2012年10月24日　@京都大学数理解析研究所
次世代計算科学の基盤技術とその展開

# 行列の同時ブロック対角化手法の最近の進展

室田 一雄（東京大学情報理工）
前原 貴憲（国立情報学研究所）

共同研究者：小島政和，小島定吉，寒野善博，垣村尚徳，相浦大司

# 内　容

(1) **イントロダクション**

**同時ブロック対角化問題，群対称性**

(2) **諸分野の状況**

**数値計算，信号処理，最適化**

(3) **行列＊代数に基づく 基本アルゴリズム**(MKKKM **法**)

**行列＊代数**

(4) **行列＊代数に基づく 双対アルゴリズム**(MM **法**)

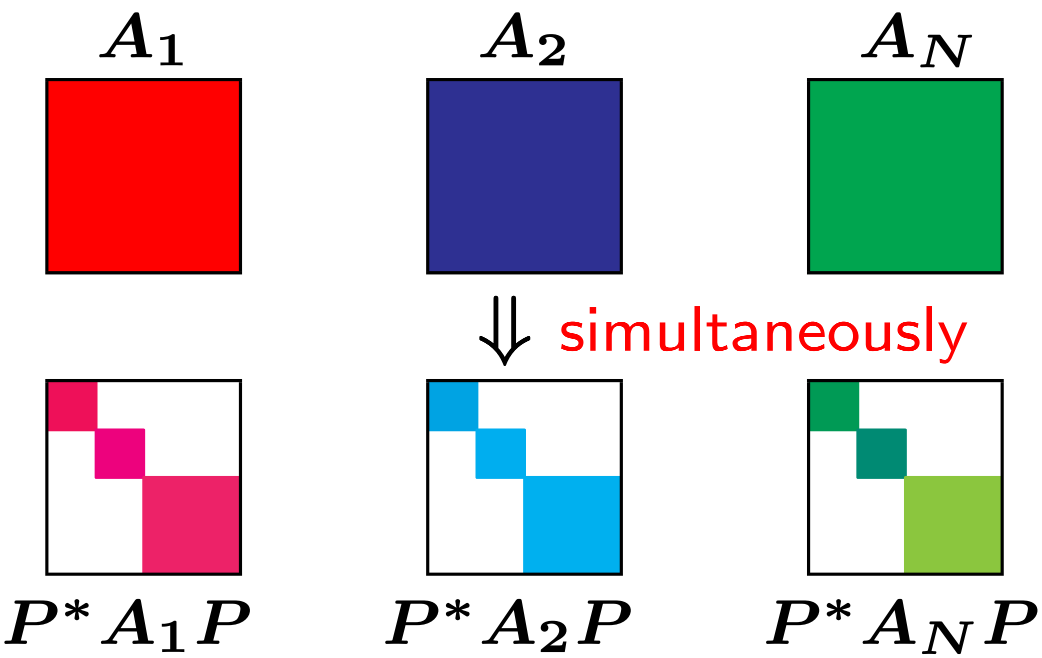
**誤差制御，交換子代数，数値計算上の課題**

(5) **応用１：分岐解析の効率化**

