Szemidefinit optimalizálás és az S-lemma

Pólik Imre
SAS Institute, USA

BME Optimalizálás szeminárium
2011. október 6.

Outline

Egyenlőtlenségrendszerek megoldhatósága

Feladat

Honnan tudjuk, hogy az

$$f(x) < 0$$

$$g_i(x) \leq 0, \ i = 1, \ldots, m$$

rendszernek nincs megoldása? ($f, g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$)

Példa

$$x_1^2 - x_2^2 + 4x_1x_2 < 0$$

$$x_2^2 - x_1x_2 \leq 0$$

Egyenlőtlenségrendszerek megoldhatósága

Feladat

Honnan tudjuk, hogy az

$$f(x) < 0$$
$$g_i(x) \leq 0, \ \ i = 1, \dots, m$$

rendszernek nincs megoldása? ($f, g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$)

Példa

$$x_1^2 - x_2^2 + 4x_1x_2 < 0$$
$$x_2^2 - x_1x_2 \leq 0$$

Elégséges feltétel

$$\left(x_1^2 - x_2^2 + 4x_1x_2\right) + 2\left(x_2^2 - x_1x_2\right) = x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2 = (x_1 + x_2)^2 \geq 0$$

Egyenlőtlenségrendszerek megoldhatósága

Elégséges feltétel

Tetszőleges f, g_i esetén

$$\exists y \in \mathbb{R}^m,\ \ y \geq 0$$

$$f(x) + \sum_{i=1}^{m} y_i g_i(x) \quad \geq 0,\ \ \forall x \in \mathbb{R}^n$$

$$\Downarrow$$

$$\nexists x \in \mathbb{R}^n$$

$$f(x) < 0$$

$$g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m$$

Egyenlőtlenségrendszerek megoldhatósága

Elégséges feltétel

Tetszőleges f, g_i esetén

$$\exists y \in \mathbb{R}^m,\ y \geq 0$$
$$f(x) + \sum_{i=1}^{m} y_i g_i(x) \quad \geq 0,\ \forall x \in \mathbb{R}^n$$

$$\Updownarrow ?$$

$$\nexists x \in \mathbb{R}^n$$
$$f(x) < 0$$
$$g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m$$

Egyenlőtlenségrendszerek megoldhatósága

Ekvivalens feltétel

Ha f és g_i konvex függvények és $\exists x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) < 0$, akkor

$$\exists y \in \mathbb{R}^m,\ y \geq 0$$

$$f(x) + \sum_{i=1}^{m} y_i g_i(x) \quad \geq 0,\ \forall x \in \mathbb{R}^n$$

$$\Updownarrow$$

$$\nexists x \in \mathbb{R}^n$$

$$f(x) < 0$$

$$g_i(x) \leq 0,\ i = 1, \ldots, m$$

Az S-lemma

Yakubovich (1971)

Ha $f, g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ kvadratikus függvények és $\exists x \in \mathbb{R}^n : g(x) < 0$, akkor

$$\begin{aligned} &\exists y \geq 0 \\ f(x) + y \cdot g(x) &\geq 0, \ \forall x \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

$$\Updownarrow$$

$$\begin{aligned} &\nexists x \in \mathbb{R}^n \\ &f(x) < 0 \\ &g(x) \leq 0 \end{aligned}$$

Konvexitás nélkül!

Kitérő

Kvadratikus függvény (homogén)

$$f(x) = x^T A x,\ A \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ szimmetrikus}$$

Konvex kvadratikus függvény

Ha $A \succeq 0$ (pozitív szemidefinit), vagyis $x^T A x \geq 0,\ \forall x \in \mathbb{R}^n$.

