行列の共正値性を判定する新しいアルゴリズムの提案

田中　彰浩

筑波大学大学院 システム情報工学研究科

指導教員：吉瀬章子 教授

1. はじめに

本研究は n 次実対称行列が共正値性 (copositivity) を有するか否かの判定問題を扱う．共正値性を有する行列の集合 $\mathcal{C}^n$ は以下で与えられる．

$$\mathcal{C}^n = \{A \in \mathcal{S}^n : \forall x \in \mathbb{R}^n_+,\ x^T A x \geq 0\}$$

ただし $\mathcal{S}^n$ は n 次元対称行列の集合であり，$\mathbb{R}^n_+$ は n 次元の非負ベクトルの集合である．半正定値錐を $\mathcal{S}^n_+$，非負錐を $\mathcal{N}^n$ とすると，定義より $\mathcal{S}^n_+ + \mathcal{N}^n \subseteq \mathcal{C}^n$ が成立することがわかる．共正値行列の集合 $\mathcal{C}^n$ はクリーク問題と密接な関係があることが示されている．n 個の頂点からなる無向グラフ G の最大クリーク数を ω とし，A_G を隣接行列，e を要素がすべて 1 であるベクトル，$E = ee^T$ とする．[3] は $\frac{1}{\omega} = \min_x\{x^T(E - A_G)x : e^T x = 1, x \geq 0\}$ が成立することを示した．また [1] はこの問題を，$\mathcal{C}^n$ を用いて $\omega = \min_y\{y \in \mathbb{N} :\ y(E - A_G) - E \in \mathcal{C}^n\}$ と定式化できることを示した．しかし，与えられた行列が共正値性を有するか否かの判定は co-NP 完全であり [4]，そう簡単ではない．以降ではこの判定を行う [2] の提案に加え，われわれの新たな提案の紹介を行う．

2. 共正値性の判定

標準単体 Δ^S を，$\Delta^S = \{x \in \mathbb{R}^n_+ : ||x||_1 = 1\}$ と定義する．行列 A が共正値行列であるための必要十分条件は，Δ^S 上の任意の x に対して $x^T A x \geq 0$ を満たすことである．また，単体 Δ を標準単体上の n 本のアフィン独立な点 $v_1, \ldots, v_n$ の凸包とする．さらに，集合族 $\mathcal{P} = \{\Delta^1, \ldots, \Delta^m\}$ が以下の条件を満たすとき $\mathcal{P}$ を Δ の単体分割という．

$$\Delta = \bigcup_{i=1}^{m} \Delta^i \quad かつ \quad \forall i \neq j,\ \mathrm{int}(\Delta^i) \cap \mathrm{int}(\Delta^j) \neq \emptyset$$

次に，単体分割 $\mathcal{P}$ の頂点の集合 $V(\mathcal{P})$ を定義する．

$$V(\mathcal{P}) = \{v : v\ はある \Delta \in \mathcal{P}\ の頂点\ \}$$

さらに単体 Δ の頂点を列ベクトルにもつ行列を V_Δ とする．単体分割 $\mathcal{P}$ 内の単体 Δ によって構成される行列 V_Δ の集合を $M(\mathcal{P})$ とする．最後に $\mathcal{P}$ の最長辺 $\delta(\mathcal{P})$ を定義する．

$$\delta(\mathcal{P}) = \max_{\Delta \in \mathcal{P}} \max_{u,\ v \in \Delta} ||u - v||$$

次に [2] で紹介されている，行列が共正値性を有するか否かの判定を行うアルゴリズムについて述べる．

定理 1. [Theorem 2.1 [2]] $\mathcal{M}^n$ は $\mathcal{M}^n \subseteq \mathcal{C}^n$ を満たすとする．$A \in \mathcal{S}^n$ が以下を満たすとき，A は共正値行列である．

$$\forall \Delta \in \mathcal{P}, \quad V_\Delta^T A V_\Delta \in \mathcal{M}^n$$

定理 1 は $\mathcal{M}^n = \mathcal{C}^n$ の場合について，簡単な計算により導出される．

定理 2. [Theorem 2.2 [2]] $A \in \mathcal{S}^n$ は，Δ^S 上の任意の x に対して $x^T A x > 0$ を満たす (狭義共正値行列) とする．また，$\mathcal{M}^n \supseteq \mathcal{N}^n$ とする．このとき，$\delta(\mathcal{P}) < \varepsilon$ を満たす任意の分割 $\mathcal{P}$ に対して，以下の式が成立するような $\varepsilon > 0$ が存在する．

$$\forall \Delta \in \mathcal{P}, \quad V_\Delta^T A V_\Delta \in \mathcal{M}^n$$

定理 3. [Lemma 2.3 [2]] 以下の 2 条件は同値である．

1. $A \notin \mathcal{C}^n$
2. $\delta(\mathcal{P}) < \varepsilon$ を満たす任意の分割 $\mathcal{P}$ にたいして，$v \in V(\mathcal{P})$ が存在し $v^T A v < 0$ となるような，$\varepsilon > 0$ が存在する．

定理 2 と定理 3 は $x^T A y$ の連続性から導出される．

アルゴリズム **1**：行列 A の共正値性の判定を行う．

Input：$A \in \mathcal{S}^n$, $\mathcal{M}^n \subset \mathcal{C}^n$

Output：“A は共正値行列” または “A は共正値行列でない”

