3 Релаксации полиномиальных задач

На этой лекции мы рассмотрим полу-определенные релаксации оптимизационных задач с полиномиальными данными. Здесь можно выделить два концептуально разных, но тесно связанных между собой подхода, а именно релаксации типа сумм квадратов (sum of squares — SOS) и моментные релаксации.

Тематика сумм квадратов восходит к Гильберту, но в применении к оптимизации путем полу-определенных релаксаций пожалуй впервые упомянута в статье Ю.Е. Нестерова [5] и диссертации П. Паррило [6] в 2000 г. В рассматриваемых в этом контексте задачах искомым объектом является *полином*, представленный вектором своих коэффициентов, а в качестве конических ограничений выступают условия неотрицательности этого полинома либо на пространстве $\mathbb{R}^n$, либо на множествах, задаваемых полиномиальными ограничениями. По сути, задача ставится в некотором конечно-мерном пространстве полиномиальных функций.

Во втором подходе искомым объектом является вектор *моментов* неотрицательных мер на некотором множестве $X \subset \mathbb{R}^n$, задающемся полиномиальными ограничениями. Этот подход более гибкий с точки зрения возможностей построить полу-определенные релаксации. Его теория и приложения подробно описаны в являющейся ныне стандартом в этой области монографии Ж.-Б. Лассера [3].

В этой части 4 упражнения.

3.1 Выпуклая формулировка общей задачи оптимизации

В оптимизации принято считать, что водораздел между простыми и сложными проблемами определяется тем, выпукла ли задача или нет. В основном эта точка зрения соответствует действительному положению дел. Однако, исключения из этого правила встречаются нередко, и на этой лекции мы еще рассмотрим класс сложных, но тем не менее формально выпуклых коположительных программ. Более того, оказывается, что *любую* задачу оптимизации можно эквивалентно записать в виде выпуклой задачи.

Рассмотрим общую проблему оптимизации

$$\min_{x \in X} \ f(x)$$

с допустимым множеством $X \subset \mathbb{R}^n$ и функцией цены f. В качестве требований мы предъявим лишь измеримость множества X и непрерывность функции f. Задачу можно переписать в виде

$$\min_{\mu \in \mathcal{M}} \int_X f(x) d\mu(x) \ : \quad \int_X d\mu(x) = 1,$$

где $\mathcal{M}$ — конус неотрицательных мер на множестве X. На этом бесконечно-мерном конусе мы минимизируем линейный функционал с одним линейным ограничением. Другими словами, мы минимизируем мат. ожидание значения функции цены f по всем вероятностным мерам на допустимом множестве X.

Отметим концептуальное сходство этой формулировки с полу-определенной релаксацией квадратичных задач. В обоих случаях допустимое множество представляется в виде невыпуклого множества в некотором векторном пространстве, причем таким образом, что функция цены описывается неким линейным функционалом. В случае полу-определенной релаксации точки $x \in \mathbb{R}^n$ допустимого множества представляются матрицами $xx^T \in \mathcal{S}_+^n$ ранга 1, а в рассматриваемом выше случае — дельта-функциями с носителем в точке x. Далее допустимое множество расширяется до выпуклой оболочки образа исходного множества X. В случае релаксации квадратичных задач получаем матричный конус, а в выше-описанном случае — множество вероятностных мер. Отметим, что дельта-функции являются в точности экстремальными точками множества вероятностных мер.

Решение выпуклой формулировки в пространстве мер наталкивается на ряд принципиальных трудностей. Во-первых, это пространство и определенный в нем конус неотрицательных мер бесконечно-мерны. Для дизайна численных алгоритмов нужно свести задачу к конечно-мерной. Если множество X и функция f обладают полиномиальным описанием, то этот шаг удается сделать без дополнительных аппроксимаций. В этом случае все возникающие выражения, зависящие от меры, описываются через конечное число моментов этой меры. Этим объясняется, что данный подход на практике весьма успешно применяется к полиномиальным задачам.

Вторая трудность заключается в том, что даже конечно-мерный образ конуса неотрицательных мер в общем случае не имеет численно эффективно доступного описания, и приходится прибегать к релаксациям. Тем не менее, в ряде важных случаев эти релаксации оказываются точными, что позволяет эффективно решать соответствующие классы задач.

Перед тем, как перейти к описанию метода моментов для полиномиальных задач, мы представим интуитивно более доступную и исторически гораздо более раннюю концепцию сумм квадратов.

3.2 Положительные полиномы и суммы квадратов

Теория, изложенная в этом разделе, применима к коническим программам над конусами неотрицательных полиномов. Мы рассмотрим полу-определенные аппроксимации, а в некоторых случаях и полу-определенные представления этих конусов.

Обозначим конус неотрицательных однородных полиномов степени d от n вещественных переменных через $P_{d,n}$. Ясно, что $P_{d,n}$ содержит ненулевой элемент тогда и только тогда, когда d четно. В этом случае $P_{d,n}$ является регулярным выпуклым конусом. Полином $p \in P_{d,n}$ является внутренней точкой конуса тогда и только тогда, когда он строго положителен на единичной сфере $S^{n-1} \subset \mathbb{R}^n$. В противном случае он должен обращаться в ноль хотя бы в одной точке $x \in S^{n-1}$.

Упражнение 3.1: Пусть $p \in \partial P_{d,n}$ — полином на границе конуса неотрицательных полиномов. Построить подпирающую гиперплоскость к конусу $P_{d,n}$ в точке p, т.е., гиперплоскость H такую, что $p \in H$, а конус $P_{d,n}$ целиком лежит в одном из двух замкнутых полу-пространств, определяемых H.

Рассмотрим в качестве примера конус $\mathcal{COP}^n$ коположительных матриц. Симметрическая матрица $A \in \mathcal{S}^n$ называется *коположительной*, если для всех неотрицательных векторов $x \in \mathbb{R}^n_+$ выполнено неравенство $x^T A x \geq 0$. Ясно, что матрица A коположительна тогда и только тогда, когда полином четвертой степени

$$p_A(x) = \sum_{i,j=1}^n A_{ij} x_i^2 x_j^2$$

является неотрицательным, т.е., элементом конуса $P_{4,n}$. Таким образом, конус $\mathcal{COP}^n$ обладает представлением через линейное сечение конуса неотрицательных полиномов $P_{4,n}$. Однако, установить принадлежность произвольной матрицы $A \in \mathcal{S}^n$ к конусу $\mathcal{COP}^n$ является ко-NP-полной задачей [4].

