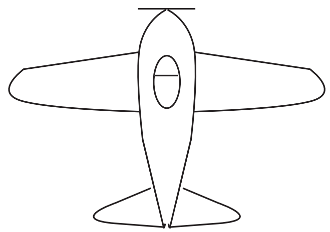
最適化理論の産業・諸科学への応用 @ 九大　(2011-10-13/14)
「数学・数理科学と諸科学・産業との連携研究ワークショップ」

半正定値計画 と 対称性

室田 一雄（東京大学）

共同研究者：小島政和，小島定吉，寒野善博，前原貴憲

対称性の利用法



●半分だけ計算して済ませたい
　→ 対称成分の定義／計算法

●本当に半分だけ計算すればいいのか
　→ 問題の対称性 vs 解の対称性

●別世界で計算できないか
　→ 同型性の利用

半正定値計画問題 (SDP)

（主問題）

minimize　$\langle A_0, X\rangle$
subject to　$\langle A_k, X\rangle = b_k \quad (k = 1, \ldots, N)$
　$X \succeq O$

（双対問題）

maximize　$b_1 y_1 + \cdots + b_N y_N$
subject to　$A_1 y_1 + \cdots + A_N y_N \preceq A_0$
　$y_1, \ldots, y_N \in \mathbb{R}$

- 美しい理論（双対理論，...）
- 高速なアルゴリズム（主双対内点法，...）
- 広い応用（構造物設計，組合せ問題の緩和問題，...）

（代数的）対称性をもつ半正定値計画問題

minimize　$\langle A_0, X\rangle$
subject to　$\langle A_k, X\rangle = b_k \quad (k = 1, \ldots, N)$
　$X \succeq O$

with　$P^\top A_k P = A_k \quad (k = 0, 1, \ldots, N)$
　for some $P \ (\neq \pm I) \quad \in O(n)$

$$\begin{bmatrix} -1 & \\ & 1 \end{bmatrix} \cdot A \cdot \begin{bmatrix} -1 & \\ & 1 \end{bmatrix} = A \ \Rightarrow \ A = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} & 1 & \\ & & 1 \\ 1 & & \end{bmatrix} \cdot A \cdot \begin{bmatrix} & & 1 \\ 1 & & \\ & 1 & \end{bmatrix} = A \ \Rightarrow \ A = \begin{bmatrix} a & b & c \\ c & a & b \\ b & c & a \end{bmatrix}$$

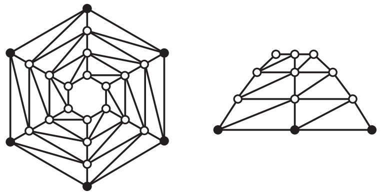
- ドーム状構造物 などの解析
- 完全グラフ・完全二部グラフ などの組合せ問題

トラス設計問題

$\boxed{\text{幾何学的対称性}}$

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \displaystyle\sum_{i=1}^{t} \ell_i z_i \\ \text{subject to} & \displaystyle\sum_{i=1}^{t} (K_i - \bar{\Omega} M_i) z_i - \bar{\Omega} M_0 \succeq O \\ & z_i \geq 0 \quad (i = 1, \ldots, t) \end{array}$$

（ℓ_i：部材長，z_i：部材断面積，$\bar{\Omega}$：振動数下界
K_i：剛性行列，M_i：質量行列）



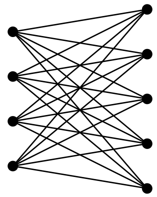
完全２部グラフ交差数問題

$\boxed{\text{置換対称性}}$

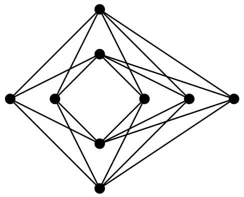
$$(r-1)! \times (r-1)! \longrightarrow$$

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \langle Q, X \rangle \\ \text{subject to} & \langle J, X \rangle = 1 \\ & X \geq 0, \ X \succeq O \end{array}$$

$$\mathrm{cr}(K_{r,s}) \geq \frac{s}{2}\left(s \cdot \mathrm{OPT} - \left\lfloor \frac{r}{2} \right\rfloor \left\lfloor \frac{r-1}{2} \right\rfloor\right)$$



交差数60



交差数8

研究の歴史

1994: Kojima–Kojima–Hara　　講究録(1997)　　＊代数
　Linear algebra for semidefinite programming