Mátrixok skalárszorzata

$U \bullet V = \mathrm{Tr}\,(UV) = \sum_{i,j=1}^{n} U_{ij} V_{ij}$

$x^T A x = \mathrm{Tr}\,\left(x^T A x\right) = \mathrm{Tr}\,\left(A x x^T\right) = \mathrm{Tr}\,\left(A(x x^T)\right) = A \bullet x x^T$

Az S-lemma, homogén alak

Yakubovich (1971)

$A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ és $\exists x \in \mathbb{R}^n : x^T B x < 0$, akkor

$$\begin{aligned} &\exists y \geq 0 \\ x^T A x + y \cdot x^T B x &\geq 0, \ \forall x \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

$$\Updownarrow$$

$$\begin{aligned} &\nexists x \in \mathbb{R}^n \\ x^T A x &< 0 \\ x^T B x &\leq 0 \end{aligned}$$

Az S-lemma, homogén alak

Yakubovich (1971)

$A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ és $\exists x \in \mathbb{R}^n : x^T B x < 0$, akkor

$$\begin{aligned} \exists y &\geq 0 \\ A + yB &\succeq 0 \text{ (PSD)} \end{aligned}$$

$$\Updownarrow$$

$$\begin{aligned} \nexists x &\in \mathbb{R}^n \\ x^T A x &< 0 \\ x^T B x &\leq 0 \end{aligned}$$

Az S-lemma

- Miért?
- Konvexitás nélkül!
  - Rejtett konvexitás
- Alkalmazások
  - Ljapunov-féle stabilitásvizsgálat
  - Ellipszoidtartalmazás
  - Számítógépes grafika

Klasszikus bizonyítás

- A primál feladat nem megoldható

$$\nexists x : x^T Ax < 0,\ x^T Bx \le 0$$
$$\Leftrightarrow \mathbb{R}_- \times \mathbb{R}_\ominus \cap \underbrace{\left\{(x^T Ax, x^T Bx) : x \in \mathbb{R}^n\right\}}_{\text{konvex! (Dines, 1941)}} = \emptyset$$

Klasszikus bizonyítás

- A primál feladat nem megoldható

$$\begin{aligned} &\nexists x : x^T A x < 0,\; x^T B x \le 0 \\ \Leftrightarrow \mathbb{R}_- \times \mathbb{R}_\ominus \cap &\underbrace{\left\{ (x^T A x, x^T B x) : x \in \mathbb{R}^n \right\}}_{\text{konvex! (Dines, 1941)}} = \emptyset \end{aligned}$$

- Kicsit általánosabb eredmény
(Poljak, 1998) $n \geq 3$, az A, B_1, B_2 mátrixoknak van PD lineáris kombinációjuk

$$\Rightarrow \left\{ (x^T A x, x^T B_1 x, x^T B_2 x) : x \in \mathbb{R}^n \right\} \quad \text{konvex}$$

Klasszikus bizonyítás

- A primál feladat nem megoldható

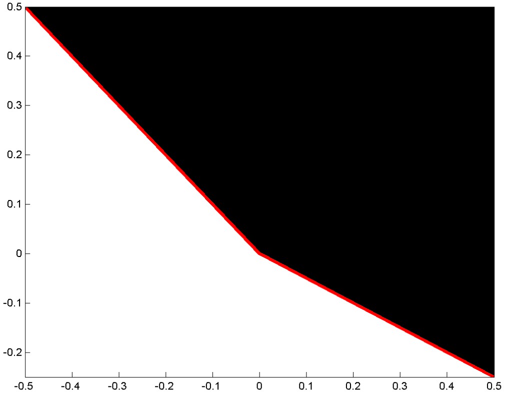
$$\nexists x : x^T Ax < 0,\ x^T Bx \leq 0$$
$$\Leftrightarrow \mathbb{R}_- \times \mathbb{R}_\ominus \cap \underbrace{\left\{(x^T Ax, x^T Bx) : x \in \mathbb{R}^n\right\}}_{\text{konvex! (Dines, 1941)}} = \emptyset$$

- Kicsit általánosabb eredmény
(Poljak, 1998) $n \geq 3$, az A, B_1, B_2 mátrixoknak van PD lineáris kombinációjuk

$$\Rightarrow \left\{(x^T Ax, x^T B_1 x, x^T B_2 x) : x \in \mathbb{R}^n\right\} \quad \text{konvex}$$

- Szeparációs bizonyítás
- Norma-feltétel

Figure: $\left\{(x^T A x, x^T B x) : x \in \mathbb{R}^n\right\}$



$$A = \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \; B = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Vissza a konvexitáshoz!