Поэтому решить, принадлежит ли данный полином $p(x)$ к конусу $P_{2d,n}$ или нет, в общем случае является сложной проблемой. Основной алгоритмически доступной аппроксимацией конуса неотрицательных полиномов является конус сумм квадратов.

Определение 1. *Конусом сумм квадратов $\Sigma_{2d,n}$ называется множество однородных полиномов $p(x)$ четной степени $2d$ от n вещественных переменных, которые представляются в виде конечной суммы $p(x) = \sum_k q_k^2(x)$, где $q_k(x)$ — однородные полиномы степени d.*

Ясно, что $\Sigma_{d,n} \subset P_{d,n}$, и $\Sigma_{d,n}$ является *внутренней* аппроксимацией $P_{d,n}$.

Построим полу-определенное представление конуса $\Sigma_{2d,n}$. Для этого введем вектор $\mathbf{x}$ всех мономов вида $x^\alpha := \prod_{k=1}^n x_k^{\alpha_k}$ степени d. Здесь $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$ — мульти-индекс, в котором сумма $|\alpha| := \sum_{k=1}^n \alpha_k$ экспонент равна d. Размерность $\begin{pmatrix} n+d-1 \\ d \end{pmatrix}$ вектора $\mathbf{x}$ обозначим через N.

Лемма 1. *Однородный полином p степени $2d$ от n переменных $x_1, \dots, x_n$ является элементом конуса $\Sigma_{2d,n}$ тогда и только тогда, когда существует неотрицательно определенная матрица $A \in \mathcal{S}_+^N$ такая, что $p(x) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$.*

Доказательство: Пусть существует матрица $A \in \mathcal{S}_+^N$ такая, что $p(x) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$. Представим A в виде произведения $A = B^T B$, где $B \in \mathbb{R}^{k \times N}$. Обозначим строки фактора B через b_j, $j = 1, \dots, k$. Тогда имеем

$$p(x) = \mathbf{x}^T B^T B \mathbf{x} = \sum_{j=1}^k \langle b_j, \mathbf{x} \rangle^2,$$

и p представлено в виде суммы квадратов k полиномов $q_j(x) = \langle b_j, \mathbf{x} \rangle$ степени d. Отсюда следует включение $p \in \Sigma_{2d,n}$.

Теперь допустим, что $p \in \Sigma_{2d,n}$. Тогда существуют k однородных полиномов $q_1(x), \dots, q_k(x)$ степени d таких, что $p(x) = \sum_{j=1}^k q_j^2(x)$. Полином $q_j(x)$ можно записать как скалярное произведение $\langle c_j, \mathbf{x} \rangle$, где $c_j \in \mathbb{R}^N$ — его вектор коэффициентов. Составим матрицу $C \in \mathbb{R}^{k \times N}$ таким образом, что векторы c_j являются ее строками. Тогда получим

$$p(x) = \sum_{j=1}^k \langle c_j, \mathbf{x} \rangle^2 = \mathbf{x}^T C^T C \mathbf{x},$$

и полином $p(x)$ представлен в виде произведения $\mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ с неотрицательно определенной матрицей $A = C^T C$. □

Из леммы вытекает, что конус сумм квадратов $\Sigma_{2d,n}$ линейно изоморфен проекции матричного конуса $\mathcal{S}_+^N$. Зададим эту проекцию в явном виде. Напомним, что коэффициенты полиномов $p \in \Sigma_{2d,n}$ индексируются мульти-индексами $\alpha \in \mathbb{N}^n$ с суммой $2d$, в то время как элементы вектора $\mathbf{x}$ индексируются мульти-индексами $\beta \in \mathbb{N}^n$ с суммой d. Определим линейную проекцию Π, сопоставляющую каждой матрице $A \in \mathcal{S}^N$ полином $p(x)$ с коэффициентами

$$c_\alpha = \sum_{\beta,\gamma:\beta+\gamma=\alpha} A_{\beta\gamma}. \tag{1}$$

Тогда $\Pi(A) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$, и из леммы следует представление $\Sigma_{2d,n} = \Pi[\mathcal{S}_+^N]$.

Технически для описания условия $p \in \Sigma_{2d,n}$ достаточно ввести дополнительную матричную переменную $A \in \mathcal{S}_+^N$ и связать ее элементы с коэффициентами p через линейные условия (1). Применимость релаксаций типа сумм квадратов ограничена сложностью полу-определенного условия $A \succeq 0$, поскольку порядок N матрицы очень быстро увеличивается с ростом n и d. С другой стороны, линейные условия (1) на элементы A задаются разреженными матрицами. В последние годы было предложено аппроксимировать условие $A \succeq 0$ более простыми линейными или конично-квадратичными ограничениями [1].

Конуса неотрицательных полиномов и сумм квадратов можно аналогичным образом определить в произвольных конечно-мерных линейных пространствах полиномов, в частности, в пространствах неоднородных полиномов от n переменных степени, не превосходящей d.

В ряде случаев релаксация конуса положительных полиномов суммами квадратов точна. Когда именно равенство $P_{2d,n} = \Sigma_{2d,n}$ имеет место, было известно еще в 19-ом веке.

Теорема 3.1. *Пусть $n, d \in \mathbb{N}_+$, d четное. Равенство $\Sigma_{d,n} = P_{d,n}$ справедливо тогда и только тогда, когда либо $\min(d,n) \leq 2$, либо $(d,n) = (4,3)$.*

Упражнение 3.2: Доказать теорему для случая $d = 2$.