●問題の対称性 vs 解の対称性

2001: Kanno–Ohsaki–Murota–Katoh (Opt. Eng.)　　内点法

●対称成分の定義／計算法

2004: Gatermann–Parrilo (J.Pure Appl.Alg.)　　群表現
2010: Murota–Kanno–Kojima–Kojima (JJIAM)　　＊代数
2011: Maehara–Murota (SIAM,Matrix Anal.)　　＊代数
2011: de Klerk–Dobre–Pasechnik (Math.Progr.)　　＊代数

●同型性の利用

2007: de Klerk–Pasechnik–Schrijver (Math.Progr.)
正則表現，グラフ問題

群対称性 をもつ 半正定値計画問題

- 群の定義 と 群の表現
- 対称性をもつ 半正定値計画問題
- 対称SDP と 内点法

念のため： 群 (group)

群 (group)：対称性を扱う数学的道具

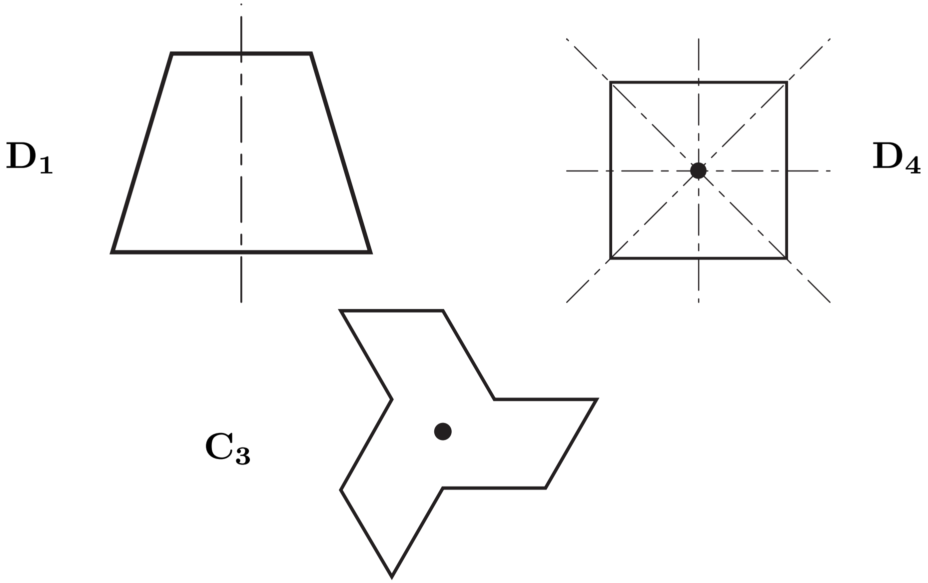
定義： Gが群 $\Longleftrightarrow$

- $\forall a, b, c, \quad (ab)c = a(bc)$ （結合則）
- $\exists e, \forall a, \quad ae = ea = a$ （単位元の存在）
- $\forall a, \exists a^{-1}, \quad aa^{-1} = a^{-1}a = e$ （逆元の存在）

例： 三角形を不変に保つ群

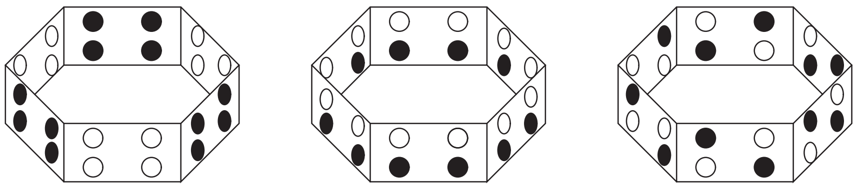
$G = \{$ 恒等変換，120度回転，240度回転，
鏡映，鏡映＋120度回転，鏡映＋240度回転 $\}$

対称性 （平面図形）



対称性 （立体図形）

Schoenfliesの記号



$\mathrm{D_{3h}}$ $\mathrm{C_{6v}}$ $\mathrm{D_6}$

抽象群としては同型： $\mathbf{D_{3h}} \simeq \mathbf{C_{6v}} \simeq \mathbf{D_6}$

群対称性をもつ 半正定値計画問題

群Gの表現 $T : G \longrightarrow$ 直交行列， $g \mapsto P = T(g)$
$\mathcal{G} = \{P = T(g) \mid g \in G\}$ （表現行列の作る群）

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \langle A_0, X \rangle \\ \text{subject to} & \langle A_k, X \rangle = b_k \quad (k = 1, \ldots, N) \\ & X \succeq O \end{array}$$

