数理解析研究所講究録
第 1931 巻 2015 年 37-46

完全正値性の判定に関する数値実験

電気通信大学院 情報理工学研究科
田口 良典, 高橋 里司, 村松 正和
Yoshinori Taguchi, Satoshi Takahashi, Masakazu Muramatsu
Graduate School of Informatics and Engineering,
University of Electro-Communications

1 はじめに

近年, 完全正値行列や共正値行列を用いた凸最適化問題が話題となっている. その大きな理由の一つは, 非凸 2 次計画問題がこれらの行列を用いた凸最適化問題に再定式化可能であることが挙げられる [5]. 一方, 行列が完全正値行列であるか否かの判定は NP 困難である [4]. すなわち, その凸最適化問題を解くことはおろか、許容性の判定さえ理論的には簡単な問題ではない.

共正値行列の判定に関しては, co-NP 完全であり [6], 完全正値行列と同様に、判定問題を解くことは容易ではない. [7] では, 単体分割を用いて共正値性の判定を行うアルゴリズムが提案されている. 判定する共正値行列が共正値錐の境界に近ければ近いほど計算時間が膨大になり, アルゴリズムが終了しないことが示されている.

本研究では, 完全正値性の判定を扱う. この場合, 行列のサイズが 4 以下の場合には, 完全正値錐と二重非負値錐が等しくなることが知られているので, 判定方法は自明である. また, 特別な形をした 5×5 行列に対して完全正値性判定法が提案されている [2]. しかし, より大きな行列に対する完全正値性の判定に関する研究はほとんど知られておらず, 我々の知る限りでは川瀬弘樹の論文 [6] のみである. ここで川瀬は, 共正値判定を繰り返し行う反復アルゴリズムと完全正値錐に整数性を付加した整数完全正値行列判定問題の 2 つの完全正値判定手法を提案した.

本研究では川瀬の研究を発展させ, 行列が完全正値であることを判定する実際的な手法を探り, その効率を検証する. 川瀬 [6] で提案された完全正値錐に整数性の制約を加えた整数完全正値行列に関する判定法とグラム行列の双対錐を利用した完全正値行列判定法の 2 つを提案し, 数値実験を行ったので報告する.

2 完全正値行列

ここでは完全正値行列と関連概念を定義し, それらの性質を簡単に説明する. 各性質の証明, およびより詳しい性質については, [1] などを参照されたい.

実 $n \times n$ 対称行列の集合を $\mathbb{S}_n$ で表す. $X \in \mathbb{S}_n$ が有限個の非負ベクトル $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_q \in \mathbb{R}^n_+$ を用いて

$$X = \sum_{i=1}^{q} \boldsymbol{b}_i \boldsymbol{b}_i^T \tag{1}$$

と書かれるとき, X は**完全正値行列** であると言う. ここで $\mathbb{R}_+$ は非負実数の集合を表す. $n \times n$ 完全正値行列の集合

$$\mathbb{CP}_n := \{X \in S_n : X = \sum_{i=i}^{q} \boldsymbol{b}_i \boldsymbol{b}_i^T, \boldsymbol{b}_i \in \mathbb{R}^n_+ (i = 1, ..., q)\}$$

は閉凸錐となることが知られている. $\mathbb{CP}_n$ を完全正値錐と呼ぶ. 行列 X が (1) の形にかけるとしても, 非負ベクトル $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_q$ の取り方は一意ではないかもしれないし, ベクトルの本数 q も一意とは限らない. 完全正値行列 X の (1) の形の分解全てを考えたとき, q の最小値を X の CP ランクと呼ぶ. 当然、CP ランクはランク以上である.

完全正値錐の双対錐を共正値錐と呼び, その元を共正値行列と呼ぶ. $n \times n$ 共正値錐の集合 $\mathbb{COP}_n$ は

$$\mathbb{COP}_n = \{X \in S_n : \boldsymbol{v}^T X \boldsymbol{v} \geq 0, \forall \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n_+\}$$

と表現できる.