Случай $n = 2$. Однородный полином степени n от двух переменных x, y можно записать в виде $p(x,y) = \sum_{k=0}^d c_k x^k y^{d-k}$. Предположим, что p не равен тождественно нулю (в противном случае он является элементом обоих конусов $P_{d,2}$ и $\Sigma_{d,2}$). Тогда линейной заменой переменных можно добиться, что $c_d \neq 0$. Пусть $z_1, \dots, z_d$ — корни полинома $\sum_{k=0}^d c_k z^k$. Тогда этот полином можно записать в виде произведения $c_d \prod_{k=1}^d (z - z_k)$. Из этого следует представление

$$p(x,y) = c_d \prod_{k=1}^d (x - z_k y). \tag{2}$$

Допустим теперь, что $p \in P_{d,2}$. Тогда $c_d = p(1,0) > 0$, и из этого коэффициента можно извлечь вещественный квадратный корень. Кратность всякого вещественного корня z_k должна быть четной, иначе p будет отрицательным в некоторых точках, достаточно близких к $(x,y) = (z_k, 1)$. Следовательно, соответствующие множители в произведении (2) представляются квадратами. К любому комплексному корню $z_k = a_k + ib_k$ существует комплексно-сопряженный корень $z_{k'} = \bar{z}_k = a_k - ib_k$, и соответствующее произведение может быть записано в виде

$$(x - z_k y)(x - z_{k'} y) = x^2 - 2a_k xy + (a_k^2 + b_k^2) y^2 = (x - a_k y)^2 + (b_k y)^2.$$

Отсюда получаем представление полинома (2) в виде суммы квадратов, чем доказывается включение $p \in \Sigma_{d,2}$. □

Более сложный случай $(d, n) = (4, 3)$ был доказан Гильбертом в 1888 г. методами алгебраической геометрии, хотя сейчас известны и более элементарные доказательства.

Во всех остальных случаях конус $P_{2d,n}$ не является полу-определенно представимым [7].

Для того, чтобы проверить существование представления в виде суммы квадратов для конкретного полинома, не обязательно работать в пространстве матриц $\mathcal{S}^N$. Введем следующее понятие.

Определение 2. *Пусть $p(x) = \sum_\alpha c_\alpha x^\alpha$ — полином от n переменных.* Политопом Ньютона *полинома p называют выпуклую оболочку множества мульти-индексов $\{\alpha \in \mathbb{N}^n \mid c_\alpha \neq 0\}$.*

Лемма 2. *Пусть $p(x) = \sum_\alpha c_\alpha x^\alpha$ — полином от n переменных, представимый в виде суммы квадратов $\sum_j q_j(x)^2$, и пусть P — его политоп Ньютона. Тогда справедливы следующие утверждения:*

- *экстремальные точки политопа P имеют только четные компоненты,*
- *коэффициенты c_α, соответствующие экстремальным точкам α политопа P, строго положительны,*
- *мульти-индексы β, соответствующие ненулевым коэффициентам полиномов q_j, являются элементами политопа $\frac{1}{2}P$.*

В частности, если полином p — разреженный, то часто для проверки включения $p \in \Sigma_{2d,n}$ возможно обойтись рассмотрением матриц размера, гораздо меньшего, чем N.

Стандартным примером неотрицательного полинома, не представляемого в виде суммы квадратов других полиномов, является *полином Моцкина* $p_M(x, y, z) = x^4y^2 + x^2y^4 + z^6 - 3x^2y^2z^2$. Этот полином является элементом конуса $P_{6,3}$ вследствие неравенства между алгебраическим и геометрическим средним.

Упражнение 3.3: Доказать, что полином Моцкина не является элементом конуса $\Sigma_{6,3}$.

Тем не менее, неотрицательность полинома Моцкина можно все же доказать с помощью представления его в виде суммы квадратов. Но для этого нужно расширить или изменить класс функций, которые могут выступать в роли факторов q_j. А именно, имеем представление

$$p_M(x, y, z) = (u^2 + v^2 + z^2) \cdot \begin{pmatrix} u^2 \\ v^2 \\ z^2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^2 \\ v^2 \\ z^2 \end{pmatrix},$$

где $u = x^{2/3}y^{1/3}$, $v = x^{1/3}y^{2/3}$. Представление вытекает из соотношения $(\sqrt{\frac{2}{3}}J)^2 = J$, которому удовлетворяет 3×3 матрица коэффициентов J, фигурирующая в формуле.

Сертификат неотрицательности полинома Моцкина можно также получить, разложив произведение $(x^2 + y^2 + z^2) \cdot p_M(x, y, z)$ в сумму квадратов полиномов 4-й степени. Но тогда и произведение $(x^2 + y^2 + z^2)^2 \cdot p_M(x, y, z)$ является суммой квадратов полиномов, и p_M представляемо в виде суммы квадратов от рациональных функций.

Справедлив следующий общий результат.

17-ая проблема Гильберта: Любой неотрицательный полином может быть представлен в виде суммы квадратов *рациональных* функций.

Утверждение было доказано Э. Артином в 20-х гг.

Теперь мы перейдем к важному для вычислительной практики случая *матричных* полиномов от одной переменной, для которого релаксация положительных полиномов суммами квадратов точна.

Теорема 3.2. *Пусть $A_0, \dots, A_{2m} \in \mathcal{S}^n$ — симметрические матрицы такие, что матричный полином $A(t) = \sum_{j=0}^{2m} A_j t^j$ степени $2m$ положительный, т.е., $x^T A(t) x \geq 0$ для всех $t \in \mathbb{R}$ и $x \in \mathbb{R}^n$. Тогда найдутся матрицы $B_0, \dots, B_m \in \mathbb{R}^{n \times k}$ такие, что $A(t) = B(t)B(t)^T$, где $B(t) = \sum_{j=0}^m B_j t^j$ — матричный полином степени m.*

Доказательство теоремы разобьем на несколько этапов.