が 群G について不変 $\Longleftrightarrow$

$$P^\top A_k P = A_k \quad (k = 0, 1, \ldots, N) \qquad \forall\, P \in \mathcal{G}$$

群対称SDP の基本的性質

- X が解 $\Rightarrow$ $PXP^\top$ も解 $(P \in \mathcal{G})$

  $\because \langle A_k, PXP^\top \rangle = \langle P^\top A_k P, X \rangle = \langle A_k, X \rangle$

- 対称性をもつ最適解 $\bar{X}$ $(= P\bar{X}P^\top)$ が存在 （凸計画で）

  $\because \ \bar{X} = \dfrac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{P \in \mathcal{G}} PXP^\top$ （←任意の解 X を平均化）

- 主双対内点法で対称解が求まる

  $\because$ 中心パスは対称性をもつ

  探索方向が対称性を保存

  （寒野・大崎・室田・加藤 2001）

$$\begin{array}{ll} \text{min.} & \langle A_0, X \rangle \\ \text{s.t} & \langle A_k, X \rangle = b_k \\ & X \succeq O \\ \text{with} & P^\top A_k P = A_k \end{array}$$

トラス設計問題

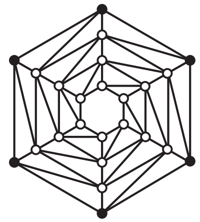
$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \displaystyle\sum_{i=1}^{t} \ell_i z_i \\ \text{subject to} & \displaystyle\sum_{i=1}^{t} (K_i - \bar{\Omega} M_i) z_i - \bar{\Omega} M_0 \succeq O \\ & z_i \geq 0 \quad (i = 1, \ldots, t) \end{array}$$

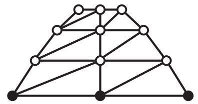
ℓ_i：部材長，z_i：部材断面積

$\bar{\Omega}$：振動数下界

K_i：剛性行列，M_i：質量行列

$\Rightarrow G = \mathrm{C}_6$：節点番号の置換行列の集合





$$T(g) = \begin{bmatrix} & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \\ 1 & & & & & \end{bmatrix}$$

行列の同時ブロック対角化による手法

ブロック対角 半正定値計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \langle A_0, X \rangle \\ \text{subject to} & \langle A_k, X \rangle = b_k \ (\forall k), \quad X \succeq O \end{array}$$

with

$$A_k = \left[\begin{array}{c|c} B_k & O \\ \hline O & C_k \end{array}\right] \quad (k = 0, 1, \ldots, N)$$

$$\Downarrow \qquad X := \left[\begin{array}{c|c} Y & O \\ \hline O & Z \end{array}\right]$$

- 変数の数 減

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \langle B_0, Y \rangle + \langle C_0, Z \rangle \\ \text{subject to} & \langle B_k, Y \rangle + \langle C_k, Z \rangle = b_k, \quad Y, Z \succeq O \end{array}$$

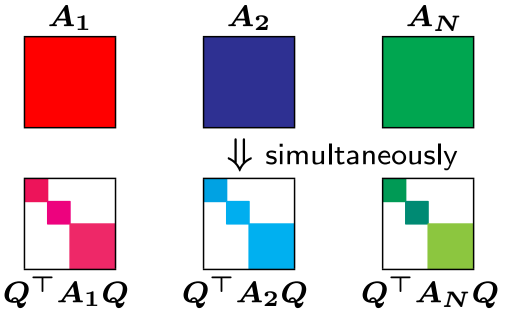
- 究極のブロック対角形 ＝ 線形計画
- 多くのSDP ソルバーはブロック対角構造を利用

正方行列の同時ブロック対角化

Given　正方行列 $A_1, \dots, A_N$

Find　直交行列 Q

s.t.　$Q^\top A_1 Q, \dots, Q^\top A_N Q$ 同時ブロック対角形



同時ブロック対角化 に基づく 前処理

係数行列をできるだけ細かくブロック対角化せよ

Find Q（直交） s.t. $Q^\top A_k Q$ はブロック対角形

- (A) 群表現の既約分解　(Gatermann–Parrilo 2004)
  - 代数的計算
  - 対称性が既知の問題に有効
    - 多項式最適化 (Jansson–Lasserre–Riener–Theobald 2006)
    - トラス設計 (Bai–de Klerk–Sotirov 2007)
- (B) 行列∗代数の構造定理　(室田–寒野–小島–小島 2010, 前原–室田 2010,2011)
  - 数値的計算
  - 対称性が未知の問題に有効