$n \times n$ 半正定値錐を

$$\mathbb{S}^+_n := \{X \in S_n : \boldsymbol{v}^T X \boldsymbol{v} \geq 0, \forall \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n\},$$

二重非負値錐を

$$\mathbb{DNN}_n := \{X \in S_n : X \geq 0, \boldsymbol{v}^T X \boldsymbol{v} \geq 0, \forall \boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n\}$$

と書けば, これらの錐の間には以下の関係が成り立つことは明らかである:

$$\mathbb{CP}_n \subseteq \mathbb{DNN}_n \subseteq \mathbb{S}^+_n \subseteq \mathbb{COP}_n.$$

また, $n \leq 4$ のときには $\mathbb{CP}_n = \mathbb{DNN}_n$ であることも知られている.

3 整数完全正値性とその判定手法

X が 非負整数ベクトル $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_q$ によって (1) の形に分解されるとき, X が整数完全正値であると呼ぶ. 整数完全正値性は [6] で導入された概念である. この論文では, 整数制

約により, 解が有限個で収まることを利用し, $0-1$ 整数計画問題へ定式化した後, その判定問題を解くことで整数完全正値性を判定している.

今回は, 整数完全正値行列に関する次の補題を用いたアルゴリズムを提案する.

補題 3.1 $n \times n$ 整数対称行列

$$X = \begin{pmatrix} x & \boldsymbol{c}^T \\ \boldsymbol{c} & X_1 \end{pmatrix}$$

に関して, X が整数完全正値行列である必要十分条件は, $X_1 = CC^T, \boldsymbol{c} = C\boldsymbol{a}, x = \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{a}$ を満たすような非負整数行列 C および非負ベクトル $\boldsymbol{a}$ が存在することである.

証明: 十分性は明らかであるので, 必要性を示す. X が整数完全正値なので, 非負整数ベクトル $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_q$ を用いて

$$X = \sum_{i=1}^{q} \boldsymbol{b}_i \boldsymbol{b}_i^T$$

とかける. 非負ベクトル $\boldsymbol{b}_i$ の 2 番目以降の要素からなるベクトルを $\tilde{\boldsymbol{b}_i}$ と書けば, $X_1 = \sum_{i=1}^{q} \tilde{\boldsymbol{b}_i}\tilde{\boldsymbol{b}_i}^T$ なのでこれは整数完全正値であり, $C = [\tilde{\boldsymbol{b}_1}, \ldots, \tilde{\boldsymbol{b}_q}]$ と取れる. X の構造から $\boldsymbol{a} = ((\boldsymbol{b}_1)_1, \ldots, (\boldsymbol{b}_q)_1)^T$ を用いて

$$\boldsymbol{c} = \sum_{i=1}^{q} (\boldsymbol{b}_i)_1 \boldsymbol{b}_i = C\boldsymbol{a}$$

と書ける. さらに $x = \sum_{i=1}^{q} (\boldsymbol{b}_i)_1^2 = \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{a}$ も成り立つ. □

補題 3.1 を利用し, 再帰的に与えられた行列の整数完全正値性を判定するアルゴリズムを以下に述べる. ただし, ここでは X の CP ランクは既知とする.

整数完全正値性の判定アルゴリズム

`CheckIntCP`($n \times n$ 対称整数非負行列 X, 非負ベクトルの数 q)

OUTPUT: $X = CC^T, C \geq O$ となる C の集合

X が整数完全正値行列でないときは空集合

$X = \begin{pmatrix} x & \boldsymbol{c}^T \\ \boldsymbol{c} & X_1 \end{pmatrix}$ とする. ($x \in \mathbb{R}, \boldsymbol{c} \in \mathbb{R}^{n-1}, X_1 \in \mathbb{R}^{n-1 \times n-1}$)

$R \leftarrow \emptyset$

　if n == 3 **then**

　　R = checkIntCP2 ($\mathrm{X_1}$, q) /*$n = 2$ のときは別処理*/

　　return R

　end if

　$[C_1, ..., C_p]$ = checkIntCP ($\mathrm{X_1}$, q)

　for $i = 1$ to p **do**

$C_i \boldsymbol{v} = Z, \boldsymbol{v}^T \boldsymbol{v} = x$ を満たす $\boldsymbol{v} \geq 0$ を全て探し,$\boldsymbol{v}_1, ..., \boldsymbol{v}_q$ とする.