Лемма 3. *Пусть $H \in \mathcal{S}_+^{n(m+1)}$ — неотрицательно определенная блочно-ханкелевая матрица с блоками размера n. Тогда H представляется в виде суммы неотрицательно определенных блочно-ханкелевых матриц ранга 1.*

Доказательство: Профакторизуем $H = FF^T$ так, что $F \in \mathbb{R}^{n(m+1)\times l}$ состоит из блоков $F_0, \dots, F_m \in \mathbb{R}^{n\times l}$. Умножением F справа на ортогональную матрицу можно добиться того, что F_i разделится на подблоки $F_i = (F_{i1}, F_{i2})$ размера $n \times l_1$ и $n \times l_2$, соответственно, так чтобы подматрица $F_I \in \mathbb{R}^{nm\times l_2}$ матрицы F, состоящая из блоков $F_{02}, \dots, F_{m-1,2}$, имела полный ранг, а $F_{01} = \dots = F_{m-1,1} = 0$. Определим также подматрицу $F_{II} \in \mathbb{R}^{nm\times l_2}$ матрицы F, состоящую из блоков $F_{12}, \dots, F_{m2}$.

Так как H — блочно-ханкелевая, ее верхний правый угол размера $mn\times mn$ совпадает с нижним левым углом того же размера. Из этого следует соотношение $F_I F_{II}^T = F_{II} F_I^T$. Так как F_I имеет полный ранг, то образ F_{II} содержится в образе F_I, и найдется матрица $\Lambda \in \mathbb{R}^{l_2\times l_2}$ такая, что $F_{II} = F_I \Lambda$. Далее из соотношения $F_I F_{II}^T = F_{II} F_I^T$ следует, что Λ симметрическая. Пусть $\Lambda = UDU^T$ — спектральное разложение матрицы Λ, где U — ортогональная, а D — диагональная матрица. Заменив F_I, F_{II} на $F_I U, F_{II} U$, можно считать, что $\Lambda = D = \mathrm{diag}(d_{l_1+1}, \dots, d_l)$.

Таким образом, первые l_1 столбцов f_j фактора F имеют вид $(0; 0; \dots; 0; x_j)$, $j = 1, \dots, l_1$, а последние l_2 столбцов имеют вид $(x_j; d_j x_j; d_j^2 x_j; \dots; d_j^m x_j)$, $j = l_1 + 1, \dots, l$. Из этого следует, что матрицы $f_j f_j^T$ ранга 1 сами блочно-ханкелевы. □

Лемма 4. *Пусть $A(t) = \sum_{j=0}^{2m} A_j t^j$ — положительный матричный полином, а $H \in \mathcal{S}_+^{n(m+1)}$ — блочно-ханкелевая матрица с блоками $H_0, \dots, H_{2m} \in \mathcal{S}^n$. Тогда $\sum_{i=0}^{2m} \langle A_i, H_i\rangle \geq 0$. В частности, существует такая матрица $\mathbf{A} \in \mathcal{S}_+^{n(m+1)}$, состоящая из $n \times n$ блоков A_{ij}, $i, j = 0, \dots, m$, что $A_k = \sum_{i+j=k} A_{ij}$.*

Доказательство: Ввиду предыдущей леммы можно без ограничения общности считать, что ранг H равен 1. Но тогда либо у H ненулевой всего лишь правый нижний угол размера n, либо найдется вектор $x \in \mathbb{R}^n$ и число $\lambda \in \mathbb{R}$ такое, что $H_i = \lambda^i xx^T$ для всех $i = 0, \dots, 2m$. В обоих случаях выражение $\sum_{i=0}^{2m} \langle A_i, H_i\rangle$ будет неотрицательно определенной одноранговой матрицей вследствие условия на A. В первом случае, потому что старший коэффициент A_{2m} неотрицательно определенный, а во втором, потому что выражение имеет вид $(\sum_{i=0}^{2m} A_i \lambda^i) xx^T$.

Второе утверждение получается применением конической двойственности. Раз набор симметрических матриц $(A_0, \dots, A_{2m})$ неотрицателен на любом наборе симметрических матриц $(H_0, \dots, H_{2m})$, представляющих блочно-ханкелевую неотрицательно определенную матрицу, то $(A_0, \dots, A_{2m})$ является элементом конуса, двойственного к конусу блочно-ханкелевых неотрицательно определенных матриц. Но этот двойственный конус характеризуется в точности существованием неотрицательно определенной матрицы $\mathbf{A}$ с требуемыми свойствами. □

Теперь теорема доказывается факторизацией $\mathbf{A} = \mathbf{B}\mathbf{B}^T$ матрицы $\mathbf{A}$, где $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n(m+1)\times k}$. Искомые коэффициенты B_j получаются разбиением $\mathbf{B}$ на $m + 1$ блоков. □

Пример: Рассмотрим коположительный конус $\mathcal{COP}^n$ всех квадратичных форм $A \in \mathcal{S}^n$, неотрицательных на неотрицательном ортанте. Выше мы охарактеризовали включение $A \in \mathcal{COP}^n$ условием $p_A(x) = \sum_{i,j=1}^n A_{ij} x_i^2 x_j^2 \in P_{4,n}$. Отсюда вытекает, что множество

$$\mathcal{K}_0 = \{A \in \mathcal{S}^n \mid p_A \in \Sigma_{4,n}\}$$

является внутренней полу-определенной релаксацией конуса $\mathcal{COP}^n$. Вычислим эту релаксацию в явном виде.

Сформируем вектор $\mathbf{x} = (x_1^2, \dots, x_n^2, x_1x_2, x_1x_3, \dots, x_{n-1}x_n)^T \in \mathbb{R}^N$, где $N = \frac{n(n+1)}{2}$. Тогда условие $A \in \mathcal{K}_0$ эквивалентно существованию матрицы $\mathbf{A} \in \mathcal{S}_+^N$ такой, что $p_A(x) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$. Разобьем $\mathbf{A}$ на 4 блока, отвечающих разбиению $\mathbf{x}$ на под-вектор $\mathbf{x}^1$ длины n и под-вектор $\mathbf{x}^2$ длины $\frac{n(n-1)}{2}$. Тогда коэффициенты при мономах x_i^4 и $x_i^2 x_j^2$ в полиноме $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ зависят только от элементов блока $\mathbf{A}_{11}$ и диагональных элементов блока $\mathbf{A}_{22}$. Поэтому достаточно ограничиться неотрицательной определенностью блочно-диагональной подматрицы $\mathrm{diag}(B, c_{12}, c_{13}, \dots, c_{n-1,n})$, составленной из этих элементов, а все остальные элементы положить равными нулю. Таким образом условие $A \in \mathcal{K}_0$ эквивалентно существованию матрицы $B \in \mathcal{S}_+^n$ и скаляров $c_{ij} \geq 0$, $1 \leq i < j \leq n$, таких что

$$\sum_{i,j=1}^{n} A_{ij} x_i^2 x_j^2 = \sum_{i,j=1}^{n} B_{ij} x_i^2 x_j^2 + \sum_{i<j} c_{ij} x_i^2 x_j^2.$$