(A) 群表現の既約分解による手法

群の 既約分解

- 群 $\mathcal{G}$ が可約 $\iff$ $\exists Q$：直交

$$Q^\top P Q = \left[\begin{array}{c|c} P_1 & O \\ \hline O & P_2 \end{array}\right] \quad (P \in \mathcal{G})$$

- 既約分解：それ以上細かくブロック対角化できない $\mathcal{G}$ の同時ブロック対角化
- 基本的な群について既約分解が既知
  - 典型的な群：教科書など
  - 小さな群：計算代数のソフトウェア（GAP，Cayley，...）

既約分解による 同時ブロック対角化

- 係数行列が $\mathcal{G}$ 対称：

$$P^\top A_k P = A_k \quad (P \in \mathcal{G})$$

- $\mathcal{G}$ の既約分解が既知：$\exists Q$

$$Q^\top P Q = \left[\begin{array}{c|c} P_1 & O \\ \hline O & P_2 \end{array}\right] \quad (P \in \mathcal{G})$$

$\Downarrow$ (Schurの補題)

既約分解の Q で係数行列は同時ブロック対角化：

$$Q^\top A_k Q = \left[\begin{array}{c|c} B_k & O \\ \hline O & C_k \end{array}\right]$$

同時ブロック対角化：既約表現の重複度

$\mathbb{R}$上/$\mathbb{C}$上で状況は違う

$$Q^\top A_k Q =$$

$$\left[\begin{array}{c|c|cc|cccc} B_k & & & & & & & \\ \hline & C_k & & & & & & \\ \hline & & D_k & & & & & \\ & & & D_k & & & & \\ \hline & & & & E_k & & & \\ & & & & & E_k & & \\ & & & & & & E_k & \\ & & & & & & & E_k \end{array}\right]$$

1次表現 1次表現 2次表現 4次表現

重複ブロックの恩恵

minimize $\langle A_0, X \rangle$
subject to $\langle A_k, X \rangle = b_k \ (\forall k), \quad X \succeq O$
with $A_k = \left[\begin{array}{c|c} B_k & O \\ \hline O & C_k \end{array}\right], \quad X = \left[\begin{array}{c|c} Y & O \\ \hline O & Z \end{array}\right]$

$\Downarrow$

minimize $\langle B_0, Y \rangle + \langle C_0, Z \rangle$
subject to $\langle B_k, Y \rangle + \langle C_k, Z \rangle = b_k, \quad Y, Z \succeq O$

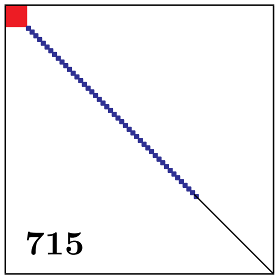
$\boxed{\text{重複 } B_k = C_k}$ $\Rightarrow \langle B_k, Y \rangle + \langle C_k, Z \rangle = \langle B_k, Y + Z \rangle$

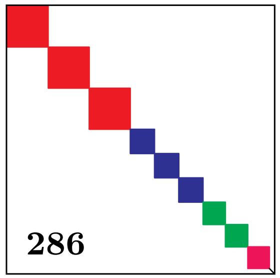
$\Downarrow$ $\qquad W := Y + Z$

minimize $\langle B_0, W \rangle$
subject to $\langle B_k, W \rangle = b_k, \quad W \succeq O$

適用例 (Gatermann–Parrilo 2004)

- 10変数偶多項式最適化　群 $= \mathrm{C}_2 \times \cdots \times \mathrm{C}_2$（10個）
  $\mathbf{715} \Rightarrow \mathbf{55}$ (1個) $+ \mathbf{10}$ (45個) $+ \mathbf{1}$ (210個)





- 4変数対称多項式最適化　群 $= \mathrm{S}_4$ $\Rightarrow$ 5個の既約表現
  $\mathbf{286} \Rightarrow \mathbf{44}$(3次) $+ \mathbf{26}$(3次) $+ \mathbf{24}$(2次) $+ \mathbf{23}$(1次) $+ \mathbf{5}$(1次)

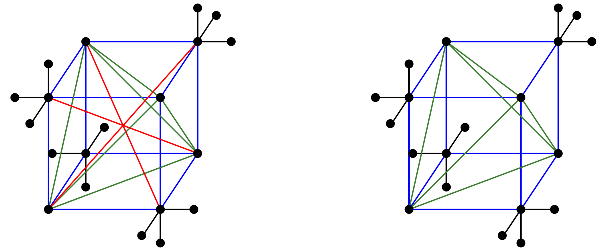
(既約分解の計算にGAPを使用)

(B) 行列 $*$ 代数の構造定理による手法

1994	小島・小島・原	行列 $*$ 代数と SDP
2010	室田・寒野・小島・小島	構造定理に基づく前処理
2010	前原・室田	精密化
2011	前原・室田	ロバスト化
2011	de Klerk–Dobre–Pasechnik	MKKKM の変種
	⋮	

既約分解による手法 (A) の問題点

- 群の構造が陽にわかっていなければ使えない



群 G ?

