多項式最適化入門:演習問題

注: 以下では次の記号を用いる.

A	易しい確認問題. あまりその分野の知識がない人向け.
B	中程度の問題
C	難しくはないが、計算が面倒. 今日できなくても OK.
D	難しいけど解いてほしい問題
E	解けなくても心配なし
*	重要な問題なので必ず解いてほしい

1　多項式, 非負多項式, SOS 多項式

演習問題 1 ***A**** n 変数 r 次以下の単項式の数を $s(n,r)$, n 変数 r 次の単項式の数を $h(n,r)$ で表す.

1. $h(n,r)$ を n と r で表せ。
2. $h(n,r) \geq 2^{\min(n-1,r)}$ を証明せよ。
3. $s(n,r)$ を n と r で表せ。

演習問題 2 ***A**** *1* 変数の *2* 次多項式 $f(x) = ax^2 + 2bx + c$ が非負多項式であるとき、f が高々二つの多項式の自乗和で表されることを示せ.

演習問題 3 ***B*** n 変数 *2* 次非負多項式は、自乗和多項式に限ることが知られている。n 変数 *2* 次非負多項式 f を

$$f(\boldsymbol{x}) = ax_n^2 + 2b(\boldsymbol{x}')x_n + c(\boldsymbol{x}')$$

と表す。ただし、$\boldsymbol{x}' = (x_1, \ldots, x_{n-1})$ で, $\deg(b) \leq 1$, $\deg(c) \leq 2$ である。$n-1$ 変数 *2* 次非負多項式は自乗和多項式に限ることを仮定して、f が自乗和多項式になることを示せ。

演習問題 4 ***D*** 以下に示す多項式 (*Motzkin Polynomial* という）は非負多項式であるが、自乗和多項式ではない例である:

$$x^4y^2 + x^2y^4 - 3x^2y^2 + 1.$$

1. *Motzkin Polynomial* が非負多項式であることを証明せよ。
2. *Motzkin Polynomial* が自乗和多項式ではないことを証明せよ。

演習問題 5 ***B**** 次を証明せよ。
n 変数 $2r$ 次多項式 f が自乗和多項式
$\Leftrightarrow$ ある $s(n,r) \times s(n,r)$ 対称半正定値行列 X が存在して $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})^T X \boldsymbol{u}_r(\boldsymbol{x})$.

注: 上の関係から, f が自乗和多項式であるとき、和の個数 l は $l \leq s(n,r)$ と取ることができる.

演習問題 6 ***A**** 次の *2* 次関数が $\boldsymbol{u}_1(\boldsymbol{x})^T X \boldsymbol{u}_1(\boldsymbol{x})$ の形で表せるよう、X の成分を定めよ。またこれを分解して自乗和の形で表せ。

$$2x_1^2 + 2x_2^2 + x_3^2 - 2x_1x_3 - 2x_2x_3$$

以下、自乗和多項式を SOS (Sum Of Squares) と書き、次の記法を用いる。

- $\mathbb{R}[\boldsymbol{x}]$: $\boldsymbol{x}$ を変数とする多項式の集合
- $\mathbb{R}[\boldsymbol{x}]_r$: $\boldsymbol{x}$ を変数とする次数 r 以下の多項式の集合
- $\boldsymbol{\Sigma}$: $\boldsymbol{x}$ を変数とする SOS の集合
- $\boldsymbol{\Sigma}_r$: $\boldsymbol{x}$ を変数とする次数 $2r$ 以下の SOS の集合

演習問題 7 ***A****

1. $f, g \in \boldsymbol{\Sigma}$ のとき、$f+g, fg \in \boldsymbol{\Sigma}$ を示せ。*(*これを $\boldsymbol{\Sigma}+\boldsymbol{\Sigma} \subseteq \boldsymbol{\Sigma}$, $\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma} \subseteq \boldsymbol{\Sigma}$ と書く*).*
2. $\boldsymbol{\Sigma}$ は凸集合であることを示せ。
3. $\boldsymbol{\Sigma}$ は錐であることを示せ。
4. $\mathbb{R}[\boldsymbol{x}] = \boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{\Sigma}$ を示せ。

演習問題 8 ***D*** $2r$ 次 *1* 変数非負多項式は自乗和多項式に限ることを示せ。
ヒント：$2r$ 次 *1* 変数多項式は、複素数と重複度まで考えると $2r$ 個の解を持つ. そのうち実数のものは、重複度が偶数でなければならない。この解によって f を因数分解せよ。