もしあれば, $R \leftarrow R \cup \{ \begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1^T \\ C_i \end{pmatrix}, .., \begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_q^T \\ C_i \end{pmatrix} \}$

end for

return R

`CheckIntCP2` ($X : 2 \times 2$ 対称整数非負行列)

OUTPUT $X = CC^T, C \geq O$ となる C の集合

X が整数完全正値行列でないときは空集合

$X = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$ とする. ($a \in \mathbb{R}, b \in \mathbb{R}, c \in \mathbb{R}$)

$R \leftarrow \emptyset$

$\boldsymbol{y}^T \boldsymbol{y} = a$ となる $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^l, \boldsymbol{y} \geq 0$ を全て求め, $\boldsymbol{y}_1, ..., \boldsymbol{y}_p$とする

$\boldsymbol{z}^T \boldsymbol{z} = b$ となる $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^l, \boldsymbol{z} \geq 0$ を全て求め, $\boldsymbol{z}_1, ..., \boldsymbol{z}_{p'}$ とする

for $i = 1$ to p **do**

for $j = 1$ to p' do **do**

$\boldsymbol{y}_i^T \boldsymbol{z}_j = c$ ならば, $R \leftarrow R \cup \begin{pmatrix} \boldsymbol{y}_i^T \\ \boldsymbol{z}_j^T \end{pmatrix}$

end for

end for

return R

このアルゴリズムは, 行列 X が q 本の非負ベクトルを用いて (1) のようにかける場合, そのすべての組み合わせを列挙する.

3.1 数値実験

1 から 5 までの要素をランダムに持つ $B \in \mathbb{Z}^{n \times q}$を用いて, $X = BB^T$として生成し, 判定を行った.20 回測定した平均時間を図 3.1 と図 3.2 に示す.図 1 は $B \in \mathbb{Z}^{30 \times q}$を固定し, 川瀬 [6] の手法と比較したグラフである.図 2 は判定行列の大きさ n を変化させたグラフである. 使用した言語は python2.7, 川瀬の手法では Gurobi Optimizer 5.6 を用いた. 使用した計算機の性能は CPU:2 GHz Intel Core i7(4 コア), メモリ:4GB である.

全体として, 川瀬の手法よりも高速に判定を行うことが可能となった. 従来手法では $q = 3$ が限界であるのに比べ, $q = 7$ まで判定が可能となっている.

ただし, 非負変数ベクトルの本数 q が増加するごとに, 式 (3.1) を満たす $(\boldsymbol{x}, C)$ の数が組み合わせ的に増加する. 提案手法では, 判定行列の右下 2×2 行列から左上に向かって再帰的に式 (3.1) を満たすか判定を行う. このとき, 初めに右下 2×2 行列から求めた $(\boldsymbol{x}, C)$ のすべての組み合わせが, $n \times n$ 判定行列に対する式 (3.1) を満たすとは限らないため, 1