- 構造が分かっていても既約分解が求まらないと使えない
- 与えられた係数行列 A_k の情報だけで済ませたい

行列 $*$ 代数

SDP の係数行列 $A_0, \ldots, A_N$ の同時ブロック対角化
$\Updownarrow$
$A_0, \ldots, A_N$ の
和・積・スカラー倍・転置によって作られる集合 $\mathcal{T}$
の同時ブロック対角化
($\because$ ブロック対角の和，積，転置，スカラー倍はブロック対角)

行列 $*$ 代数：和・積・スカラー倍・転置で閉じている集合

行列の個数：有限 $\Rightarrow$ 無限
(構造ナシ) (行列 $*$ 代数の構造定理)

行列 $*$ 代数の構造定理 (Artin–Wedderburn)

行列 $*$ 代数の 最も細かな同時ブロック対角化構造 を記述

- 各ブロックのサイズ
- 重複度
- 型

($\mathcal{T}$ から一意に定まる)

例えば：

$$Q^\top \mathcal{T} Q = \left\{ \left[\begin{array}{c|c|c} B & & O \\ \hline & B & \\ \hline O & & C \end{array}\right] \;\middle|\; B \in \mathcal{M}_3, C \in \mathcal{M}_4 \right\}$$

$\mathcal{M}$ 型サイズ 3 (重複度 2); $\mathcal{M}$ 型サイズ 4 (重複度 1)

構造定理に基づく 分解アルゴリズム(MKKKM)

Step 1. 係数行列のランダム結合をつくる

$$A(r) = r_0 A_0 + \cdots + r_N A_N$$

Step 2. $A(r)$ の固有値分解を計算

$$Q^\top A(r) Q = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$$

Step 3. Q を修正

- 数値計算の道具のみで構成　（群論要らず）
- 確率的アルゴリズム　（確率１で成功）
- 数値誤差に弱い　⇒双対化により解決：前原・室田

適用例　(室田・寒野・小島・小島 2010)

フレーム最適化問題（トラス最適化問題＋２次項）

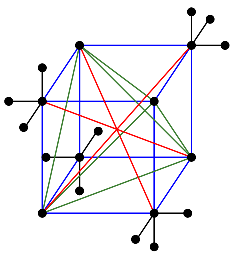
SDP 緩和 ⇒ 大規模問題

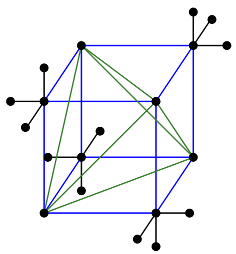
$$\begin{aligned} \text{min.} \quad & \sum_{i=1}^{t} \ell_i z_i \\ \text{s. t.} \quad & \sum_{i=1}^{t} \left[K_i^{(a)} {z_i}^2 + (K_i^{(b)} - \bar{\Omega} M_i) z_i \right] - \bar{\Omega} M_0 \succeq O \\ & z_i \geq 0 \quad (i = 1, \ldots, t) \end{aligned}$$

	前処理 無	前処理 有
最大ブロックサイズ	1197×1197	147×147
計算時間	2417.6秒	59.5秒

適用例　(室田・寒野・小島・小島 2010)

群 $\simeq S_4$





対角あり		対角なし	
サイズ	重複度	サイズ	重複度
2	1	2	1
2	2	2	2
2	3	2	3
4	3	2	3
		2	3
$n = 24$		$n = 24$	

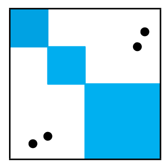
同時ブロック対角化法：誤差制御（前原・室田 2011）

SDP の係数行列に 数値誤差 が含まれている場合

（観測誤差，計算誤差） ⇓

従来の理論は利用困難

⇓



- 「行列＊代数による手法」の双対化

  交換子代数　$\mathcal{T}' = \{X \mid AX = XA \ (\forall A \in \mathcal{T})\}$

  のブロック対角化

  ⇒　もとの $\mathcal{T}$ のブロック対角化
- 許容誤差に応じた $\mathcal{T}'$（対称性）の設定　（cf. 特異値分解）

  $\mathcal{T}'_\varepsilon \approx \{X \mid \|AX - XA\| \leq \varepsilon \ (\forall A \in \mathcal{T})\}$

