q-determinantの最小化

九州大学　数理学府修士課程1年
照本直敏

2013年1月26日　組合せ数学セミナー

定義(q-determinant)

$q \in \mathbb{R},\ A = (a_{ij})$: n次正方行列に対し，次のqの多項式を考える

$$q\text{-}\det A := \sum_{\sigma \in S_n} q^{\iota(\sigma)} \prod_{i=1}^{n} a_{i\sigma(i)}$$

ただし，$\iota(\sigma) := \#\{1 \leq i < j \leq n; \sigma(i) > \sigma(j)\}$

転倒数 (inversion number) という

- $q = -1$のとき　$q\text{-}detA = detA$
- $q = 0$のとき　$q\text{-}detA = \prod_{i=1}^{n} a_{ii}$
- $q = 1$のとき　$q\text{-}detA = perA = \sum_{\sigma \in S_n} \prod_{i=1}^{n} a_{i\sigma(i)}$

例(n=3)

- $\iota(\sigma)=\#\{1 \leq i < j \leq 3; \sigma(i) > \sigma(j)\}$

σ	e	(12)	(13)	(23)	(123)	(132)
$\iota(\sigma)$	0	1	3	1	2	2

したがって,

$$q\text{-}detA = \sum_{\sigma \in S_3} q^{\iota(\sigma)} \prod_{i=1}^{3} a_{i\sigma(i)}$$

$$= a_{11}a_{22}a_{33} + q a_{12}a_{21}a_{33} + q^3 a_{13}a_{22}a_{31}$$
$$+ q a_{11}a_{23}a_{32} + q^2 a_{12}a_{23}a_{31} + q^2 a_{13}a_{21}a_{32}$$
$$= a_{11}a_{22}a_{33} + q(a_{12}a_{21}a_{33} + a_{13}a_{22}a_{31})$$
$$+ q^2(a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32}) + q^3 a_{13}a_{22}a_{31}$$

問題設定

q-detは次の性質をもっている．

① Bozejko & Speicher (1991)