Modern bizonyítás

Szemidefinit relaxáció

$$\begin{aligned} x^T A x &< 0 \\ x^T B x &\leq 0 \\ x \in \mathbb{R}^n & \end{aligned}$$

Modern bizonyítás

Szemidefinit relaxáció

$$\begin{array}{rcl} x^T A x & < & 0 \\ x^T B x & \leq & 0 \\ x \in \mathbb{R}^n & & \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{array}{rcl} A \bullet x x^T & < & 0 \\ B \bullet x x^T & \leq & 0 \end{array}$$

Modern bizonyítás

Szemidefinit relaxáció

$$\begin{array}{rcl} x^T A x & < & 0 \\ x^T B x & \leq & 0 \\ x \in \mathbb{R}^n & & \end{array} \Leftrightarrow \begin{array}{rcl} A \bullet x x^T & < & 0 \\ B \bullet x x^T & \leq & 0 \end{array} \Leftrightarrow \begin{array}{rcl} A \bullet X & < & 0 \\ B \bullet X & \leq & 0 \\ \operatorname{rank}(X) & = & 1 \\ X & \succeq & 0 \end{array}$$

Modern bizonyítás

Szemidefinit relaxáció

$$\begin{array}{rcl} x^T A x & < & 0 \\ x^T B x & \leq & 0 \\ x \in \mathbb{R}^n & & \end{array} \Leftrightarrow \begin{array}{rcl} A \bullet xx^T & < & 0 \\ B \bullet xx^T & \leq & 0 \end{array} \Leftrightarrow \begin{array}{rcl} A \bullet X & < & 0 \\ B \bullet X & \leq & 0 \\ \operatorname{rank}(X) & = & 1 \\ X & \succeq & 0 \end{array}$$

Modern bizonyítás

Szemidefinit relaxáció

$$\begin{array}{rcl} x^T A x & < & 0 \\ x^T B x & \leq & 0 \\ x \in \mathbb{R}^n & & \end{array} \Leftrightarrow \begin{array}{rcl} A \bullet xx^T & < & 0 \\ B \bullet xx^T & \leq & 0 \end{array} \Leftrightarrow \begin{array}{rcl} A \bullet X & < & 0 \\ B \bullet X & \leq & 0 \\ \operatorname{rank}(X) & = & 1 \\ X & \succeq & 0 \end{array}$$

Pataki, 1998

$\mathcal{A} \subseteq \mathbb{S}^n$ affin altér, $\dim \mathcal{A} \geq \binom{n}{2} - \binom{r+2}{2} + 1$, $\mathbb{PS}^n \cap \mathcal{A} \neq \emptyset$
$\Rightarrow \exists\, X \in \mathbb{PS}^n \cap \mathcal{A}$, amelyre $\operatorname{rank}(X) \leq r$.

Modern bizonyítás

Szemidefinit relaxáció

$$\begin{array}{rcl} x^T A x & < & 0 \\ x^T B x & \leq & 0 \\ x \in \mathbb{R}^n & & \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{array}{rcl} A \bullet xx^T & < & 0 \\ B \bullet xx^T & \leq & 0 \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{array}{rcl} A \bullet X & < & 0 \\ B \bullet X & \leq & 0 \\ \operatorname{rank}(X) & = & 1 \\ X & \succeq & 0 \end{array}$$

Pataki, 1998

$\mathcal{A} \subseteq \mathbb{S}^n$ affin altér, $\dim \mathcal{A} \geq \binom{n}{2} - \binom{r+2}{2} + 1$, $\mathbb{PS}^n \cap \mathcal{A} \neq \emptyset$
$\Rightarrow \exists X \in \mathbb{PS}^n \cap \mathcal{A}$, amelyre $\operatorname{rank}(X) \leq r$.

