代数的対称性による行列の同時ブロック対角化法

数理第２研究室 前原貴憲 (076228)　　指導教員 室田一雄 教授

2009 年 2 月 3 日

1 はじめに

本論文では行列の同時ブロック対角化に関する２つの問題を扱った．

１つ目の問題は，正方行列 $A_1, \ldots, A_N$ が与えられたとき，これらを同時ブロック対角化する直交行列，すなわち，$P^\top A_1 P, \ldots, P^\top A_N P$ が同じ形のブロック対角行列となるような直交行列 P を求めるものである．

この問題は，代数的対称性を持つ半正定値計画問題（SDP）の分野で近年盛んに研究されている．応用上現れる多くの SDP は代数的な対称性を持つが，Gatermann-Parrilo [2] はそのような SDP に対し，群の表現論において知られている基本的事実「代数的対称性を持つ行列は（対称性に応じて）同時ブロック対角化できる」を用いて SDP の係数行列を同時ブロック対角化し，より小さなサイズの SDP へと変形する手法を述べた．

ところが，この手法を適用するには問題の対称性が陽に分かっていなければならない．しかし，対称性を発見することは一般には容易でなく，特に，幾何学的対称性のほかに，行列の疎性や数値パターンによって生じる対称性は発見が困難である．そこで，室田ら [4] は与えられた SDP の係数行列（対称行列）のみを用いてそれらの分解を求める数値的なアルゴリズムを提案した．これは分解対象の行列のなす代数構造を考えることで，陰的に代数的対称性を取り入れる手法と言える．しかし，[4] の手法には，最も細かな分解が求まらない場合があった．図１はそのような対称性を持つ構造物の例である．

そこで本研究では [4] の手法を拡張し，どのような行列が与えられた場合でも，その最も細かな分解を求めるアルゴリズムを提案した．また，[4] のアルゴリズムでは分解対象の行列はすべて対称行列に制限されていたが，本研究では一般の行列に対して動作するようにし，SDP 以外への応用を可能とした．

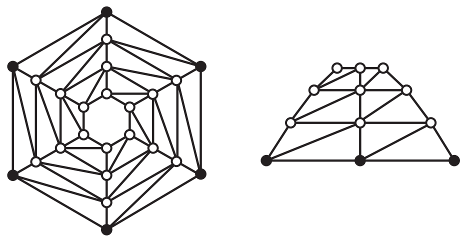

図 1. Schwedler dome（回転対称性を持つ構造物）.

２つ目の問題は，長方行列 $A_1, \ldots, A_N$ が与えられたとき，これらを同時ブロック対角化する直交行列，すなわち，$P^\top A_1 Q, \ldots, P^\top A_N Q$ が同じ形のブロック対角行列となるような直交行列 P, Q を求めるものである．

この問題は１つ目の問題の長方行列への拡張であり，同時に，応用上重要な行列の分解である特異値分解の複数の行列への拡張と見ることができる．

本研究では最も細かな長方行列の同時ブロック対角化を同時特異値分解と名づけ，それが本質的に一意に存在することと，その構造を記述する定理を証明した．また，構造定理をもとにして，与えられた長方行列からその同時特異値分解を計算するアルゴリズムを提案した．このアルゴリズムでは，正方行列の同時ブロック対角化アルゴリズムをサブルーチンとして用いる．この新しい種類の分解は，最適化やデータ解析などへの応用が期待できるものだと考えられる．

2 正方行列の同時ブロック対角化法

正方行列 $A_1, \ldots, A_N$ の同時ブロック対角化を求めるため，これらが生成する行列 $*$ 代数と呼ばれる代数構造を考える．$n \times n$ 正方行列の集合 $\mathcal{T}$ が（実数上の）行列 $*$ 代数であるとは，$I \in \mathcal{T}$ および $A, B \in \mathcal{T}$, $\alpha \in \mathbb{R}$ に対して $A + B, AB, \alpha A, A^\top \in \mathcal{T}$ が成立することをいう．