$-1 \leq q \leq 1$ のとき，Aが半正定値なら $q\text{-}detA \geq 0$

<u>研究の目的</u>

$q \in \mathbb{R}$ に対して，

$\lambda_n(q) \coloneqq \min\{q\text{-}detA \mid A: n$次半正定値，$A_{ii} = 1\}$

を求めたい．

研究の結果

結果

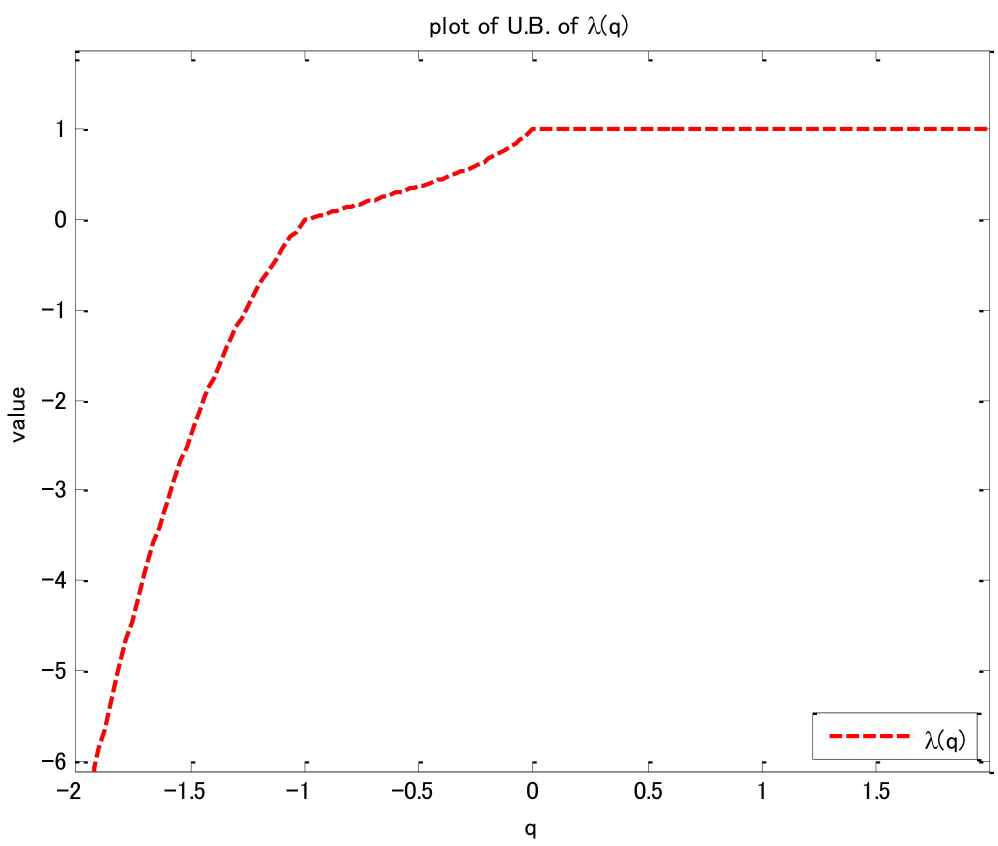
$$\lambda_3(q) \leq \begin{cases} 1 & 0 \leq q \\ \dfrac{1}{(1+q)(1+q+q^2)} & -\dfrac{1}{2} \leq q \leq 0 \\ \dfrac{3}{4}(1+q) & -1 \leq q \leq -\dfrac{1}{2} \\ 1+q^3 & q \leq -1 \end{cases}$$

研究の結果

<u>予想</u>

$\lambda_n(q)$は前頁の関係が等号で成立することが予想される．

また，グラフから連続性及び単調性が期待できる．



研究の手法

- $\lambda_n(q)$ をq 毎に求めたい．
  ⇒ 最小化問題は難しい（非凸のため）

- 最適化手法を使って，求めたい
  $\lambda_n(q)$の下界を与えるような最適化関数 $\mu_n(q)$ を構成し
  計算する．

- $\mu_n(q) \leq \lambda_n(q)$ の gap が 0 あるいは小さくなるような最適化問題を作りたい．
  ⇒ <u>半正定値計画緩和（SDP緩和）</u>

SDP緩和

SDP

$$\min_{\mathrm{y}}\left\{\mathrm{b}^T\mathrm{y} \mid \mathrm{C}+\sum_{j=1}^{m} A_j\, y_j : N\text{次半正定値}\right\}$$

ただし，$b\,,y \in \mathbb{R}^m$,　$\mathrm{C}\,, A_j$: N次実対称行列

- SDPは凸性を有している

　⇒比較的容易に解けるうえ，ソフトウェアも充実している．
- $\lambda_n(q)$ からSDPを作る．（SDP緩和）
- この手法を用いると　“（SDPの最適値）$\leq \lambda_n(q)$”が保証される

SDP緩和の例(n=2,r=2)

- $A_2[x] = \begin{pmatrix} 1 & x \\ x & 1 \end{pmatrix}$, $q\text{-}detA_2[x] = 1 + qx^2$, $M_1[x] = \begin{pmatrix} 1 & x \\ x & x^2 \end{pmatrix}$

$$\lambda_2(q) = \{1 + qx^2 \mid \begin{pmatrix} 1 & x \\ x & 1 \end{pmatrix} \geq O\} = \{1 + qx^2 \mid \begin{pmatrix} 1 & x \\ x & x^2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & x \\ x & 1 \end{pmatrix} \geq O\}$$

$$= \{1 + qx^2 \mid \begin{pmatrix} 1 & x & x & x^2 \\ x & 1 & x^2 & x \\ x & x^2 & x^2 & x^3 \\ x^2 & x & x^3 & x^2 \end{pmatrix} \geq O\}$$

$$\leftarrow \begin{cases} x \to y_1 \\ x^2 \to y_2 \\ x^3 \to y_3 \end{cases}$$

$$\geq \{1 + qy_2 \mid \begin{pmatrix} 1 & y_1 & y_1 & y_2 \\ y_1 & 1 & y_2 & y_1 \\ y_1 & y_2 & y_2 & y_3 \\ y_2 & y_1 & y_3 & y_2 \end{pmatrix} \geq O\} \; (= \mu_{2,2}(q))$$