Сравнивая коэффициенты, мы получаем условия $\operatorname{diag} A = \operatorname{diag} B$ и $A_{ij} = B_{ij} + c_{ij}$ для всех $i < j$. Отсюда получаем явное представление $\mathcal{K}_0 = \mathcal{S}_+^n + \mathcal{N}^n$, где $\mathcal{N}^n$ — конус поэлементно неотрицательных матриц с нулевой диагональю. Легко видеть, что условие на диагональ можно опустить. Имеем следующий результат [2].

Теорема 3.3. *Равенство $\mathcal{COP}^n = \mathcal{S}_+^n + \mathcal{N}^n$ имеет место тогда и только тогда, когда $n \leq 4$.*

Внутренняя релаксация $\mathcal{K}_0$ может быть усилена. Определим иерархию конусов $\mathcal{K}_0 \subset \mathcal{K}_1 \dots$, параметризованную целым числом $r \geq 0$:

$$\mathcal{K}_r = \left\{ A \in \mathcal{S}^n \mid \left(\sum_{j=1}^{n} x_j^2 \right)^r \cdot p_A(x) \in \Sigma_{4+2r,n} \right\}.$$

Это так называемая иерархия релаксаций Паррило для коположительного конуса. Сложность релаксации быстро увеличивается с ростом r. Справедлив следующий результат [6]:

Теорема 3.4. *Пусть $A \in \operatorname{int} \mathcal{COP}^n$. Тогда существует $r \geq 0$ такое, что $A \in \mathcal{K}_{r'}$ для всех $r' \geq r$.*

До сих пор мы рассматривали полу-определенные аппроксимации отдельных конусов положительных полиномов. Далее мы перейдем к релаксации задач оптимизации с полиномиальными данными.

3.3 Релаксации типа сумм квадратов для полиномиальных задач

Задача полиномиальной оптимизации характеризуется полиномиальной функцией цены и полиномиальными ограничениями. Введем следующий класс множеств.

Определение 3. *Множество $K \subset \mathbb{R}^n$ называется* базовым полу-алгебраическим *если оно задается*

$$K = \{x \mid f_i(x) = 0,\ g_j(x) \leq 0\} \tag{3}$$

для некоторых полинимов $f_i, g_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Мы рассмотрим проблему минимизации полинома на базовом полу-алгебраическом множестве K:

$$\min_{x \in K} f_0(x). \tag{4}$$

Для того чтобы переписать проблему в виде конической программы, введем конус $P_{d,K}$, состоящий из полиномов степени, не превосходящей d, которые неотрицательны на базовом полу-алгебраическом множестве K. Этот конус конечно-мерный, замкнутый и выпуклый. Задача оптимизации запишется в виде

$$\max \tau : \quad f_0(x) - \tau \in P_{d,K},$$

где d — не меньше степени f_0.

В общем случае конус $P_{d,K}$ не поддается эффективному описанию. Следуя философии предыдущего раздела, аппроксимируем этот конус полу-определенно представимым конусом $\Sigma_{d,K}$, состоящим из всех полиномов $p(x)$ степени, не превосходящей d, которые представимы в виде суммы

$$p(x) = \sigma_0(x) + \sum_i p_i(x) f_i(x) - \sum_j \sigma_j(x) g_j(x), \tag{5}$$

где $p_i(x)$ — произвольные полиномы, а $\sigma_0(x), \sigma_j(x)$ — суммы квадратов полиномов. Здесь полиномы f_i и g_j определяют множество K по формуле (3). Тогда любой полином из конуса $\Sigma_{d,K}$ неотрицательный на K, и следовательно $\Sigma_{d,K} \subset P_{d,K}$. Таким образом, конус $\Sigma_{d,K}$ является внутренней аппроксимацией $P_{d,K}$.

Полу-определенная представимость $\Sigma_{d,K}$ следует из того, что разложение (5) приводит к условиям типа равенства, линейным по коэффициентам полинома p и неизвестных полиномов σ_0, p_i, σ_j. Поэтому включение $p \in \Sigma_{d,K}$ эквивалентно конечному набору полу-определенных и линейных ограничений.

В итоге мы аппроксимируем исходную полиномиальную задачу оптимизации полу-определенной программой

$$\max \tau : \quad f_0(x) - \tau \in \Sigma_{d,K}.$$

Эта релаксация может быть усилена, если в основу определения конуса $\Sigma_{d,K}$ вместо условия (5) положить условие

$$p(x) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^r = \sigma_0(x) + \sum_i p_i(x) f_i(x) - \sum_j \sigma_j(x) g_j(x).$$

Пример: Рассмотрим полиномиальную проблему оптимизации

$$\min x + y : \quad x \geq 0,\ x^2 + y^2 = 1. \tag{6}$$

Множество $K = \{(x,y) \,|\, x \geq 0,\ x^2 + y^2 = 1\}$ является базовым полу-алгебраическим. Выберем максимальную степень $d = 3$. Аппроксимируем конус полиномов $P_{3,K}$ конусом $\Sigma_{3,K}$ полиномов, представимых в виде

$$p(x,y) = \sigma_0(x,y) + l(x,y)(x^2 + y^2 - 1) + \sigma_1(x,y)x,$$

где σ_0, σ_1 — суммы квадратов линейных полиномов, а l — линейный полином. Введем вектор мономов $\mathbf{x} = (x, y, 1)^T$ степени, не превосходящей 1. Тогда имеем $p \in \Sigma_{3,K}$ тогда и только тогда, когда p выражается в виде

$$\begin{aligned} p(x,y) =& \mathbf{x}^T A^0 \mathbf{x} + \mathbf{l}^T \mathbf{x} \cdot (x^2 + y^2 - 1) + (\mathbf{x}^T A^1 \mathbf{x}) \cdot x \\ =& (A_{11}^1 + l_x)x^3 + (2A_{12}^1 + l_y)x^2 y + (A_{11}^0 + 2A_{13}^1 + l_1)x^2 + (A_{22}^1 + l_x)xy^2 + (2A_{12}^0 + 2A_{23}^1)xy \\ &+ (2A_{13}^0 + A_{33}^1 - l_x)x + l_y y^3 + (A_{22}^0 + l_1)y^2 + (2A_{23}^0 - l_y)y + A_{33}^0 - l_1, \end{aligned}$$

где $\mathbf{l} = (l_x, l_y, l_1)^T \in \mathbb{R}^3$ и $A^0, A^1 \in \mathcal{S}_+^3$.