(6) **応用２：誤差推定と構造抽出**

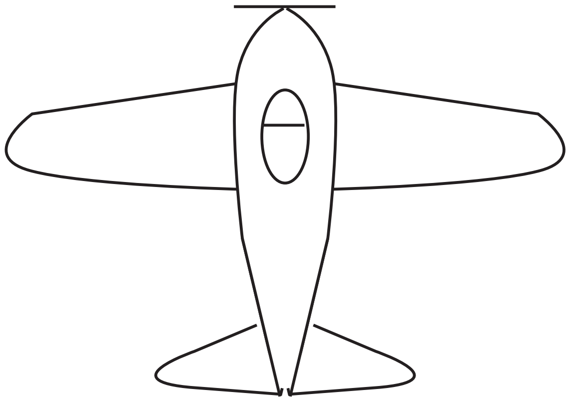
# 行列の同時ブロック対角化問題

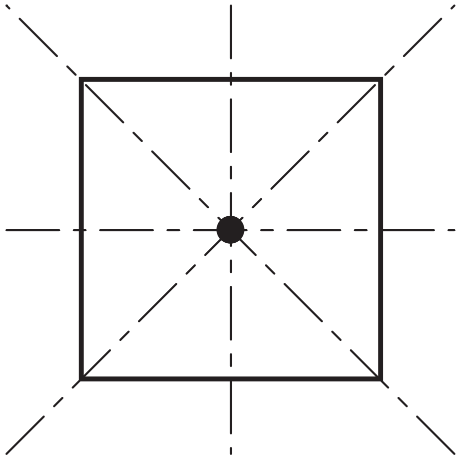
- **固有値問題 の拡張**
  **１つの行列 $\Rightarrow$ 行列の集合 / 対角化 $\Rightarrow$ ブロック対角化**
- **様々な分野：　物理 / 数値計算 / 信号処理 / 最適化**
- **「定番のアルゴリズム」無し**

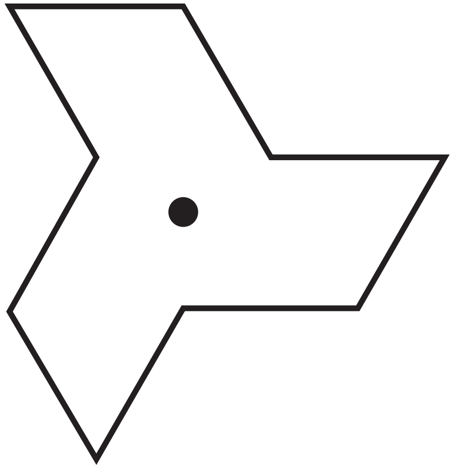


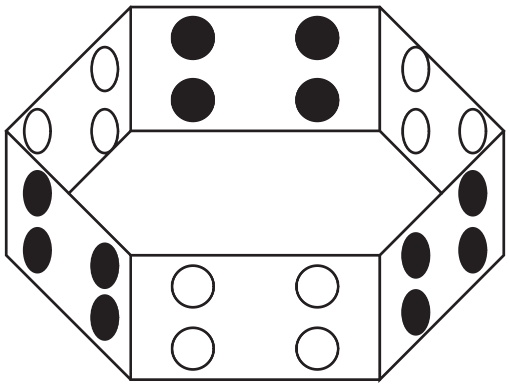

Given: $A_1, \ldots, A_N$
Find: $P$ (unitary)

