SDPA の使い方

徳重典英 2025.01.21

1 半正定値計画法の文献、ソフトウェア

半正定値計画法の数学的な枠組みの概略は [5] によくまとまっている。[6] は組合せ論における応用についてより詳しく扱っている。

ここには NEOS Server で使用可能な半正定値計画のソフトウェアの一覧がある。本稿ではこの中の SPDA について紹介する。

2 SDPA のマニュアル等

[1] は SDPA の簡単な紹介である。詳しい使用法は [2, 3] から得られる 1 。

SDPA は小島政和、藤沢克樹らによって 1995 年から開発がはじまった SDP に対する主 双対内点法のソフトウェアである。本稿ではこれを NEOS Server から利用する方法を紹介する 2 。

3 具体例

3.1 入力ファイル

次の半正定値問題³⁾ を SDPA で記述しよう。(これは SDPA では「主問題」とされる。)

ここで行列はすべて2次の実対称行列とし、

$$C = \begin{bmatrix} \frac{9}{16} & \frac{3}{16} \\ \frac{3}{16} & \frac{1}{16} \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} \frac{3}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix}, A = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_2 & 0 \end{bmatrix}, Z = \begin{bmatrix} z_1 & z_2 \\ z_2 & z_3 \end{bmatrix}$$

¹⁾ 以前はネット上に[2]と同内容(と思われるがページがずれている)の pdf があったのだが、、、

^{2) [4]} では SDPA をローカル環境に構築する方法が紹介されている。

³⁾ これは $n=1, p=\frac{1}{4}$ のとき、1 交差族の最大 μ_p 測度の上界を与える問題に対応する。数学的には trivial で最大測度は $\frac{1}{4}$ だが、SDPA でこの問題を解くと α の最小値の数値的近似解は $\frac{1}{4}$ に極めて近い。

とする。変数は $\alpha, x_1, x_2, z_1, z_2, z_3$ (6 個) である。SDPA の仕様により、S の定義における 定数行列 C の係数が -1 であることに注意する。

この問題の目的関数は α ,制約条件は $S\succeq 0$ (S は半正定値行列)と $Z\geq 0$ (Z は非負行列、すなわち成分はすべて非負)である。SDPA は制約条件のもとで目的関数を最小化するような変数の値の数値的近似解を求めることができる。

 z_i たちが非負という条件は $Z' = \begin{bmatrix} z_1 & 0 & 0 \\ 0 & z_2 & 0 \\ 0 & 0 & z_3 \end{bmatrix} \succeq 0$ と同値である。ここで 5 次行列 \tilde{C} を

と定め、同様に5次行列 \tilde{D} , \tilde{A} , \tilde{Z} を

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \ \tilde{A} = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \ \tilde{Z} = \begin{bmatrix} Z & 0 \\ 0 & Z' \end{bmatrix}$$

と定める。このとき(1)の制約条件は

$$\tilde{S} = -\tilde{C} + \alpha \tilde{D} + \tilde{A} - \tilde{Z} \succeq 0 \tag{2}$$

と書き換えられる。さらに

とおくと、(2)は

$$\tilde{S} = -\tilde{C} + \alpha \tilde{D} + x_1 \tilde{A}_1 + x_2 \tilde{A}_2 + z_1 \tilde{Z}_1 + z_2 \tilde{Z}_2 + z_3 \tilde{Z}_3 \succeq 0$$
(3)

と表せる。結局、(1) の問題は、(3) のもとで α を最小化する標準的な半正定値問題となった。この問題は以下のデータを含む。

- 変数の個数は 6 個で、順に $\mathbf{v} = (\alpha, x_1, x_2, z_1, z_2, z_3)$.
- (3) の行列は共通の型をもつブロック対角行列で、2個のブロックからなる。
- そのブロックは順に次数2の対称行列と次数3の対角行列である。
- 目的関数(この問題では α)を $\mathbf{c} \cdot \mathbf{v}$ と表すと、 $\mathbf{c} = (1,0,0,0,0,0)$.

SDPA の入力ファイルの先頭 4 行は上記のデータを次のように記述する。

6 2 (2,-3) {1,0,0,0,0,0,0} 1 行目は変数の個数、2 行目はブロックの個数、3 行目はブロックの次数を並べるが、n 次対称行列ならば n, m 次対角行列ならば -m のように書く。4 行目はベクトル c を書く。 入力ファイルの 5 行目以降は (3) の右辺の行列を記述する。これも (3) の順に並べ、 \tilde{C} を 0 番、 \tilde{D} を 1 番、 \tilde{A}_1 を 2 番とし、以下同様に番号をふって \tilde{Z}_3 を 6 番とする。変数のかかっていない行列(今回は \tilde{C})の番号は必ず 0 番とする。行列の成分は

klijs

のように書く。これは k 番の行列の第 l ブロックの (i,j) 成分は s という意味である。例えば \tilde{C} は

0 1 1 1 0.5625 0 1 1 2 0.1875

0 1 2 2 0.0625

と書く。C は対称行列なので (2,1) 成分は書かなくてよい (書いてもよい)。それ以外で記述のない成分は 0 とみなされる。行列 \tilde{Z}_2 は

5 1 1 2 -1 5 2 2 2 1

と表せる。入力ファイルの全体を完全な形で書くと次のようになる。

6

2

(2,-3)