2 POP に対する SDP 緩和

演習問題 9 ***C**** *1* 変数多項式 $f(x) = x^4 - 2x^3 + x^2 - 5x - 1$ の *(*制約なし*)* 最小化問題の *SOS* 緩和問題を考えよう。

1. $\boldsymbol{u}_2(x) = (1, x, x^2)^T$ とし、$X \in \mathbb{S}^3$ を

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{12} & X_{22} & X_{23} \\ X_{13} & X_{23} & X_{33} \end{pmatrix}$$

   とおき、$\boldsymbol{u}_2(x)^T X \boldsymbol{u}_2(x)$ を計算せよ。この関数を $g(x)$ と置く。

2. 関係式 $f(x) - \rho = g(x)$ を考える。このとき、左辺と右辺の多項式は等しいので、各単項式にかかる係数も等しいはずである。その関係を等式条件として書き出せ。

3. *SOS* 緩和問題が、

$$\text{maximize} \ \ \rho \,\text{subject to} \ \ X \text{ に関する等式条件} + X \text{ の半正定値条件}$$

と書けることを確かめよ。

4. 今 $\boldsymbol{u}_2(x)$ を考えたが、これを $\boldsymbol{u}_3(x)$ などと 2 より大きい単項式ベクトルを考えても意味が無い。なぜか。制約つき最適化問題の場合と比べよ。

演習問題 10 ***C***

1. *Motzkin Polynomial* に関して *SOS* 緩和問題を考え *SDP* を書き下せ。

2. この場合の最適値はどうなるべきか、考察せよ。

3. 実際にソルバーを用いて *SDP* を解き、上記の考察が正しいかどうかを確かめよ。

演習問題 11 ***C*** *(SDP 緩和と SOS 緩和の双対性) POP*

$$\textit{minimize } f_0(x) \textit{ subject to } f_1(x) \geq 0, \ldots, f_m(x) \geq 0.$$

に対し, 緩和次数 $r(\geq \deg(f_i)/2)$ の *SDP* 緩和問題を考える。添字 $\alpha \in \mathbb{N}_n^{2r}$ に対し, 行列 $E_\alpha \in \mathbb{R}^{s(n,r)\times s(n,r)}$ を

$$(E_\alpha)_{\beta,\gamma} = \begin{cases} 1 & \textit{if } \beta + \gamma = \alpha \\ 0 & \textit{otherwise} \end{cases}$$

と定義する。各 $f_i \in \mathbb{R}[x]$ $(i = 0, \ldots, m)$ に対し, ベクトル $\boldsymbol{f}_i \in \mathbb{R}^{s(n,2r)}$ を

$$f_i(x) = \boldsymbol{f}_i^T u_r(x) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}_n^{2r}} f_{i,\alpha} x^\alpha$$

となるように定義する。

1. $M_r(x) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}_n^{2r}} E_\alpha x^\alpha$ とかけることを確認せよ。*(*特に $n = 2,\ r = 2$ くらいで E_α がどのような形になるか、確認せよ。*)*

2. $M_{r_i}(x) f_i(x) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}_n^{2r}} F_{i,\alpha} x^\alpha$ と表すとき、$F_{i,\alpha}$ を $f_{i,\alpha},\ E_{r_i}$ を用いて表せ。

3. *SDP* 緩和問題を $E,\ F$ 等を用いて表せ。

4. *SOS* の関係式

$$f_0(x) - \theta = u_r(x)^T X_0 u_r(x) + \sum_{i=1}^{m} u_{r_i}(x)^T X_i u_{r_i}(x) f_i(x)$$

から、$\alpha \in \mathbb{N}_n^{2r}$ に関して得られる等式条件を書け。

5. *SOS* 緩和問題の *SDP* を書き、それが *SDP* 緩和問題の双対問題になっていることを確かめよ。

3　午後のための演習問題

午後のための演習問題は第 5 部の基礎になるので、
(7 以外を) 他に優先してやってください

3.1　資料編

POP とその SOS 緩和問題

$$\theta^* = \inf\{\, f_0(x) \mid f_1(x) \geq 0, \dots, f_m(x) \geq 0 \,\}$$

$$\theta_r = \sup\left\{ \theta \;\middle|\; f_0(x) - \theta = \sigma_0(x) + \sum_{i=1}^{m} \sigma_i(x) f_i(x) \right\}$$

ただし, $r_i = r - \lceil \deg(f_i)/2 \rceil$, $\sigma_i \in \mathbf{\Sigma}_{r_i}$ $(i = 1, \dots, m)$.