# 対称性

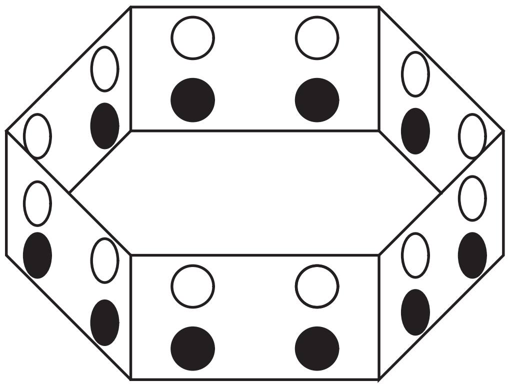




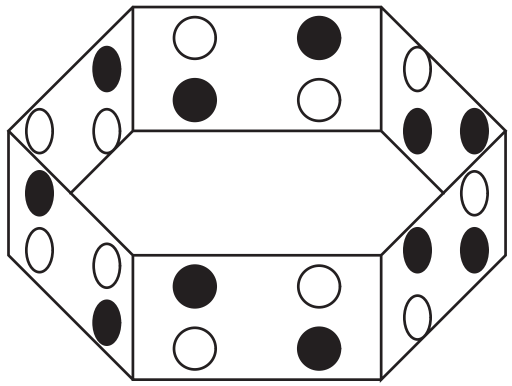




$D_{3h}$



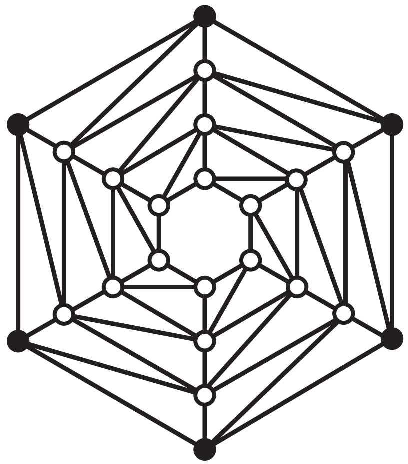
$C_{6v}$

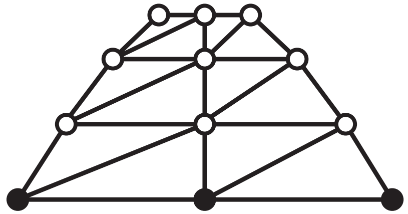


$D_6$

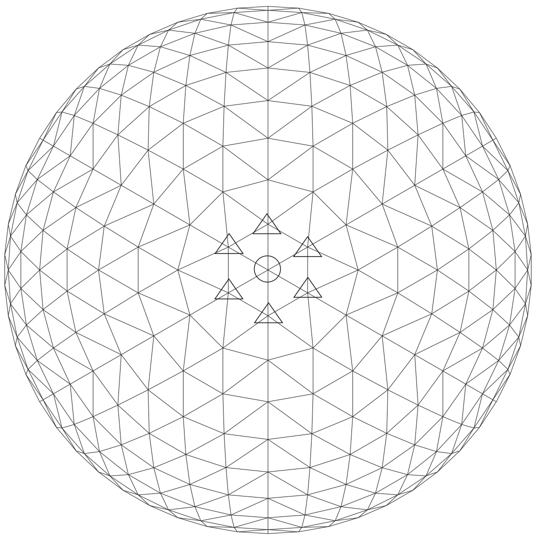
# $\mathbf{C_6}$ / $\mathbf{D_6}$ 対称トラス

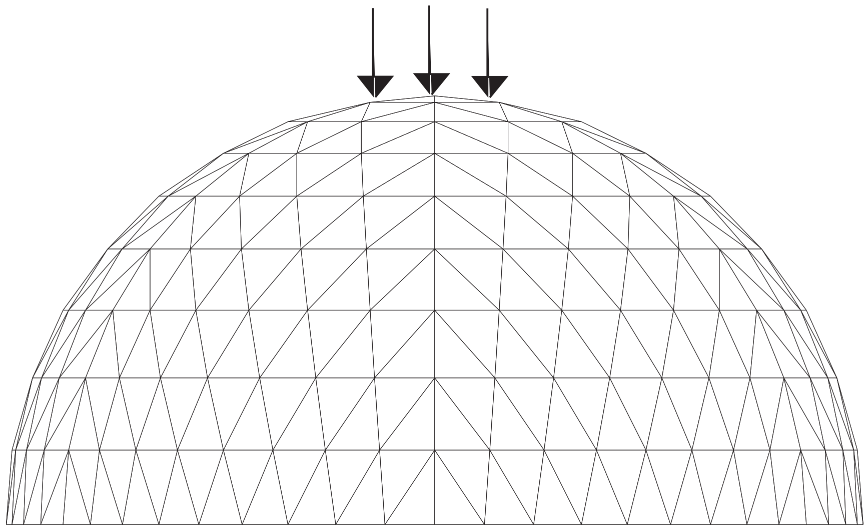
$\mathbf{C_6}$:





$\mathbf{D_6}$:





# 対称性・構造・ブロック対角化

**[数学的事実]** 対称性 $\Rightarrow$ 群論／表現論 $\Rightarrow$ ブロック対角化

**[応用的視点]** 対称性を利用して⋯

- 計算効率 を高める
  - 「半分だけ計算して済ませたい」(対称成分)
  - 「別の世界で計算できないか」(同型性)
- 構造 を認識する
  - 理論物理学における○○対称性

# 対称性・構造・ブロック対角化

**[数学的事実]** 対称性 $\Rightarrow$ 群論／表現論 $\Rightarrow$ ブロック対角化

**[応用的視点]** 対称性を利用して…

- 計算効率 を高める　→応用１：分岐解析の効率化
  - 「半分だけ計算して済ませたい」(対称成分)
  - 「別の世界で計算できないか」(同型性)
- 構造 を認識する　→応用２：誤差推定と構造抽出
  - 理論物理学における○○対称性