Barvinok, 2001

$\mathcal{A} \subseteq \mathbb{S}^n$ affin altér, $\dim \mathcal{A} = \binom{n}{2} - \binom{r+2}{2}$, $\mathbb{PS}^n \cap \mathcal{A} \neq \emptyset$ és korlátos
$\Rightarrow \exists X \in \mathbb{PS}^n \cap \mathcal{A}$, amelyre $\operatorname{rank}(X) \leq r$.

A rangfeltétel és a konvexitás ekvivalenciája

- Az $\left\{(x^T Ax, x^T Bx) : x \in \mathbb{R}^n\right\}$ halmaz konvexitása
  - $y, z \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \in [0,1]$
  - Kell: $x \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} x^T Ax &= \lambda y^T Ay + (1-\lambda) z^T Az \\ x^T Bx &= \lambda y^T By + (1-\lambda) z^T Bz \end{aligned}$$

A rangfeltétel és a konvexitás ekvivalenciája

- Az $\left\{(x^T Ax, x^T Bx) : x \in \mathbb{R}^n\right\}$ halmaz konvexitása
  - $y, z \in \mathbb{R}^n$, $\lambda \in [0,1]$
  - Kell: $x \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} x^T Ax &= \lambda y^T Ay + (1-\lambda) z^T Az \\ x^T Bx &= \lambda y^T By + (1-\lambda) z^T Bz \end{aligned}$$

- $X = xx^T$ a következő rendszer 1-rangú megoldása

$$\begin{aligned} A \bullet X &= \lambda y^T Ay + (1-\lambda) z^T Az \\ B \bullet X &= \lambda y^T By + (1-\lambda) z^T Bz \end{aligned}$$

- Pataki: létezik 1-rangú megoldás

Bizonyítás Helly-tétellel

$$H_x = \{y \geq 0 : x^T Ax + y \cdot x^T Bx \geq 0\} \subseteq \mathbb{R}$$

H_x tulajdonságai

- konvex
- zárt
- bármelyik kettő metszete nemüres

$$\Longrightarrow \bigcap_x H_x \neq \emptyset, \text{ vagyis}$$

$$\exists y \geq 0 : x^T Ax + y \cdot x^T Bx \geq 0, \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Bizonyítás Helly-tétellel

$$H_x = \{y \geq 0 : x^T A x + y \cdot x^T B x \geq 0\} \subseteq \mathbb{R}$$

H_x tulajdonságai

- konvex
- zárt
- bármelyik kettő metszete nemüres
- van köztük korlátos! (Slater-feltétel)

$$\Longrightarrow \bigcap_x H_x \neq \emptyset, \text{ vagyis}$$

$$\exists y \geq 0 : x^T A x + y \cdot x^T B x \geq 0, \; \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Elemi bizonyítás

Yuan, 1990

$A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ szimmetrikus mátrixok, $\mathcal{F}, \mathcal{G} \subseteq \mathbb{R}^n$ zárt halmazok, $\mathcal{F} \cup \mathcal{G} = \mathbb{R}^n$. Ha

$$x^T Ax \geq 0,\ x \in \mathcal{F}$$
$$x^T Bx \geq 0,\ x \in \mathcal{G},$$

akkor $\exists\lambda \in [0,1]$, amelyre $\lambda x^T Ax + (1-\lambda)x^T Bx \geq 0,\ \forall x$, vagyis $\lambda A + (1-\lambda)B \succeq 0$.