1. $\mathcal{P} \leftarrow \{\Delta^S\}$
2. **while** $\mathcal{P} \neq \emptyset$ **do**
3. 　$\Delta \in \mathcal{P}$ を選択;
4. 　**if** $\exists v \in V(\{\Delta\}) : v^T A v < 0$ **then**
5. 　　**return** “A は共正値行列でない”；
6. 　**end**

if $V_\Delta^T A V_\Delta \in \mathcal{M}^n$ **then**
  $\mathcal{P} \leftarrow \mathcal{P} \setminus \{\Delta\}$;
else
  Δ を $\Delta = \Delta^1 \cup \Delta^2$ に分割;
  $\mathcal{P} \leftarrow \mathcal{P} \setminus \{\Delta\} \cup \{\Delta^1, \Delta^2\}$;
end
end
return "A は共正値行列"

定理 2 と定理 3 より，行列 A が狭義共正値行列である場合と，共正値行列でない場合についてアルゴリズム 1 の収束性が保証される．

3. $\mathcal{M}^n$ の選び方

アルゴリズム 1 で用いられる $\mathcal{M}^n$ の選択は，反復回数や計算時間に大きな影響を与える．まず初めに [2] で紹介されている $\mathcal{M}^n = \mathcal{H}^n$ について述べる．

$$N(A)_{ij} := \begin{cases} A_{ij} & A_{ij} > 0 \text{ かつ } i \neq j \\ 0 & \text{その他} \end{cases}$$

と定義し，$S(A) := A - N(A)$ とする．このとき $N(A)$ は定義より明らかに非負行列であるから，$S(A)$ が半正定値であれば $A \in \mathcal{S}_+^n + \mathcal{N}^n \subseteq \mathcal{C}^n$ が成立する．したがって $\mathcal{H}^n$ を以下のように定義する．

$$\mathcal{H}^n := \{A \in \mathcal{S}^n : \ S(A) \in \mathcal{S}_+^n\}$$

次に本研究の提案手法である $\mathcal{M}^n = \mathcal{G}^n$ について述べる．行列 A が対称行列であるならば，$P\Lambda P^T$ と固有値分解することが可能である．ただし P は直交行列であり，Λ は固有値を要素として持つ対角行列である．さらに対角行列 $\Omega \leq \Lambda$ を用いて，$P\Lambda P^T = P(\Lambda - \Omega)P^T + P\Omega P^T$ と分解する．$\Omega \leq \Lambda$ であるから $P(\Lambda - \Omega)P^T$ 半正定値行列である．この条件の元で $P\Omega P^T \geq O$ を満たせば，行列 A は $A \in \mathcal{S}_+^n + \mathcal{N}^n \subseteq \mathcal{C}^n$ である．$P\Omega P^T \geq O$ を満たす対角行列 Ω が存在するか否かを判定するために，以下の線形計画問題を考える．

$$(\mathrm{P}_A) \quad \left| \begin{array}{ll} \displaystyle\min_{\Omega,\theta} & \theta \\ \text{s.t.} & \Omega \leq \Lambda \\ & P\Omega P^T + \theta E \geq O \\ & \theta \geq 0 \end{array} \right.$$

(P_A) の最適値が 0 であるならば，行列 A は $A \in \mathcal{S}_+^n + \mathcal{N}^n \subseteq \mathcal{C}^n$ である．この考えから $\mathcal{G}^n$ を以下のように定義する．

$$\mathcal{G}^n := \{A \in \mathcal{S}^n : \ \mathrm{P}_A \text{の最適値が } 0\}$$

上記の $\mathcal{H}^n, \mathcal{G}^n$ について，クリーク問題を用いて比較実験を行ったところ，クリーク数の上界値を求める問題に対して $\mathcal{G}^n$ は有効であることが確認された．

4. 分割規則の改良

行列 $V_\Delta^T A V_\Delta$ が $\mathcal{M}^n$ の要素でないとき，アルゴリズム 1 は単体 Δ の分割を行う．$\delta(\mathcal{P}) \rightarrow 0$ を満たすよく知られた分割規則として，前章の比較実験では bisection を用いた．しかし，この分割規則は $V_\Delta^T A V_\Delta$ の情報を利用しない分割規則である．これに対しわれわれは $\mathcal{M}^n = \mathcal{G}^n$ の場合について，(P_A) の有効な制約の情報を用いた分割規則を提案した．この手法に対し計算機実験を行った結果，いくつかの問題に対して有効であることが確認された．しかし，既存研究において提案されている，$\mathcal{H}^n$ の分割規則改良と比較すると効果は十分でないため，今後より効果的な分割規則の開発が必要である．

参考文献

[1] E. de Klerk and D. V. Pasechnik, "Approximation of the stabirity number of a graph via copositive programming," *SIAM Journal on Optimization*, **12**, 875–892, 2002.
[2] J. Sponcel, S. Bundfuss, and M. Dur, "An adaptive linear approximation algorithm for copositive programs," *Journal of Global Optimization*, **52**, 537–551, 2012.
[3] T. S. Motzkin and E. G. Straus, "Maxima for graphs and a new proof of a theorem of Turan," *Canadian Journal of Mathematics*, **17**, 533–540, 1965.
[4] K. G. Murty and S. N. Kabadi, "Some NP-complete problems in quadratic and nonlinear programming," *Mathmatical Programming*, **39**, 117–129, 1987.