Полу-определенная релаксация задачи принимает вид

$$\max_{A^0, A^1 \in \mathcal{S}_+^3} \tau : \quad A_{11}^1 + l_x = 2A_{12}^1 + l_y = A_{11}^0 + 2A_{13}^1 + l_1 = A_{22}^1 + l_x = 2A_{12}^0 + 2A_{23}^1 = l_y = A_{22}^0 + l_1 = 0,$$

$$2A_{13}^0 + A_{33}^1 - l_x = 2A_{23}^0 - l_y = 1,\ A_{33}^0 - l_1 = -\tau.$$

Используем линейные соотношения типа равенства для того, чтобы элиминировать часть переменных. Тогда получим эквивалентную полу-определенную программу

$$\max -(A_{33}^0 + A_{11}^0 + 2A_{13}^1) : \quad \begin{pmatrix} A_{11}^0 & A_{12}^0 & A_{13}^0 \\ A_{12}^0 & A_{11}^0 + 2A_{13}^1 & \frac{1}{2} \\ A_{13}^0 & \frac{1}{2} & A_{33}^0 \end{pmatrix} \succeq 0, \quad \begin{pmatrix} A_{11}^1 & 0 & A_{13}^1 \\ 0 & A_{11}^1 & -A_{12}^0 \\ A_{13}^1 & -A_{12}^0 & 1 - A_{11}^1 - 2A_{13}^0 \end{pmatrix} \succeq 0.$$

Ее решение приводит к оптимальному значению -1, которое является оптимальным также для исходной задачи.

3.4 Моментные релаксации

Множество неотрицательных мер с носителем, содержащемся в некотором множестве $K \subset \mathbb{R}^n$, является выпуклым конусом. Если K состоит из бесконечного числа точек, то этот конус бесконечно-мерный. Экстремальные меры этого конуса генерируются δ-функциями $\mu(x) = \delta(x - \hat{x})$, где $\hat{x} \in K$. Мера $\delta(x - \hat{x})$ имеет носитель $\{\hat{x}\}$ и интеграл от функции f по этой мере равен

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(x) \delta(x - \hat{x})\, dx = f(\hat{x}).$$

Пусть μ — неотрицательная мера на $\mathbb{R}^n$ с носителем $\operatorname{supp} \mu$. Введем в пространстве $\mathbb{R}^n$ координаты $x_1, \ldots, x_n$.

Определение 4. *Пусть* $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$ *— мульти-индекс.* Моментом m_α *меры* μ *будем называть значение интеграла*

$$m_\alpha(\mu) = \int_{\mathbb{R}^n} x_1^{\alpha_1} \cdot x_2^{\alpha_2} \cdot \dots \cdot x_n^{\alpha_n} \mu(x)\,dx = \int_{\mathbb{R}^n} x^\alpha \mu(x)\,dx.$$

Для данного α момент m_α является линейным функционалом на пространстве мер. Область определения этого функционала не совпадает со всем пространством, поскольку интеграл, задающий значение функционала, может расходиться. Для δ-функции $\mu(x) = \delta(x - \hat{x})$, однако, все моменты существуют и равны $m_\alpha(\mu) = \hat{x}^\alpha$.

Так как нам необходимо работать с конечно-мерными объектами, мы фиксируем натуральное число d и рассматриваем только моменты m_α, для которых степень $|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i$ не превосходит d. Таких моментов конечное число, равное $N = \binom{n+d}{d}$, и они образуют N-мерный *вектор моментов* $m(\mu) = (m_\alpha(\mu))_{\alpha:|\alpha|\leq d}$.

Конус моментов $M_d \subset \mathbb{R}^N$ определяется как множество всех векторов, которые представляются как вектор моментов некоторой неотрицательной меры μ. Для подмножества $K \subset \mathbb{R}^n$ мы также определим конус $M_{d,K} \subset \mathbb{R}^N$, состоящий из векторов моментов неотрицательных мер μ с носителем в K. Таким образом, конуса моментов являются конечно-мерными проекциями бесконечно-мерного конуса неотрицательных мер.

Упражнение 3.4: Описать конус моментов M_d неотрицательных мер на $\mathbb{R}$. (Использовать лемму 3 с $n = 1$.)

Конуса моментов $M_{d,K}$ в общем случае не обладают алгоритмически эффективным описанием. Мы рассмотрим необходимые условия для того, чтобы данный вектор являлся вектором моментов некоторой неотрицательной меры. Множество векторов, удовлетворяющих этим необходимым условиям, образует *внешнюю* аппроксимацию конуса моментов.

Пусть $\mathbf{x} = (1, x_1, \dots, x_n, x_1^2, x_1x_2, \dots, x_n^{[d/2]})^T$ — вектор мономов x^α, для которых степень $|\alpha|$ не превосходит целую часть от $\frac{d}{2}$. Тогда все элементы одноранговой матрицы $\mathbf{x}\mathbf{x}^T$ являются мономами со степенью, не превосходящей d. Рассмотрим матрично-значный интеграл

$$\int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{x}\mathbf{x}^T \mu(x)\,dx,$$

где μ — неотрицательная мера. Этот интеграл является неотрицательно определенной матрицей, элементы которой равны неким элементам вектора моментов $m(\mu)$. Отсюда вытекает полу-определенное ограничение на вектор моментов, а именно, что матрица, составленная соответствующим образом, является неотрицательно определенной.