←SDP

たとえば，本来 $x^2 = x \cdot x$ $(y_2 = {y_1}^2)$ であるが，

半正定値性条件 $y_2 \geq {y_1}^2$ に制約が緩和されている．

SDPのつくり方 I

- $u_{r-1}[\mathrm{x}] := (1, x_1, x_2, x_3, {x_1}^2, x_1x_2, \ldots, {x_3}^{r-1})^T$
- $M_{r-1}[\mathrm{x}] := u_{r-1}[\mathrm{x}]u_{r-1}[\mathrm{x}]^T$ (rank 1 行列)

<u>性質</u>　$A_n[\mathrm{x}]$: 半正定値　$\Leftrightarrow$　$M_{r-1}[\mathrm{x}] \otimes A_n[\mathrm{x}]$: 半正定値

$$\min\ \{q\text{-}\,detA \mid M_{r-1}[\mathrm{x}] \otimes A_n[\mathrm{x}]: \text{半正定値}\}$$

は $\lambda_n(q) = \min\{q\text{-}\,detA \mid A: n\text{次半正定値}\}$ と等価.

SDPのつくり方Ⅱ

- $\lambda_n(q) = \min\ \{q\text{-}\,detA_n[\mathrm{x}]\mid M_{r-1}[\mathrm{x}] \otimes A_n[\mathrm{x}]$: 半正定値 $\}$
  は，x に関する多項式の最小化問題である．
  （制約条件は行列の各要素が x の多項式）

ここで，$y_\alpha := \mathrm{x}^\alpha$ とおくと，
$\min\{(y_\alpha$の線形関数$)\mid y_\alpha$に関する半正定値条件$\}\ (\leq \lambda_n(q))$
⇒ <u>SDPになっている</u>

y_αの決め方から，たとえば
$y_{22} = y_{20}y_{02}({x_1}^2{x_2}^2 = {x_1}^2 \cdot {x_2}^2)$は成立しなくてもよい
⇒　条件が緩くなっている
⇒　$\lambda_n(q)$の下界値 が得られる．

SDP緩和の注意

- r を大きくすると良い下界値が得られる．すなわち，
$$\mu_{n,r}(q) \leq \mu_{n,r+1}(q) \leq \lambda_n(q) \qquad ({}^{\forall}r\ ,{}^{\forall}q)$$
⇒ できるだけ大きい r でSDPを作って解きたい．