$A_1, \ldots, A_N$ を含む最小の行列 $*$ 代数をこれらが生成する行列 $*$ 代数という．これは $I, A_1, \ldots, A_N$ の和，積，スカラー倍，転置によって作られる行列全体である．これを $\mathcal{T}$ としたとき，同時ブロック対角化に関して，次の性質が重要となる．

補題 1. $A_1, \ldots, A_N$ の同時ブロック対角化と $\mathcal{T}$ のすべての行列の同時ブロック対角化は一対一に対応する．■

この性質より，有限個の行列のかわりに，それらが生成する代数構造に注目することが正当化され，代数学で用いられている道具，特にこの場合，行列 $*$ 代数の構造定理と呼ばれる定理を適用することができるようになる．

定理を述べるため，２つの言葉を導入する．行列 $*$ 代数 $\mathcal{T}$ が単純であるとは，$\mathcal{T}$ が $\{O\}$ と $\mathcal{T}$ 以外のイデアルを持たないことをいう．ここで $\mathcal{T}$ のイデアルとは $\mathcal{T}$ の部分加群 $\mathcal{I}$ であって，任意の $A \in \mathcal{I}, B \in \mathcal{T}$ に対して $AB, A^* \in \mathcal{I}$ を満たすことをいう．また，行列 $*$ 代数 $\mathcal{T}$ が既約であるとは，$\mathcal{T}$ 不変部分空間が $\{\mathbf{0}\}$ と $\mathbb{R}^n$ 以外に存在しないことをいう．ここで $\mathbb{R}^n$ の部分空間 W が $\mathcal{T}$ について不変であるとは，任意の $A \in \mathcal{T}$ に対して $AW \subset W$ が成立することをいう．

以上の準備のもとで，行列 $*$ 代数に関してよく知られている構造定理が次のように述べられる：

定理 2 ([3], [4] など). $\mathcal{T}$ を n 次の行列 $*$ 代数とする．

(A) ある直交行列 P と単純な行列 $*$ 代数 $\mathcal{T}_j$ ($j = 1,\ldots,\ell$) が存在して以下が成立する：

$$\hat{Q}^\top \mathcal{T} \hat{Q} = \mathcal{T}_1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{T}_\ell.$$

(B) $\mathcal{T}$ が単純ならば，ある直交行列 P と既約な行列 $*$ 代数 $\mathcal{T}'$ が存在して以下が成立する：

$$P^\top \mathcal{T} P = \mathcal{T}' \otimes I_\mu.$$

(C) $\mathcal{T}$ が既約ならば，ある直交行列 P が存在して以下が成立する：

$$P^\top \mathcal{T} P = \mathcal{M}_n \text{ or } \mathcal{C}_{n/2} \text{ or } \mathcal{H}_{n/4}.$$

ここで $\mathcal{M}_n$ は $n \times n$ 実行列全体（実型），$\mathcal{C}_n$ は $n \times n$ 複素行列全体の実表現（複素型），$\mathcal{H}_n$ は $n \times n$ 四元行列の実表現（四元型）をそれぞれあらわす． ■

室田ら [4] はこの定理に基づき，与えられた対称行列を分解するアルゴリズムを提案した．そこでは，生成された行列 $*$ 代数に対して構造定理を適用したとき，(C) において実型のみが現れることを仮定していた．本研究ではそのアルゴリズムをベースにし，残りの２つの型に対するアルゴリズムを与え，さらに分解対象の行列を対称とは限らない場合へと拡張した．全体の手続きの概要を以下に示す：

アルゴリズム 3 (正方行列の同時ブロック対角化).