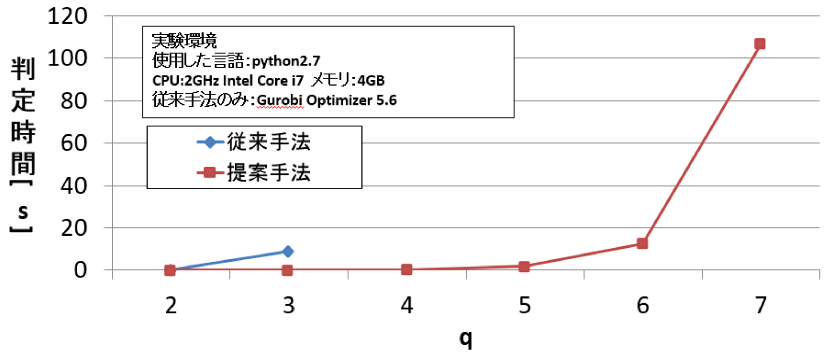

図 1: 川瀬の手法 [6] との比較

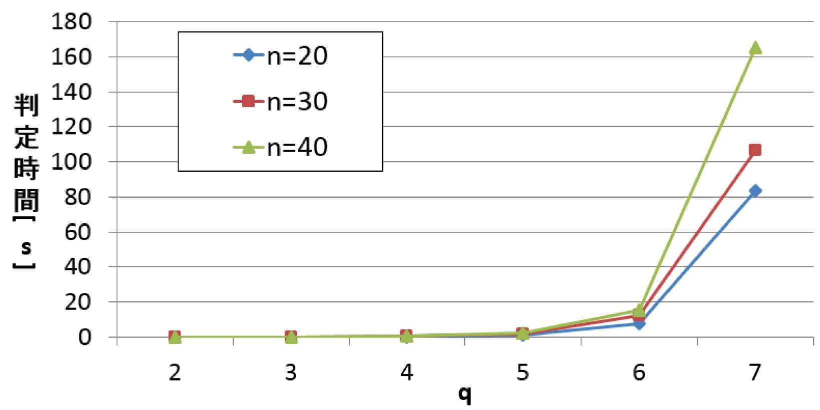

図 2: 行列の大きさ n を変化させた場合

個 1 個 $(\boldsymbol{x}, C)$ の組み合わせを確認する必要がある．そのため，アルゴリズムの実行時間は q に大きく依存しており，q が増加すると判定時間が大幅に増加している．

一方，図 3.1 よりわかるように，行列のサイズ n への依存度はそれほど大きくない．$n = 40$ で $q = 7$ でも 3 分弱で判定できている．

4　完全正値性判定アルゴリズム

本節では整数への制限を外し、一般の二重非負値行列 X が完全正値性を持つかどうかを判定することを考える.

任意の $X \in \mathbb{DNN}_n$ を $X = W^T W$ と分解する。ただし $W \in \mathbb{R}^{r \times n}$ で、r は X のランクである. W の非負性を仮定しなければこの分解は常に可能である. このとき次の定理が成り立つ.

定理 4.1 ([1]) $X = W^T W$ が完全正値行列である必要十分条件は, $Q^T W \geq O, QQ^T = I$ となるような $Q \in \mathbb{R}^{r \times q}$ が存在することである.

十分性は明らかである. $X = W^T W = W^T Q Q^T W = \left(Q^T W\right)^T \left(Q^T W\right)$ と式変形できるからである.

定理 4.1 を用いると, 完全正値性判定問題を以下のように定式化できる:

$$
\begin{array}{ll}
\text{Find} & Q \\
\text{s.t.} & Q^T W \geq O,\ QQ^T = I.
\end{array}
$$

しかし, この問題は $QQ^T = I$ という 2 次の等式条件を含んでいるため、求解は困難である. そこで以下のように完全正値性判定問題の SDP 緩和を行う:

$$
\begin{array}{ll}
\text{Find} & Q \\
\text{s.t.} & Q^T W \geq O,\ QQ^T \succeq I.
\end{array}
$$

ただし, $A \succeq B$ は $A - B$ が半正定値であることを表す. これは以下の SDP と等価である:

$$
\begin{array}{ll}
\text{Find} & Q \\
\text{s.t.} & Q^T W \geq O, \begin{pmatrix} I & Q \\ Q^T & I \end{pmatrix} \succeq O.
\end{array} \tag{2}
$$

もし, SDP 緩和問題 (2) を解いて得られた解 Q が, $QQ^T = I$ を満たしていれば, X は完全正値行列と判定できるが, $QQ^T \neq I$ のときには何の情報をもたらすか, 現在のところ不明である.

4.1　数値実験

今回の数値実験では, 目的関数を Q の対角要素の和の最大化として, 以下のように半正定値計画問題に定式化し数値実験を行った:

$$
\begin{array}{ll}
\text{Max.} & \sum_{i=1}^{r} Q_{ii} \\
\text{s.t.} & Q^T W \geq O, \begin{pmatrix} I & Q \\ Q^T & I \end{pmatrix} \succeq O.
\end{array} \tag{3}
$$

問題 (3) を解くのに, SeDumi1.3 と MATLAB R2014a を用いた. 使用した計算機の性能は CPU:2 GHz Intel Core i7(4 コア), メモリ:4GB である.

4.1.1 数値実験 1

0 から 1 までの要素を一様ランダムに持つ $B \in \mathbb{R}^{n \times q}$を用いて, 行列 $X = BB^T$として生成し, B を (3) における W として問題 (3) を解いた. 図 3 に, 行列サイズを変化させ, それぞれ 100 回測定を行ったときの平均時間を示す.X はフルランクとする.

