Shrunk subspace via operator Sinkhorn iteration

非会員 MIT Cole Franks
05000177 MIT *相馬 輔 Tasuku Soma
非会員 MIT Michel X. Goemans

1. 概要

成分に変数を含む行列は，マッチング問題や線形マトロイド交差，線形マトロイドパリティなど，様々な組合せ最適化問題を定式化できる強力な道具であると同時に，システム解析など工学的にも重要な応用を持つ．以下では，$A = x_1A_1 + \cdots + x_pA_p$（$x_i$ は変数，A_i は $n \times n$ 複素定数行列）の形の行列を考える．このような形の行列の行列式が零多項式か否かを決定性アルゴリズムで効率的に判定できるかという問は，**Edmonds 問題**と呼ばれ，重要な未解決問題である．

行列 A のランクを決定性アルゴリズムで計算することは一般には未解決であるが，近年，**非可換ランク**と呼ばれる量に対しては決定性多項式時間で計算できることが示された [GGOW19, IQS18, HH21]．行列 A の非可換ランクは次式で定義される．

$$\text{nc-rank}\, A = \min_{U \le \mathbb{C}^n} \{n - \dim U + \dim(\textstyle\sum_i A_i U)\}.$$

ここで U は $\mathbb{C}^n$ の部分空間を動く．代数的には，非可換ランクは変数 x_i を非可換変数とみなしたランクである．右辺を最小にする部分空間を **shrunk subspace** と呼ぶ．

既存の非可換ランクの計算アルゴリズムには，作用素スケーリングによるもの [GGOW19]，代数的増加道によるもの [IQS18]，CAT(0) 空間上の離散凸解析によるもの [HH21] がある．このうち，[GGOW19] は**作用素 Sinkhorn 反復**と呼ばれる単純な反復解法により非可換ランクの値を計算できるが，求められるのは値のみで shrunk subspace は求められない欠点がある．他方，[IQS18, HH21] は shrunk subspace も求められるが，作用素 Sinkhorn 反復に比べアルゴリズムが大幅に複雑になり，計算量も大きくなる欠点がある．[1]

本研究では，作用素 Sinkhorn 反復を拡張した比較的単純な反復解法に基づき，shrunk subspace を決定性多項式時間で求める手法を提案する．

2. 作用素スケーリング

作用素スケーリングは，古典的な行列スケーリングの拡張として，[Gur04] により提案された問題である．$n \times n$ 複素行列 $A_1, \ldots, A_p$ に対し，$\Phi : X \mapsto \sum_{i=1}^p A_i X A_i^\dagger$ を対応する完全正値写像とする．Φ^* を Φ の双対写像とする．正則行列 L, R に対し，$\Phi_{L,R}(X) = L\Phi(RXR^\dagger)L^\dagger$ を LA_iR に対応する完全正値写像とする．

作用素スケーリング [Gur04]

入力: 行列 $A_1, \ldots, A_p \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $\varepsilon > 0$
出力: 正則行列 L, R s.t. $\tilde{\Phi} := \Phi_{L,R}$ が以下を満たす:

$$\left\|\tilde{\Phi}(I) - I\right\|_F < \varepsilon, \quad \left\|\tilde{\Phi}^*(I) - I\right\|_F < \varepsilon.$$

[Gur04] は L, R を求める作用素 Sinkhorn 反復を与えている．また，$A = x_1A_1 + \cdots + x_pA_p$ の非可換ランクが n であることと，任意の $\varepsilon > 0$ に対し作用素スケーリングが解を持つことが等価であることも示されている．これは，行列スケーリングにおいて，非負行列 A の台グラフが完全マッチングを持つことと，A に左右から対角行列を掛けて二重確率行列にいくらでも近づけられることが等価であるという，Sinkhorn–Knopp の定理の一般化である．

3. 提案手法

以下では，提案手法の概要を述べる．

3.1. 作用素 k スケーリング

Shrunk subspace を求めるためには，完全マッチングではなく最大マッチングを考えた方が都合が良い．作用素スケーリングにおける「最大マッチング問題」として，以下の**作用素 k スケーリング**を導入する．

[1] ただし，[IQS18, HH21] は複素数体だけではなく任意の体上で動作する利点がある．

作用素 k スケーリング

入力: 行列 $A_1, \dots, A_p \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $\varepsilon, k > 0$
出力: 正則行列 L, R, $z \geq 0$ s.t. $\tilde{\Phi} := e^z \Phi_{L,R}$ が次を満たす:

$$\tilde{\Phi}(I) \preceq I, \tilde{\Phi}(I)^* \preceq I, \mathrm{tr}\,\tilde{\Phi}(I) \geq k - \varepsilon.$$

定理 1. 任意の $\varepsilon > 0$ に対して作用素 k スケーリングの解が存在することと，$k \leq \text{nc-rank}\, A$ であることは等価である．