Kutatási irányok

- Általánosítás
  - több egyenlet
  - speciális mátrixok
  - speciális egyenlőtlenségek
- Alkalmazások

Szemidefinit optimalizálás

Mátrixváltozó

$$\min \ \mathrm{Tr}\,(CX) \qquad\qquad \max \ b^T y$$

$$\mathrm{Tr}\,(A_i X) = b_i, i = 1, \dots, m \qquad\qquad \sum_{i=1}^{m} A_i y_i + S = C$$

$$X \succeq 0 \qquad\qquad S \succeq 0$$

C, X, S, A_i $n \times n$-es szimmetrikus mátrixok, $b, y \in \mathbb{R}^m$

Speciális struktúra: A_i, C lehet ritka, vagy alacsony rangú

Algoritmusok

- Általában belsőpontos módszerek
- Iterációk: $\mathcal{O}(\sqrt{n})$, valójában $50 - 100$
- Egy iteráció költsége: $\mathcal{O}(mn^3 + m^2n^2 + m^3)$
- Megoldható feladatok: $m \leq 10000$, $n \leq 10000$ (ritka mátrixokkal több)
- Nagy pontosság

Implementáció

- Kezdőpont
  - beágyazás
  - nem-megengedett módszerek
- Műveletek ritka mátrixokkal
  - tárolás, szimmetria
  - $UV + VU$, $U + uu^T$
- $Ux = r$ megoldása
  - Cholesky-faktorizáció: $U = LDL^T$
  - Iteratív módszerek
- Speciális struktúrák
  - általános decompozíció (Kojima et al.)
  - egyedi módszerek adott feladatra

Bináris változók relaxációja

Bináris változók: $x_i \in \{0,1\}$

Lineáris relaxáció: $x_i \in [0,1]$

Bináris feltétel ekvivalens alakja:

$$z_i = 2x_i - 1$$
$$z_i^2 = 1\,(\Leftrightarrow z_i = \pm 1)$$

Matrixokkal:

$$Z \succeq 0$$
$$\operatorname{diag}(Z) = 1$$
$$\operatorname{rank}(Z) = 1(\Leftrightarrow Z = zz^T)$$

Gráfpartícionálás

Egy $2m$ csúcsú élsúlyozott gráf csúcsait osszuk fel két egyenlő részre úgy, hogy a két partíció között futó élek összsúlya minimális legyen.

A: incidencia mátrix, A_{kl}: a kl él súlya

$y_{ij} = 1$: az i csúcs a j partícióban van ($j = 1, 2$)

y_j: a j partíció indikátorvektora

$y_j^T A y_j$: $2\times$ a j partícióban lévő élek összsúlya

$\mathrm{Tr}\left(Y^T A Y\right)$: $2\times$ az elvágatlan élek összsúlya

$e^T A e$: $2\times$ az élek összsúlya

$$\min \; e^T A e - \mathrm{Tr}\left(Y^T A Y\right)$$

Y partíciómátrix

SDP relaxáció ($X = YY^T$) $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \min \; e^T A e - \mathrm{Tr}\,(AX) \\ \mathrm{diag}\,(X) = 1 \\ Xe = m \\ X \geq 0 \\ X \succeq 0 \\ \mathrm{rank}\,(X) = 2 \end{aligned}$$

Gráfpartícionálás

Egy $2m$ csúcsú élsúlyozott gráf csúcsait osszuk fel két egyenlő részre úgy, hogy a két partíció között futó élek összsúlya minimális legyen.

A: incidencia mátrix, A_{kl}: a kl él súlya

$y_{ij} = 1$: az i csúcs a j partícióban van ($j = 1, 2$)

y_j: a j partíció indikátorvektora

$y_j^T A y_j$: $2\times$ a j partícióban lévő élek összsúlya

$\mathrm{Tr}\left(Y^T A Y\right)$: $2\times$ az elvágatlan élek összsúlya

$e^T A e$: $2\times$ az élek összsúlya

$$\min \; e^T A e - \mathrm{Tr}\left(Y^T A Y\right)$$

Y partíciómátrix

SDP relaxáció ($X = YY^T$) $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \min \; e^T A e - \mathrm{Tr}\,(AX) \\ \mathrm{diag}\,(X) = 1 \\ Xe = m \\ X \geq 0 \\ X \succeq 0 \\ \mathrm{rank}\,(X) = 2 \end{aligned}$$

Komplexitás: $\mathcal{O}(m^{6.5})$!