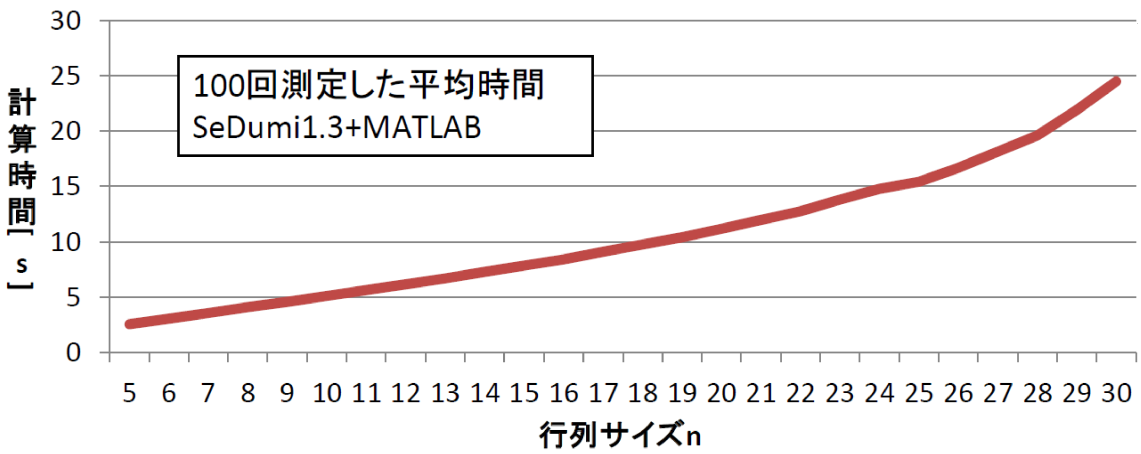

図 3: 行列サイズ n を変化させて SDP 緩和問題を解いたときの計算時間

これより, 比較的短い時間で完全正値行列であることが判定できていること, また, n に対する依存性が緩やかであることがわかる. 今回の数値実験 1 では, 全ての問題において $QQ^T = I$ が得られた.

4.1.2 数値実験 2

数値実験 2 では行列サイズを固定し,q を変化させて実験を行う. 0 から 1 までの要素を一様ランダムに持つ $B \in \mathbb{R}^{20 \times q}$を用いて, 行列 $X = BB^T$として生成し, B を (3) における W として問題 (3) を解いた. 図 4 に, q を変化させ, それぞれ 20 回測定を行ったときの平均時間を示す.

この数値実験 2 でも, 全ての問題において $QQ^T = I$ が得られた. 計算時間には, n に対する依存性と比べ q による依存性の方がやや大きいことがわかる.