3.2. 作用素 (k, r) スケーリング

非可換ランクの定義は $\mathbb{C}^n$ の部分空間上の劣モジュラ関数最小化である．したがって, shrunk subspace 全体はモジュラ束をなし，包含関係で最小の shrunk subspace U^* が存在する．U^* は，それを記述する直交射影行列が，入力の多項式長のビットで表現できる有理行列になる点で重要である．U^* を特徴づけるため，以下の**作用素 (k, r) スケーリング**を導入する．

作用素 (k, r) スケーリング

入力: $A_1, \dots, A_p \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $\varepsilon, k > 0$, $r \in \mathbb{Z}_+$
出力: 正則行列 L, R, $z \geq 0$ s.t. $\tilde{\Phi} = e^z \Phi_{L,R}$ が次を満たす:

$$\tilde{\Phi}(I) \preceq I, \lambda(\tilde{\Phi}(I)^*) \prec_{\mathrm{w}} \alpha_r, \mathrm{tr}\,\tilde{\Phi}(I) \geq k - \varepsilon.$$

ここで $\alpha_r = (\underbrace{1, \dots, 1}_{n-r}, \underbrace{1 - 1/n, \dots, 1 - 1/n}_{r})$ で, $\prec_{\mathrm{w}}$ は weak majorization を表す．

定理 2. 任意の $\varepsilon > 0$ に対して作用素 (k, r) スケーリングの解が存在することと，$k \leq \text{nc-rank}\, A$ かつ $r \leq \dim U^*$ であることは等価である．

3.3. Sinkhorn 反復

作用素 (k, r) スケーリングの解は，以下の連続最適化問題に対する KKT 点と対応する．

$$\begin{aligned} \min_{X, Y \succeq I, z \geq 0} & f_{k,r}(X, Y, z) \\ & := e^z X^{-1} \bullet \Phi(Y^{-1}) + \log\det X \\ & \quad + \alpha_r \cdot \lambda(\log Y) - kz \end{aligned}$$

この最適化問題に，ブロック座標降下法を適用することで，以下の反復解法が得られる．

(k, r) スケーリングに対する Sinkhorn 反復

$\Phi^{(0)} = \Phi$ として $t = 0, 2, 4, \dots$ に対し以下を繰り返す:

1. $\mathrm{tr}\,\Phi^{(t)}(I) < k - \varepsilon$ なら，z を制約を満たすよう更新し，$\Phi^{(t+1)} \leftarrow e^z \Phi^{(t)}$ とおく．
2. $\Phi^{(t+1)}$ が行和制約か列和制約を破っているなら，破り方の大きい制約を満たすように L or R を更新し，$\Phi^{(t+2)} \leftarrow \Phi^{(t+1)}_{L,R}$ とおく．

定理 3. 各反復は Hermite 固有値分解や置換多面体上への KL 射影により $O(n^3)$ 時間で可能である．また，作用素 (k, r) スケーリングが解を持つならば $\Phi^{(t)}$ は解へ多項式回反復で収束し，そうでないならば $f_{k,r}(X, Y, z)$ は $-\infty$ へ発散する．

3.4. 提案アルゴリズムの概要

Shrunk subspace を求めるアルゴリズム

1. 作用素 k スケーリングを用いて $k^* = \text{nc-rank}\, A$ を求める．
2. 作用素 (k^*, r) スケーリングを用いて $r^* = \dim U^*$ を求める．
3. $(k, r) = (k^*, r^* + 1)$ として Sinkhorn 反復を実行し，$f_{k,r}(X, Y, z)$ が十分小さい X, Y, z を求める．
4. X, Y, z から, 部分空間 S, T で, $\Pi_S \bullet \Phi(\Pi_T) \leq \varepsilon$, $\dim S + \dim T = 2n - k^*$, $\dim T \leq r^*$ となるものを求める．
5. T への直交射影行列 Π_T の各成分を適当な多項式ビット長の最も近い有理数に丸め，U^* への直交射影行列 Π_{U^*} を得る．

参考文献

[GGOW19] Ankit Garg, Leonid Gurvits, Rafael Oliveira, and Avi Wigderson. Operator scaling: Theory and applications. *Foundations of Computational Mathematics*, 20:223–290, 2019.

[Gur04] Leonid Gurvits. Classical complexity and quantum entanglement. *Journal of Computer and System Sciences*, 69(3):448–484, 2004.

[HH21] Masaki Hamada and Hiroshi Hirai. Computing the nc-rank via discrete convex optimization on CAT(0) spaces. *SIAM Journal on Applied Algebra and Geometry*, 5(3):455–478, 2021.

[IQS18] Gábor Ivanyos, Youming Qiao, and K. V. Subrahmanyam. Constructive non-commutative rank computation is in deterministic polynomial time. *Computational Complexity*, 27(4):561–593, 2018.