(A) 既約分解 と (B) 行列$*$代数 の関係

係数行列 $A_0, \ldots, A_N$

対称性

生成

(A)

$\mathcal{T} := \{A \in M(n) \mid P^\top AP = A \ (\forall P \in \mathcal{G})\}$

(B)

群 $\mathcal{G}$ $\rightleftarrows$ $*$代数 $\mathcal{T}$

$\mathcal{G} := \{P \in O(n) \mid P^\top AP = A \ (\forall A \in \mathcal{T})\}$

記号計算

数値計算

行列$*$代数の同型による手法

- 行列$*$代数の同型
- $*$同型と半正定値性

行列$*$代数の同型 による手法

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & b_1y_1 + \cdots + b_Ny_N \\ \text{subject to} & \boxed{A_1y_1 + \cdots + A_Ny_N \preceq A_0} \end{array}$$

$\Downarrow$ ϕ : $*$同型

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & b_1y_1 + \cdots + b_Ny_N \\ \text{subject to} & \boxed{\phi(A_1)y_1 + \cdots + \phi(A_N)y_N \preceq \phi(A_0)} \end{array}$$

- $*$同型を用いて半正定値条件を書き換える
- 高い対称性を持つ場合，小サイズ化可能

「別の世界へ」 $*$同型

- $\phi : \mathcal{T}_1 \to \mathcal{T}_2$ が行列$*$代数の準同型 $\iff$
  - $\phi(X+Y) = \phi(X) + \phi(Y)$ （和の保存）
  - $\phi(XY) = \phi(X)\phi(Y)$ （積の保存）
  - $\phi(\alpha X) = \alpha\phi(X)$ （スカラー倍の保存）
  - $\phi(X^\top) = \phi(X)^\top$ （転置の保存）
- $*$同型 = 全単射 $*$準同型

- $*$同型は 行列$*$代数の代数構造を保存する
- $*$同型は 半正定値性を保存する

$*$同型は 半正定値性を保存

ϕが$*$同型なら　　$X \succeq O \iff \phi(X) \succeq O$

$\because$

$X \succeq O \quad \iff$
- $X = X^\top$
- $X = YY^\top$ for some Y

$\boxed{\text{コレスキー分解}}$

$\Downarrow$

- $\phi(X) = \phi(X^\top) = \phi(X)^\top$
- $\phi(X) = \phi(YY^\top) = \phi(Y)\phi(Y)^\top$

$\Rightarrow \phi(X) \succeq O$

$*$準同型を利用した前処理

$\boxed{\text{定理：} X \succeq O \iff \phi(X) \succeq O}$

- 大きな置換対称性をもつ問題 $\Rightarrow$ ϕの構成法が存在

組合せ最適化問題の緩和で頻出　　正則表現

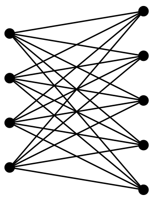
$$B_i B_j = \sum_k \gamma_{ij}^k B_k \qquad (B_i\text{: 基底})$$

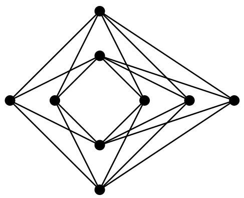
$$\phi(B_i) = \left(\gamma_{ij}^k \mid k\text{:行番号, } j\text{:列番号}\right)$$

– 効率的な計算：組合せ論的手法 “coherent configuration”

適用例　　(de Klerk–Pasechnik–Schrijver 2007)

交差数60





交差数8

r	変換前のn $= (r-1)!$	変換後のn
5	24	7
6	120	17
7	720	56
8	5040	239
9	40320	1366
10	362880	9848

前処理 無：7日
前処理 有：数秒

前処理 無：計算終わらず
前処理 有：7日

前処理しても終わらず

まとめ

まとめ

- 半正定値計画と∗代数　　小島–小島–原 1994
- 群対称性をもつ半正定値計画
  寒野–大崎–室田–加藤 2001
- (A) 群表現の既約分解
  Gatermann–Parrilo 2004
- (B) 行列∗代数の構造定理
  室田–寒野–小島–小島 2010，前原–室田 2010, 2011
- 行列∗代数の同型
  de Klerk–Pasechnik–Schrijver 2007