{1,0,0,0,0,0}

0 1 1 1 0.5625

0 1 1 2 0.1875

0 1 2 2 0.0625

1 1 1 1 0.75

1 1 2 2 0.25

2 1 1 1 1

3 1 1 2 1

4 1 1 1 -1

4 2 1 1 1

5 1 1 2 -1

5 2 2 2 1

6 1 2 2 -1

6 2 3 3 1

実際の研究で用いる行列は複雑で次数も大きいため、入力ファイルはプログラムで生成するのがよい。

3.2 実行方法

前節で作った入力ファイルの名前を "ex.dat-s" としよう 4 。SDPA をローカル環境に構築することもできるらしい [4] が、ここでは NEOS server を利用する方法を紹介する。

- 1. ブラウザで NEOS Interfaces to SDPA (https://neos-server.org/neos/solvers/sdp: SDPA/SPARSE SDPA.html) に接続する。
- 2. Web Submission Form の SDPA data に入力ファイルを指定する (今回は "ex.dat-s")。
- 3. Precision を指定する。はじめは double で試して、より精密に調べたいときは quadruple を指定するとよい。
- 4. Additional Settings でメールアドレスを入力。
- 5. Sumbit to NEOS ボタンをクリック。
- 6. しばらくすると結果が表示される(メールでも送られてくる)。

以下に quadruple で実行した場合の結果の一部を示す。 この問題の α の真の値は 1/4

phase.value = dFEAS
 Iteration = 35
 mu = 6.4453585130804993e-18
relative gap = 1.3840612359273038e-17
 gap = 3.2226792565402498e-17
 digits = 1.6256784703351158e+01
objValPrimal = 2.5000000000000000e-01
objValDual = 2.5000000000000000e-01
p.feas.error = 4.3368086899420177e-19
d.feas.error = 3.3787568866817071e-31
relative eps = 4.9303806576313200e-32
total time = 0.000

であるが、これを SDPA が数値的に求めたものが obj Val Primal と obj Val Dual である。

3.3 結果(出力ファイル)の見方

出力ファイルの詳細は [2] の Appendix A.5 まはた [3] の 6.2 に解説されている。ここでは簡単に重要な項目の見方を紹介する。

- phase.value: SDPA 終了時の状態。
 - pdOPT: 主問題、双対問題がともに実行可能で、近似最適解が得られた(正常終了)。

⁴⁾ この例の行列の記述は疎行列の入力データ形式であるため、ファイルの拡張子は ".dat-s" とする。

- pdFEAS: 主問題、双対問題がともに実行可能だが、反復回数が上限に達して終了した(2つの実行可能解が一致しない)。
- pFEAS: 主問題が実行可能だが、反復回数が上限に達して終了した。
- -dFEAS: 双対問題が実行可能だが、反復回数が上限に達して終了した。

これ以外の状態が得られた場合は、何らかの原因で実行は失敗した(情報が得られなかった、問題が適切に設定されていないなど)と考えられる。

- objValPrimal: 主問題の目的関数値(今回の例では min α の上界に相当)。
- objValDual: 双対問題の目的関数値。 $(\min \alpha \text{ on }$ の下界に相当)。
- xVect: 主問題の変数ベクトル(今回の例では $\mathbf{v} = (\alpha, x_1, x_2, z_1, z_2, z_3)$ に相当)。
- xMat: 主問題の変数行列(今回の例では S に相当)。

参考文献

- [1] 藤沢克樹. SDPA (半正志値計画問題に対するソフトウエア) 経営の科学 オペレーションズ・リサーチ 2000 (45) 125-131. https://orsj.org/wp-content/or-archives50/pdf/bul/Vol.45 03 125.pdf
- [2] 藤沢克樹. 半正定値計画問題に対する主双対内点法の実装と実験的解析. 1997 年度東京工業大学大学院情報理工学研究科数理・計算科学専攻学位論文 https://dl.ndl.go.jp/pid/3144617/1/1
- [3] Katsuki Fujisawa, Mituhiro Fukuda, Kazuhiro Kobayashi, Masakazu Kojima, Kazuhide Nakata, Maho Nakata, and Makoto Yamashita. SDPA (SemiDefinite Programming Algorithm) and SDPA-GMP User's Manual Version 7.1.1 June 18th 2008, B-448. https://sourceforge.net/projects/sdpa/files/sdpa/sdpa.7.1.1.manual. 20080618.pdf
- [4] @ Topology (satoharu satosato) 半正定値計画問題のソルバー SDPA のインストール 方法 (Last updated at 2020-09-10 Posted at 2020-09-10) https://qiita.com/Topology/items/b46f6abd7be4508175f3
- [5] M. J. Todd, Semidefinite optimization, Acta Numer. 10 (2001) 515–560.
- [6] B. Gärtner, J. Matoušek. Approximation algorithms and semidefinite programming. Springer, Heidelberg, 2012. xii+251 pp.