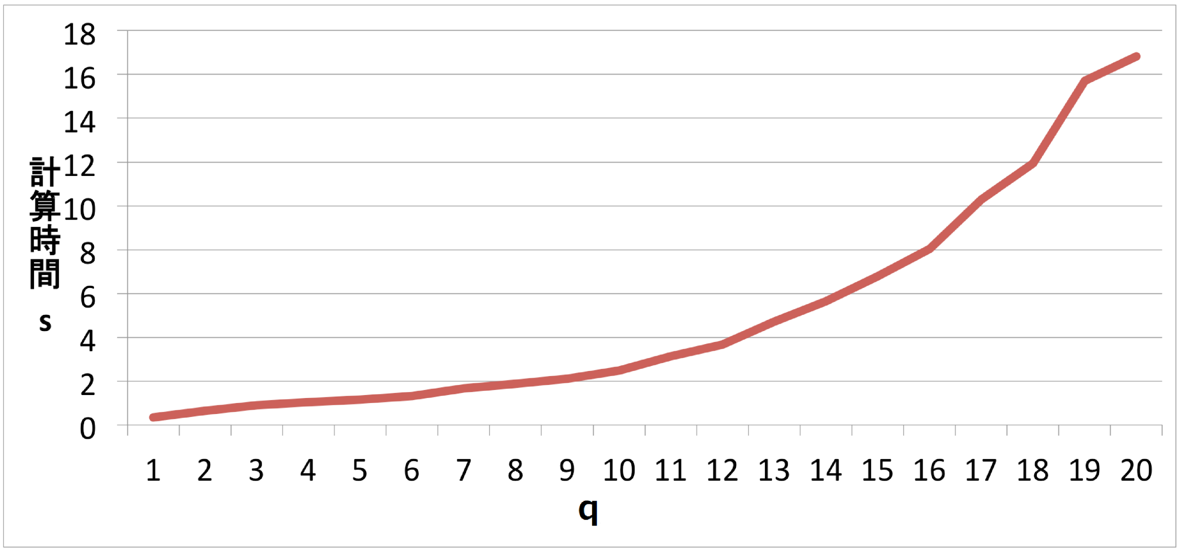

図 4: q を変化させて SDP 緩和問題を解いたときの計算時間

4.1.3 数値実験 3

数値実験 1,2 は, 完全正値行列を完全正値行列であるか判定できるかどうかという実験であった. 二重非負値行列が完全正値でないことを証明するのが難しく, 正解のわかっている行列を考えたためそのようになってしまった.

この実験では, 正解がわからない二重非負値行列をつくり, それを判定することを考える. 判定する行列は以下のように生成した.

1. 各要素を標準正規分布とする 6×6 行列 B を生成する
2. $X = BB^T$ とする
3. X の要素がすべて非負ならばそれを採用. そうでなければ 1 へ戻る.

この方法で 1000 個の二重非負値行列を生成し, 以下の 2 通りの数値実験を行った. ちなみに、行列のサイズが 7 より大きくなると, ほとんど二重非負値行列が発生しなくなり, 実験ができなかった.

1. B を問題 (3) の W として用いて解く.
2. X を Cholesky 分解したものを問題 (3) の W として用いて解く.

結果を表 1 にかかげる.

この表から, B を用いると全く判定不能であるが, Cholesky 分解を用いると, 半数程度が完全正値と判定されている. 判定不能の場合とは, 行列が完全正値かもしれないし完全

正値でないかもしれない. 1と2で結果が大きく異なるのは, 提案手法が W の生成方法に依存していることを示している.

表 1: 数値実験3の結果

1の方法 \ 2の方法	CPと判定	判定不能
CPと判定	0	0
判定不能	535	465

5 まとめと今後の研究方針

整数完全正値性判定法では, 従来手法よりも早く判定ができ, 低CPランクに対して有効な手法であることがわかった.

一方, 完全正値性判定法では, SDP緩和問題を用いて比較的短い時間で完全正値行列であると判定できる可能性があることがわかった. しかし, この方法は完全ではないので今後の改良が必要である. また, 数値実験1および2では, 全ての場合に $QQ^T = I$ が得られ, 完全正値性の判定ができた. その理由も明らかにしたい.

参考文献

[1] A. Berman and N. Shaked-Monderer, *Completely positive Matrices,* World Scientific, 2003.

[2] S. Burer and K. Anstreicher and M. Dür, "The difference between 5×5 doubly nonnegative and completely positive matrices", *Linear Algebra and its Applications*, **431,** 1539-1552 2009.

[3] H. Dong and K. Anstreicher, "Separating doubly nonnegative and completely positive matirces", *Mathematical Programming,* Ser.A, **137,** 131-153, 2011.

[4] P. J. C. Dickinson and L. Gijben,"On the computational complexity of membership problems for the completely positive cone and its dual." *Computational Optimization and Applications*, **57,** 403-415,2014

[5] S. Burer, "On the copositive representation of binary and continuous non convex quardatic programs." *Mathematical Programming,* Ser.A,**120,** 479-495, 2009.

[6] K. G. Murty and S. N. Kabadi,"Some NP-complete problems in quadratic and nonlinear programming." *Mathematical Programming, Ser.A,* **39,** 117-129, 1987.

[7] 田村明久, 村松正和, 最適化, 共立出版, 2002.

[8] 川瀬弘樹,"完全正値性の判定に関する研究." 修士論文, 電気通信大学, 2014.

[9] 田中彰浩,"行列の共正値性を判定する新しいアルゴリズムの提案." 修士論文, 筑波大学, 2013.