Пусть теперь $K = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f_i(x) = 0,\ g_j(x) \leq 0\}$ — базовое полу-алгебраическое множество, и пусть μ — неотрицательная мера с носителем в K.

Обозначим степень полинома f_i через d_i. Тогда для любого полинома p со степенью, не превосходящей $d - d_i$, имеем

$$\int_K p(x) f_i(x) \mu(x)\,dx = 0.$$

С другой стороны, данный интеграл выражается через линейную комбинацию элементов вектора моментов $m(\mu)$. Таким образом, мы получаем линейное ограничение типа равенства на вектор моментов $m(\mu)$. Если полином $p(x)$ пробегает все мономы x^β степени $|\beta| \leq d - d_i$, то мы получим максимальный линейно независимый набор таких линейных ограничений.

Обозначим степень полинома g_j через d_j, и допустим, что полином $q(x)$ — неотрицательный на множестве K. Тогда имеем

$$\int_K q(x) g_j(x) \mu(x)\,dx \leq 0.$$

Отсюда вытекает линейное ограничение типа нераверства на вектор $m(\mu)$.

Образуем вектор $\mathbf{x}'$ всех мономов степени, не превосходящей целую часть от $\frac{d-d_j}{2}$, и рассмотрим матрично-значный интеграл

$$-\int_K \mathbf{x}'(\mathbf{x}')^T g_j(x) \mu(x)\,dx.$$

Этот интеграл является неотрицательно определенной матрицей, каждый элемент которой представляется в виде линейной комбинации неких элементов вектора моментов $m(\mu)$. Отсюда получаем полу-определенное ограничение на $m(\mu)$.

Рассмотрим снова проблему полиномиальной оптимизации (4), где $f_0 = \sum_\alpha c_\alpha x^\alpha$ — полином степени, не превосходящей d, а K — базовое полу-алгебраическое множество. Перепишем эту проблему в виде задачи минимизации

$$\min_{\mu \geq 0: \operatorname{supp} \mu \subset K} \int_{\mathbb{R}^n} f_0(x)\mu(x)\, dx : \quad \int_{\mathbb{R}^n} \mu(x)\, dx = 1$$

на множестве всех вероятностных мер с носителем в K.

Условие типа равенства на μ можно записать в виде $m_0(\mu) = 1$, а интеграл, задающий функцию цены, в виде линейной комбинации $\sum_\alpha c_\alpha m_\alpha(\mu)$ элементов вектора моментов $m(\mu)$. Таким образом, проблема предстанет в виде

$$\min_{m \in M_{d,K}} \sum_\alpha c_\alpha m_\alpha : \quad m_0 = 1.$$

Заменив не поддающееся эффективному описанию включение $m \in M_{d,K}$ набором полу-определенных и линейных необходимых условий, построенных выше, мы получаем полу-определенную релаксацию исходной проблемы.

Пример: Рассмотрим снова проблему (6). Положим $d = 3$, тогда вектор моментов будет 10-мерным. Описанная выше полу-определенная релаксация запишется в виде

$$\min m_{10} + m_{01} : \quad \begin{pmatrix} m_{00} & m_{10} & m_{01} \\ m_{10} & m_{20} & m_{11} \\ m_{01} & m_{11} & m_{02} \end{pmatrix} \succeq 0,\ m_{20} + m_{02} - m_{00} = m_{30} + m_{12} - m_{10} = m_{21} + m_{03} - m_{01} = 0,$$

$$\begin{pmatrix} m_{10} & m_{20} & m_{11} \\ m_{20} & m_{30} & m_{21} \\ m_{11} & m_{21} & m_{12} \end{pmatrix} \succeq 0,\ m_{00} = 1.$$

Ее решение также дает оптимальное значение -1.

3.5 Тригонометрические полиномы

В этом разделе мы рассмотрим тригонометрические полиномы, скалярные или матрично-значные, от одной переменной. В роли этой переменной выступает угол $\phi \in [-\pi, \pi]$, и рассматриваемые функции 2π-периодически продолжаются на всю вещественную ось. Эквивалентный подход состоит в том, чтобы рассматривать величину $z = e^{i\phi}$, принимающую значения на единичном круге $\mathbb{T} \subset \mathbb{C}$, как независимую переменную. В этом случае тригонометрический полином соответствует конечному ряду Лорана по переменной z. Тригонометрические полиномы сводятся к обычным заменой независимой переменной $\cos\phi = \frac{z+\bar{z}}{2} = \frac{1-t^2}{1+t^2}$, $\sin\phi = \frac{z-\bar{z}}{2i} = \frac{2t}{1+t^2}$, $t \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$.

Тригонометрические полиномы широко используются в обработке сигналов, управлении и идентификации линейных динамических систем. Рациональные по переменной z функции, скалярные или матрично-значные, выступают в качестве передаточных функций линейных динамических систем в дискретном времени с конечной памятью. Неотрицательные меры на $\mathbb{T}$, скалярные или матрично-значные, играют роль спектров стационарных сигналов. Здесь оператор умножения на z соответствует сдвигу по времени на одну единицу.

Тригонометрический полином степени d имеет общий вид $p(\phi) = \sum_{k=-d}^d A_k e^{ik\phi} = \sum_{k=-d}^d A_k z^k$, где $A_{-k} = A_k^*$ для всех $k = 0, \dots, d$. Здесь A_k — матрицы размера $n \times n$, а A^* — эрмитово сопряженная (комплексно сопряженная транспонированная) к A матрица. Полином принимает значения в пространстве $\mathcal{H}^n$ эрмитовых матриц размера n. В случае $n = 1$ мы имеем дело со скалярными полиномами, принимающими значения в $\mathbb{R}$. Множество неотрицательных полиномов степени, не превышающей d, является выпуклым конусом. В случае матрично-значных полиномов под неотрицательностью подразумевается, что значения полинома являются неотрицательно определенными эрмитовыми матрицами.

Как и в случае обычных полиномов от одной переменной, конус неотрицательных полиномов имеет полу-определенное представление.