θ_r の問題が SDP に変換可能なところがミソ。

定義. $I \subseteq \mathbb{R}[x]$ がイデアル $\Leftrightarrow$ $0 \in I$, $I + I \subseteq I$, $\mathbb{R}[x] I \subseteq I$.

定義. $Q \subseteq \mathbb{R}[x]$ が Quadratic Module $\overset{\text{def}}{\Leftrightarrow}$ $1 \in Q$, $Q + Q \subseteq Q$, $\mathbf{\Sigma} Q \subseteq Q$.

定義. QM Q がアルキメデス的 $\overset{\text{def}}{\Leftrightarrow}$ $\exists u \in Q, \{\, x \in \mathbb{R}^n \mid u(x) \geq 0 \,\}$ がコンパクト

定義. Q が極大 proper $\Leftrightarrow$ Q を真に含む QM は $R[x]$ のみ

Putinar の補題
$Q(f_1, \dots, f_m)$ がアルキメデス的 ならば、

$$f(x) > 0 \ (\forall x \in K) \Rightarrow f \in Q(f_1, \dots, f_m)$$

定理 2
$Q(f_1, \dots, f_m)$ がアルキメデス的ならば、$\theta_r \uparrow \theta^*$ as $r \to \infty$.

定理 3. 次の 4 条件は等価

1. Q がアルキメデス的
2. $\exists N \in \mathbb{N}$ such that $N - \sum_{j=1}^{n} x_j^2 \in Q$
3. $\forall p \in \mathbb{R}[x]$, $\exists N \in \mathbb{N}$ such that $N \pm p \in Q$
4. $\exists p_1, \dots, p_s$ such that $p_I \in Q$ for every $I \subseteq \{1, \dots, n\}$ and $\{\, x \in \mathbb{R}^n \mid p_1(x) \geq 0, \dots, p_s(x) \geq 0 \,\}$ is compact.

ただし $p_I(x) = \Pi_{i \in I} p_i(x)$.

3.2 出題編

午後のための演習問題 1.A* Putinar の補題を用いて定理 2 を証明せよ

午後のための演習問題 2.A* 定理 3 において、$3 \Rightarrow 2 \Rightarrow 1 \Rightarrow 4$ はほぼ自明であることを確認せよ。($4 \Rightarrow 3$ を証明したのが Schmüdgen 先生である．これは難しい.)

午後のための演習問題 3.B* QM Q が proper $\Leftrightarrow Q \neq \mathbb{R}[x]$ を証明せよ。

午後のための演習問題 4.B* QM Q に対し、$Q \cap -Q$ がイデアルになることを示せ。

午後のための演習問題 5.D* QM Q が極大 proper のとき $Q \cup -Q = \mathbb{R}[x]$ を示せ。

午後のための演習問題 6.B* $\mathcal{I} \subseteq \mathbb{R}[x]$ をイデアルとする。ある点 $a \in \mathbb{R}^n$ に関し、$x_j - a_j \in \mathcal{I}$ $(j = 1, \ldots, n)$ であるとき, 任意の $f \in \mathbb{R}[x]$ に関して $f - f(a) \in \mathcal{I}$ であることを示せ。

午後のための演習問題 7.E $Q(x_1 - 1/2, x_2 - 1/2, 1 - x_1 x_2)$ はアルキメデス的ではないことを示せ。

3.3 ヒント

1. $r' \geq r$ で $\theta_{r'} \geq \theta_r$ はほぼ自明（だけど確認せよ)。収束を言うには, 任意の $\epsilon > 0$ に対して $f_0 - (\theta^* - \epsilon)$ は K 上で正なので…
2. ヒントなし。
3. まず $\mathbb{R}[x] = \mathbf{\Sigma} - \mathbf{\Sigma}$ を示せ。
4. $\mathcal{I} = Q \cap -Q$ と置く。$0 \in \mathcal{I}, \mathcal{I} + \mathcal{I} \subseteq \mathcal{I}$ は自明。問題は $\mathbb{R}[x]\mathcal{I} \subseteq \mathcal{I}$ である。$f \in \mathbb{R}[x]$, $g \in \mathcal{I}$ として $fg \in Q \cap -Q$ を示すが、うまい式変形が必要。
5. 背理法を使う。$Q \cup -Q \neq \mathbb{R}[x]$ と仮定し、$f \in \mathbb{R}[x] \backslash (Q \cup -Q)$ を取れば、$Q + \mathbf{\Sigma} f$, $Q - \mathbf{\Sigma} f$ はどちらも QM になるが、極大の仮定から両方とも $\mathbb{R}[x]$ になる。
6. まず $x_i x_j - a_i a_j \in \mathcal{I}$ を示してみよう。
7. どんな $N \in \mathbb{N}$ に対しても $N - (x_1^2 + x_2)^2 \notin Q(x_1 - 1/2, x_2 - 1/2, 1 - x_1 x_2)$ を示すのが楽かと思う。