---

- 群論 $\Rightarrow$ 行列$*$代数
- 対称性を利用して… $\Rightarrow$ ブロック対角化を利用して…

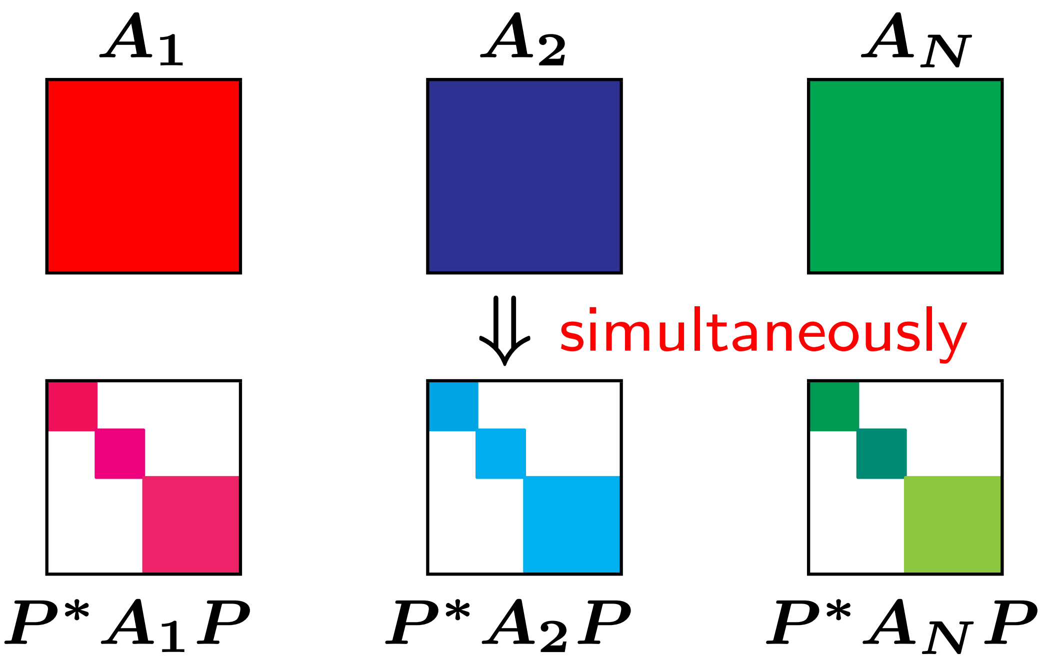
# 諸分野の状況

- 数値計算 [固有値問題の拡張]
  - 行列の対角化の拡張（概念，アルゴリズム）
- 信号処理 [構造の抽出]
  - 独立成分分析
- 最適化 [計算の効率化]
  - 半正定値計画　(A) 群の表現論／(B) 行列$*$代数

# 行列の同時ブロック対角化問題

- **固有値問題 の拡張**

  **１つの行列 ⇒ 行列の集合 / 対角化 ⇒ ブロック対角化**
- **様々な分野：　物理 / 数値計算 / 信号処理 / 最適化**
- **「定番のアルゴリズム」無し**




Given: $A_1, \ldots, A_N$

Find: $P$ (unitary)

## [数値計算分野]　Jacobi 法の拡張

(普通の)Jacobi 法　　入力：エルミート行列 $A$

1. 非対角二乗和 $\mathrm{off}(A)$ を最も減らす Givens 回転 $R$
2. $A \leftarrow R^* A R$　　　　（これを繰り返す）

複数行列用 Jacobi 法　Bunse-Gerstner–Byers–Mehrmann (1993)