Polinomoptimalizálás I

Tétel

Ha $p(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ egyváltozós polinom, akkor
$p(x) \geq 0, \forall x \Leftrightarrow p(x)$ négyzetösszeg (SOS)

Példa

$p(x) = x^6 - 5x^4 + 6x^3 + 8x^2 - 14x + 5$

Polinomoptimalizálás I

Tétel

Ha $p(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ egyváltozós polinom, akkor
$p(x) \geq 0, \forall x \Leftrightarrow p(x)$ négyzetösszeg (SOS)

Példa

$p(x) = x^6 - 5x^4 + 6x^3 + 8x^2 - 14x + 5 = (x^2 + x - 1)^2 + (x^3 - 3x + 2)^2$

Polinomoptimalizálás I

Tétel

Ha $p(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ egyváltozós polinom, akkor
$p(x) \geq 0, \forall x \Leftrightarrow p(x)$ négyzetösszeg (SOS)

Példa

$p(x) = x^6 - 5x^4 + 6x^3 + 8x^2 - 14x + 5 = (x^2 + x - 1)^2 + (x^3 - 3x + 2)^2$
Általában nem igaz: $z^6 + x^4y^2 + x^2y^4 - 3x^2y^2z^2 \geq 0$, de nem SOS

Polinomoptimalizálás I

Tétel

Ha $p(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ egyváltozós polinom, akkor
$p(x) \geq 0, \forall x \Leftrightarrow p(x)$ négyzetösszeg (SOS)

Példa

$p(x) = x^6 - 5x^4 + 6x^3 + 8x^2 - 14x + 5 = (x^2 + x - 1)^2 + (x^3 - 3x + 2)^2$
Általában nem igaz: $z^6 + x^4y^2 + x^2y^4 - 3x^2y^2z^2 \geq 0$, de nem SOS

$$\min\ p(x) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{array}{c} \max\ t \\ p(x) - t \geq 0,\ \forall x \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{array}{c} \max\ t \\ p(x) - t \text{ is SOS} \end{array}$$

Polinomoptimalizálás II

$q = (1, x, x^2, \ldots, x^n)$

Négyzet:

$$p(x) = \left(\sum_{i=0}^{n} u_i x^i\right)^2 = \left(\sum_{i=0}^{n} u_i q_i\right)^2 = (u^T q)^2 = q^T (u u^T) q$$

SOS: $q^T U q$, ahol $U \succeq 0$

$$\begin{aligned} u_{44} &= 1 \\ u_{34} + u_{43} &= 0 \\ u_{24} + u_{33} + u_{42} &= -5 \\ u_{14} + u_{23} + u_{32} + u_{41} &= 6 \\ u_{13} + u_{22} + u_{31} &= 8 \\ u_{21} + u_{12} &= -14 \\ u_{11} &= 5 \\ U &\succeq 0 \end{aligned}$$

$$U = \begin{pmatrix} 5 & -7 & -1 & 2 \\ -7 & 10 & 1 & -3 \\ -1 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$u^{(1)} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$u^{(2)} = \begin{pmatrix} 2 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Software: (Gloptipoly, SOSTools), Yalmip

Kutatási irányok

- 1994 óta nincs lényeges eredmény
- Speciális struktúrák
- Új algoritmusok
  - szimplex, perceptron, gravity, megengedett irányok, row-by-row, ...
- Kapcsolódó kutatások
  - SOCP
  - Kopozitív optimalizálás ($x^T U x \geq 0, \forall x \geq 0$)
- Egészértékű és bináris változók