付録:半正定値計画

POP に対するアルゴリズムは、最終的に半正定値計画問題 (SDP) に帰着させて解くことになる。SDP に関しては予備知識を前提としたいが、そうでない人のために、ここで非常に簡単に説明する。

$n \times n$ 実対称行列の集合を $\mathbb{S}^n$, $n \times n$ 実対称半正定値行列の集合を $\mathbb{S}^n_+$ と書く。さらに、行列 X が半正定値であることを $X \succeq O$, 正定値であることを $X \succ O$ と書く。$X, Y \in \mathbb{S}^n$ に対し、$X \bullet Y = \mathrm{trace}(XY)$ と書く。

演習問題 12 *A*

1. $X \bullet Y = \sum_{i,j=1}^{n} X_{ij} Y_{ij}$ を示せ。

2. $\bullet$ は $\mathbb{S}^n$ における内積となっていることを示せ。

3. $\mathbb{S}^n$ は $\mathbb{R}^{n(n+1)/2}$ と同一視できるが、$\mathbb{R}^{n(n+1)/2}$ における通常の内積と $\bullet$ は異なっていることを示せ。

演習問題 13 *A** $X \succeq O$ において, ある i について $X_{ii} = 0$ であるとき、全ての j に関して $X_{ij} = 0$ であることを示せ。

次の条件を満たす最適化問題を **半正定値計画問題 (SemiDefinite Programming; 以下 SDP)** と言う：

1. $\mathbb{S}^n$ の元を変数とし、

2. 線形制約と半正定値制約を持ち、

3. 目的関数が一次関数である。

等式標準形の SDP は以下の形をしている。

$$\text{minimize} \quad C \bullet X \quad \text{subject to} \quad A_i \bullet X = b_i \ (i = 1, \ldots, m), \ X \succeq O. \tag{1}$$

(1) において「変数 X が対角行列である」という制約 (これは線形制約である) を置くと, 変数行列の対角成分を変数ベクトルとする線形計画問題と等価になる. すなわち, SDP は線形計画を特殊ケースとして含んでいる.

演習問題 14 *A* 「$n \times n$ 実対称行列 X が対角行列である」という制約を具体的に書き下すとき、A_i としてどのような行列をとれば良いか、考えよ。いくつの等式条件が必要か。

(1) の双対問題は

$$\text{maximize} \quad \sum_{i=1}^{m} b_i y_i \quad \text{subject to} \quad S + \sum_{i=1}^{m} y_i A_i = C, \ S \succeq O \tag{2}$$

である。

演習問題 15 *A* (1) の許容解 X, (2) の許容解 (y, S) に関して $C \bullet X \geq \sum_{i=1}^{m} b_i y_i$ *(*弱双対定理*)* が成り立つことを示せ。

一般に、SDP には最適解が存在しなかったり、双対ギャップが存在したりする場合がある。（LP との違いを認識すること！）SDP に関する双対定理は次のものが知られている。証明は例えば「最適化法（田村／村松）、共立出版」の第４章を参照のこと。

Theorem 1 (双対定理) もし (1) に内点許容解（正定値である許容解）が存在すれば、最適値は一致し、双対問題 (2) に最適解が存在する。もし (2) に内点許容解が存在すれば、最適値は一致し、主問題 (1) に最適解が存在する。

SDP は **内点法 (interior-point method)** というアルゴリズムを用いて効率よく解くことができることが知られている。フリーのソルバーもある。次のものが有名である。

- SeDuMi. Matlab 上で動く。SDP を含む、他の錐線形計画問題も解くことができる。なぜか SDPA より安定して解を計算できると言われている。
- SDPA. C++ で書かれている。大規模な問題や構造を持った問題を高速に解くことを主眼にしている。Matlab インターフェースあり。

参考文献

[1] M. Laurent: "Sums of squares, moment matrices, and optimization over polynomials", in: Emerging Applications of Algebraic Geometry. M. Putinar and S. Sullivant eds. pp. 157-270.

[2] J. B. Lasserre: Moments, Positive Polynomials and Their Applications. Imperial College Press, 2010.

以上