Step 1: $\mathcal{T}$ を単純成分に分解する直交行列を求める．

Step 2.1: 各単純成分 $\mathcal{T}_j$ について，対応する既約成分の型を判定する．

Step 2.2: $\mathcal{T}_j$ を既約成分に分解する直交行列を，判定した型に応じた手続きで行う．

Step 1 は $\mathcal{T}$ からランダムに行列を取り，その対角化を行うことで実行できる．Step 2.1 にはランダム行列の固有値の重複度と，代数の次元を用いる．Step 2.2 は判定された型に応じて固有値分解を使い分けることで実行できる．実型ならば対称行列の対角化，複素型ならば実 Schur 分解，四元型ならば実 Schur 分解と歪 Hamiltonian Schur 分解 [1] を用いる．

3 長方行列の同時ブロック対角化法

長方行列の同時ブロック対角化に関しても，正方行列の場合と同じようにそれらが生成する代数構造を考え，その構造定理をもとにアルゴリズムを設計することを考える．本研究では与えられた長方行列 $A_1,\ldots,A_N$ に対し，これらが生成する双加群を考えた．これは次のように表される：

$$\mathcal{A} := \left\{ A_{j_0} A_{j_1}^\top A_{j_2} A_{j_3}^\top \cdots A_{j_{2m}} : \forall (j_0,\ldots,j_{2m}) \right\}.$$

この集合は和とスカラー倍について閉じており，さらに $\mathcal{T}_L$ を $\mathcal{A}\mathcal{A}^\top$ が生成する行列 $*$ 代数，$\mathcal{T}_R$ を $\mathcal{A}^\top\mathcal{A}$ が生成する行列 $*$ 代数としたとき，$\mathcal{T}_L$ の元の左からの積と，$\mathcal{T}_R$ の元の右からの積について閉じている．一般にこのような演算について閉じている集合は $(\mathcal{T}_L, \mathcal{T}_R)$ 双加群と呼ばれる．この代数構造について，正方行列の場合と同様に，以下の性質が成り立つ．

補題 4. $A_1,\ldots,A_N$ の同時ブロック対角化と $\mathcal{A}$ のすべての行列の同時ブロック対角化は一対一に対応する． ■

本研究では行列 $*$ 代数上の双加群について，最も細かな分解（同時特異値分解）が本質的に一意に存在することと，その構造を記述する定理を証明した．これは行列 $*$ 代数の構造定理（定理 2）と同じ形の定理で，(A) 単純成分分解，(B) 既約成分分解，(C) 既約成分の特徴づけ（実型，複素型，四元型の３種類のみ）からなり，さらに，$\mathcal{A}$ の分解の構造が $\mathcal{T}_L, \mathcal{T}_R$ の分解の構造から定まることを主張する．この定理は行列 A の特異値分解が $AA^\top$ や $A^\top A$ の固有値分解から得られることの，複数の行列に対する拡張と見ることもできる．

また，本研究ではこの構造定理をもとにして，与えられた長方行列からその同時特異値分解を計算するアルゴリズムを提案した．その概要は以下のように述べられる：

アルゴリズム 5 (同時特異値分解).

Step 1: $\mathcal{T}_L$ を同時ブロック対角化する P を求める．

Step 2: $\mathcal{T}_R$ を同時ブロック対角化する Q を求める．

Step 3: $P^\top \mathcal{A} Q$ が同時ブロック対角形になるように P, Q を修正する．

Step 1, 2 は本研究で提案した正方行列の同時ブロック対角化アルゴリズムが適用できる．また，Step 3 の修正手続きは，構造定理の証明から得られる．

参考文献

[1] P. Benner, D. Kressner, and V. Mehrmann: Skew-Hamiltonian and Hamiltonian eigenvalue problems: Theory, algorithms and applications, *Proc. Conf. Appl. Math. Sci. Comput.*, Springer, 2005, pp. 3–39.

[2] K. Gatermann and P.A. Parrilo: Symmetry groups, semidefinite programs, and sums of squares, *J. Pure Appl. Alg.*, 192 (2004), pp. 95–128.

[3] M. Kojima, S. Kojima and S. Hara: Linear algebra for semidefinite programming, Res. Rep. B-290, Tokyo Inst. Tech. 1994.

[4] K. Murota, Y. Kanno, M. Kojima, and S. Kojima: A numerical algorithm for block-diagonal decomposition of matrix $*$-algebras, METR 2007-52, Univ. Tokyo, 2007. (Revised version: http://www.misojiro.t.u-tokyo.ac.jp/~murota/paper/MKKKrev.pdf)