Теорема 3.5. *Пусть $p(\phi) = \sum_{k=-m}^{m} A_k e^{ik\phi}$ — тригонометрический полином. Полином p является неотрицательным тогда и только тогда, когда существует эрмитовая неотрицательно определенная матрица $\mathbf{A} \in \mathcal{H}_+^{n(m+1)}$ такая, что $A_k = \sum_{i-j=k} A_{ij}$, где A_{ij}, $i, j = 0, \dots, m$ — блоки матрицы $\mathbf{A}$ размера n.*

Доказательство следует той же схеме, что и в случае обычных неотрицательных матрично-значных полиномов от одной переменной.

Лемма 5. *Пусть $T \in \mathcal{H}_+^{n(m+1)}$ — неотрицательно определенная блочно-теплицевая эрмитова матрица с блоками размера n. Тогда T представляется в виде суммы неотрицательно определенных блочно-теплицевых матриц ранга 1.*

Доказательство: Профакторизуем $T = FF^*$ так, что $F \in \mathbb{C}^{n(m+1)\times l}$ состоит из блоков $F_0, \dots, F_m \in \mathbb{C}^{n\times l}$. Определим подматрицу $F_I \in \mathbb{C}^{nm\times l}$ матрицы F, состоящую из блоков $F_0, \dots, F_{m-1}$, и подматрицу $F_{II} \in \mathbb{C}^{nm\times l}$, состоящую из блоков $F_1, \dots, F_m$.

Так как T — блочно-теплицевая, ее верхний левый угол размера $mn \times mn$ совпадает с нижним правым углом того же размера. Из этого следует соотношение $F_I F_I^* = F_{II} F_{II}^*$. Тогда найдется унитарная матрица $V \in \mathbb{C}^{l\times l}$ такая, что $F_{II} = F_I V$. Пусть $V = UDU^*$ — спектральное разложение матрицы V, где U — унитарная, а D — диагональная матрица с диагональными элементами на единичном круге. Заменив F_I, F_{II} на $F_I U, F_{II} U$, можно считать, что $V = D = \mathrm{diag}(d_1, \dots, d_l)$.

Таким образом, столбцы f_j фактора F имеют вид $(x_j; d_j x_j; d_j^2 x_j; \dots; d_j^m x_j)$, $j = 1, \dots, l$. Из этого следует, что матрицы $f_j f_j^*$ ранга 1 сами блочно-теплицевы. □

Лемма 6. *Пусть $p(\phi) = \sum_{j=-m}^{m} A_j e^{ij\phi}$ — положительный тригонометрический матричный полином, а $T \in \mathcal{H}_+^{n(m+1)}$ — блочно-теплицевая матрица с блоками $T_{-m}, \dots, T_m \in \mathcal{H}^n$. Тогда $\sum_{j=-m}^{m} \langle A_j, T_j \rangle \geq 0$. В частности, существует такая матрица $\mathbf{A} \in \mathcal{H}_+^{n(m+1)}$, состоящая из $n \times n$ блоков A_{ij}, $i, j = 0, \dots, m$, что $A_k = \sum_{i-j=k} A_{ij}$.*

Доказательство: Ввиду предыдущей леммы можно без ограничения общности считать, что ранг T равен 1. Тогда найдется вектор $x \in \mathbb{C}^n$ и число $z \in \mathbb{T}$ такое, что $T_j = z^j xx^*$ для всех $j = -m, \dots, m$. Поэтому выражение $\sum_{j=-m}^{m} \langle A_j, T_j \rangle = (\sum_{j=-m}^{m} A_j z^j) xx^*$ будет неотрицательно определенной одноранговой (или нулевой) матрицей вследствие условия на p.

Второе утверждение получается применением конической двойственности. Раз набор матриц $(A_{-m}, \dots, A_m)$, $A_{-j} = A_j^*$, неотрицателен на любом наборе матриц $(T_{-m}, \dots, T_m)$, представляющих блочно-теплицевую неотрицательно определенную матрицу, то $(A_{-m}, \dots, A_m)$ является элементом конуса, двойственного к конусу блочно-теплицевых неотрицательно определенных матриц. Но этот двойственный конус характеризуется в точности существованием неотрицательно определенной матрицы $\mathbf{A}$ с требуемыми свойствами. □

Факторизуя матрицу $\mathbf{A} = \mathbf{B}\mathbf{B}^*$ и разбивая фактор $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n(m+1)\times l}$ на блоки $B_0, \dots, B_m \in \mathbb{C}^{n\times l}$, мы получаем, что положительный тригонометрический полином p представляется в виде квадрата $p(\phi) = (\sum_{k=0}^{m} B_k e^{ik\phi})(\sum_{k=0}^{m} B_k e^{ik\phi})^*$.

Список литературы

[1] A.A. Ahmadi and A. Majumbar. DSOS and SDSOS optimization: LP and SOCP based alternatives to sum of squares optimization. In *Proc. 48th Annual Conf. Inform. Sci. Syst.*, pages 1–5, 2014.

[2] P. H. Diananda. On nonnegative forms in real variables some or all of which are nonnegative. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 58:17–25, 1962.

[3] Jean-Bernard Lasserre. *Moments, Positive Polynomials And Their Applications*, volume 1 of *Imperial College Press Optimization Series*. Imperial College Press, 2009.

[4] Katta G. Murty and Santosh N. Kabadi. Some NP-complete problems in quadratic and nonlinear programming. *Math. Program.*, 39:117–129, 1987.

[5] Yuri Nesterov. Squared functional systems and optimization problems. In Hans Frenk, Kees Roos, Támas Terlaky, and Shuzhong Zhang, editors, *High Performance Optimization*, chapter 17, pages 405–440. Kluwer Academic Press, Dordrecht, 2000.

[6] Pablo Parrilo. *Structured Semidefinite Programs and Semialgebraic Geometry Methods in Robustness and Optimization*. PhD thesis, California Institute of Technology, Pasadena, 2000.

[7] Claus Scheiderer. Spectrahedral shadows. *SIAM J. Appl. Algebra Geom.*, 2(1):26–44, 2018.