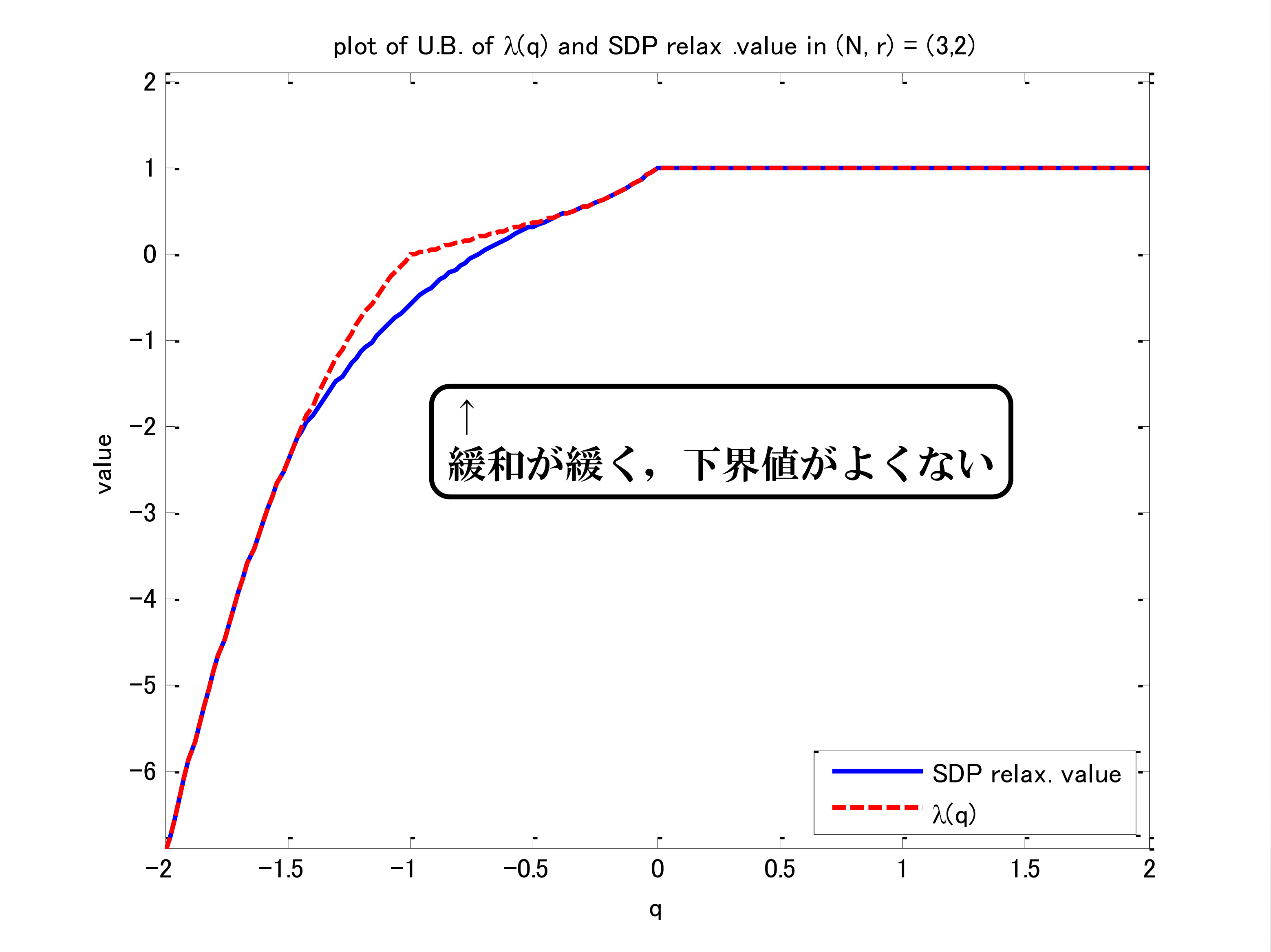
- しかし，r が大きいとSDPがスパコンでも解けない大規模になる．

- 実用上は r = 2 , 3 で充分よい下界値が得られる．

プログラムの概要

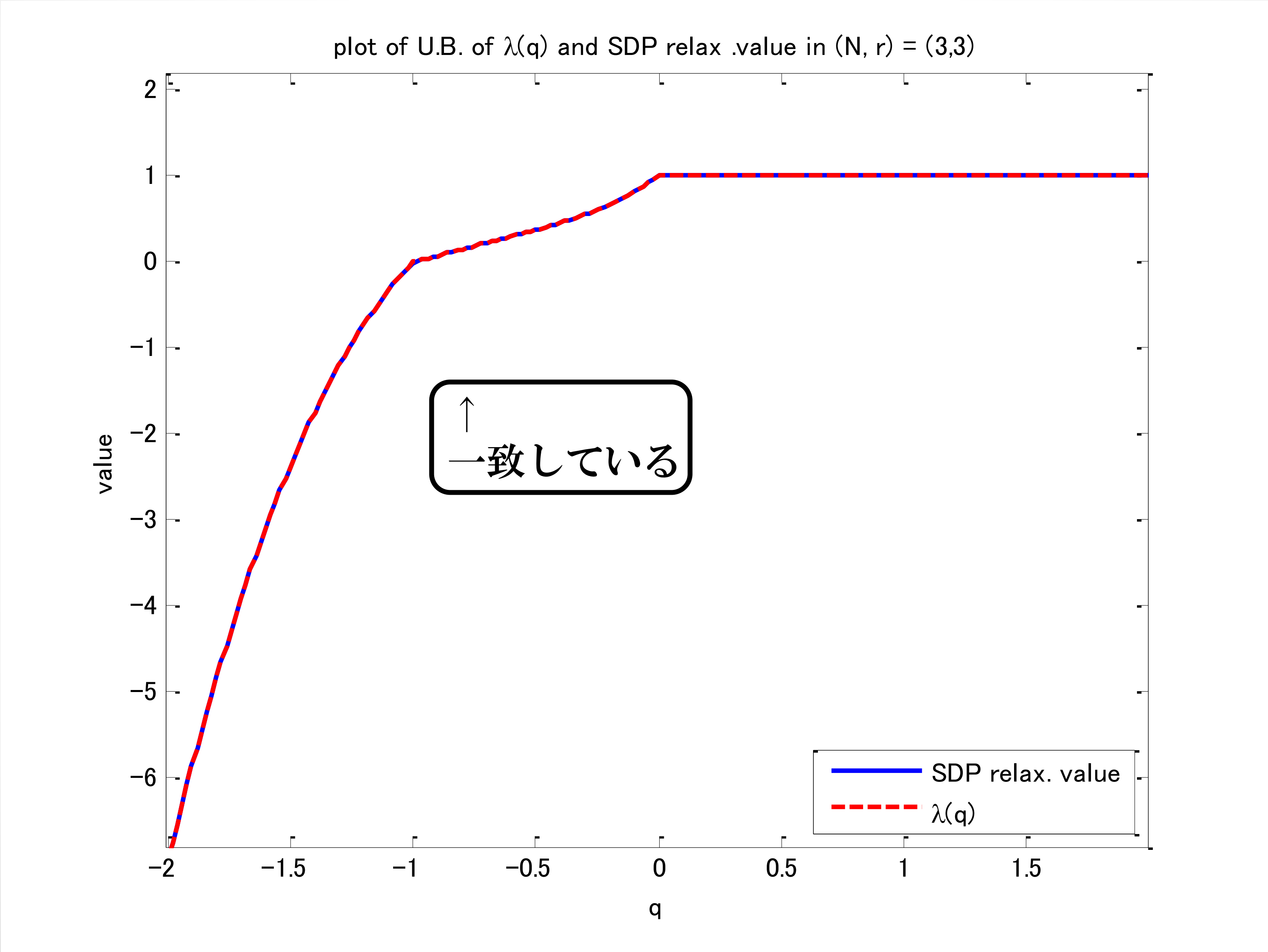
- 入力　n：行列A_n[x]のサイズ
  r：relaxOrder（u_{r-1}の次数）
- 出力　$-2 \leq q \leq 2$における $\mu_{n,r}(q)$ のグラフ

結果(n=3,r=2)



plot of U.B. of λ(q) and SDP relax .value in (N, r) = (3,2)
value
q
2
1
0
−1
−2
−3
−4
−5
−6
−2
−1.5
−1
−0.5
0
0.5
1
1.5
2
SDP relax. value
λ(q)
↑
緩和が緩く，下界値がよくない

結果(n=3,r=3)


plot of U.B. of λ(q) and SDP relax .value in (N, r) = (3,3)
value
q
2
1
0
−1
−2
−3
−4
−5
−6
−2
−1.5
−1
−0.5
0
0.5
1
1.5
↑
一致している
SDP relax. value
λ(q)