i \cdot Y = b_i$ に対するラグランジュ乗数を u_i とすると

$$Y = X^{(k+1)} + \frac{1}{\lambda} \left(\sum_{i=1}^m u_i A_i + P^k \right) \quad (9)$$

と表される. これを $A_j \cdot Y = b_j$ に代入すると, 各 $j = 1, \dots, m$ に対して

$$\frac{1}{\lambda} \sum_{i=1}^m (A_j \cdot A_i) u_i = b_j - A_j \cdot (X^{(k+1)} + \frac{1}{\lambda} P^k) \quad (10)$$

となる. したがって, u_i に関する連立方程式 (10) を解いた結果と (9) より, 問題 (7) の解を得る.

3 0-1(2次)計画問題に対する応用

$w \in R^n$ を成分が 0 または 1 のベクトルとして, 次の 2 次関数を目的関数とする 0-1 計画問題 [2] を考える.

$$\begin{aligned} \min & w^T Q w + 2c^T w \\ \text{s.t.} & w \in \{0, 1\}^n. \end{aligned}$$

ただし, $Q \in S^n$, $c \in R^n$ である. 以下では半正定値行列を用いて, この 0-1(2次)計画問題の緩和問題を構成し, 前節で述べた交互方向乗数法がこの緩和問題に対して, 効率よく適用できることを示す.

2 次方程式を用いると, 0-1 制約集合は $\{w | w_j(w_j - 1) = 0, \forall j\}$ と表すことができる. これは凸集合ではないので, この集合を含むような凸集合を考える. 新しく変数 $W \in S^n$ を導入すると,

$$\begin{aligned} w_j(w_j - 1) = 0, & \Leftrightarrow w_j^2 = w_j \\ & \Leftrightarrow W_{jj} = w_j, W_{jj} = w_j^2 \end{aligned}$$

であるから, 制約 $W_{jj} = w_j^2, \forall j$ を緩和することによって, 次の半正定値線形計画問題を得る.

$$\begin{aligned} \min & W \cdot Q + 2c^T w \\ \text{s.t.} & W_{jj} = w_j, \quad \forall j, \quad \begin{pmatrix} W & w \\ w^T & 1 \end{pmatrix} \succeq 0. \quad (11) \end{aligned}$$

ただし, $w^T Q w = \sum_i w_i (\sum_j q_{ij} w_j) = \sum_{i,j} w_i w_j q_{ij} = W \cdot Q$ に注意する.

ここで, 行列 $X, \tilde{Q} \in S^{(n+1)}$ を

$$X = \begin{pmatrix} W & w \\ w^T & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{Q} = \begin{pmatrix} Q & c \\ c^T & 0 \end{pmatrix}$$

とし, 関数 f および g を ($Y \in S^{(n+1)}$)

$$\begin{aligned} f(X) &= \begin{cases} X \cdot \tilde{Q} & \text{if } X \succeq 0 \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \\ g(Y) &= \begin{cases} 0 & \text{if } Y_{jj} = Y_{j, n+1} = Y_{n+1, j}, \forall j \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned}$$

とおけば, 問題 (11) は問題 (3) と同様の形に書き換えられ, 上で述べた交互方向乗数法を適用できる. この場合, Step 1 の X^{k+1} は

$$X^{k+1} = [Y^k - \frac{1}{\lambda}(\tilde{Q} + P^k)]_+$$

となる. 次に Step 2 の Y^{k+1} は, $1 \leq i, j \leq n$ に対して

$$\begin{aligned} Y_{ij}^{k+1} &= X_{ij}^{k+1} + P_{ij}^k / \lambda \quad i \neq j \\ Y_{jj}^{k+1} &= (2X_{j, n+1}^{k+1} + X_{jj}^{k+1} + (2P_{j, n+1}^k + P_{jj}^k) / \lambda) / 3 \end{aligned}$$

によって簡単に計算できる. したがって, 0-1 計画問題の緩和問題 (11) に対して, 交互方向乗数法が効率よく適用できる.

References

- [1] D.P. Bertsekas and J.N. Tsitsiklis. *Parallel and Distributed Computation: Numerical Methods*. Prentice Hall, New Jersey, 1989.
- [2] 信太 正之. “半正定値線形計画問題入門.” 第 8 回 RAMP シンポジウム予稿集, 1996.