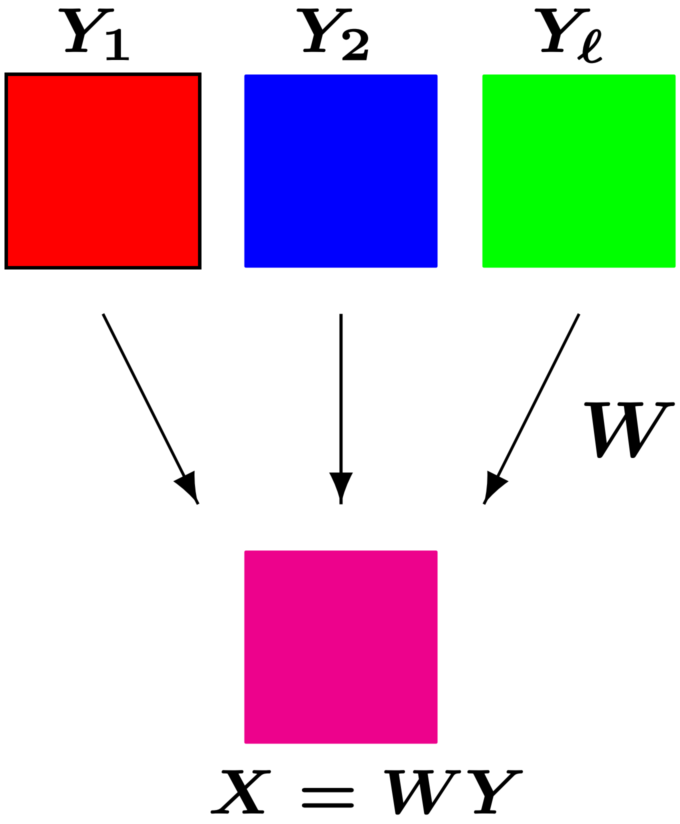
入力：同時対角化可能なエルミート行列 $A_1, \ldots, A_N$

1. $\sum_k \mathrm{off}(A_k)$ を最も減らす Givens 回転 $R$

   $R$ の陽な式： Cardoso–Souloumiac (1996)
2. $A_k \leftarrow R^* A_k R$　　　　（これを繰り返す）

- 大域的収束性なし / 局所的収束性あり

# [信号処理分野]　独立成分分析
## ICA: Independent Component Analysis




Given:　$n$ 次元観測信号 $X$

Find:　互いに独立な信号 $Y_1, \ldots, Y_\ell$
混合行列 $W$

**（カクテルパーティ効果）**

- 信号処理分野の基本的手法
- さまざまなモデル・手法が存在
  - 情報量：FastICA
  - ４次キュムラント：JADE
    Cardoso–Souloumiac (1993)
  - 時間遅れ相関：SOBI
    Belouchrani et al.(1997)

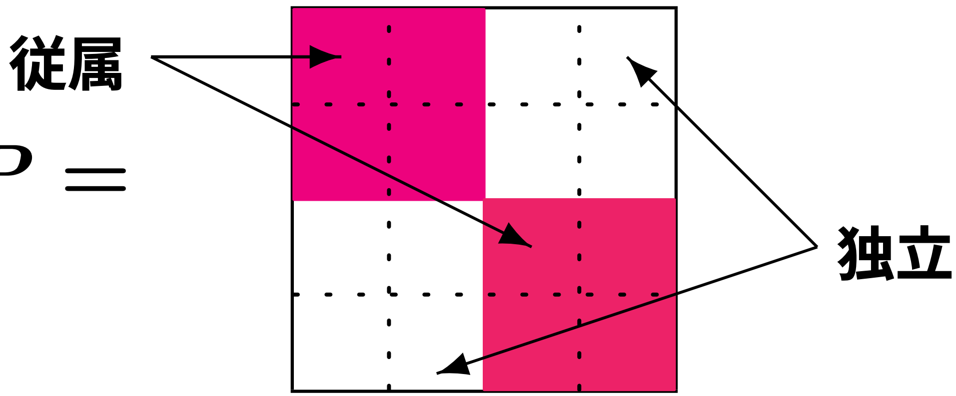
# JADE法　Cardoso–Souloumiac (1993)

**4次キュムラント行列$C_{ij} = (C_{ijkl})_{kl}$の同時対角化**
**$\Rightarrow$ 信号の独立成分分解**

$$
\begin{aligned}
C_{ijkl} := {}& \mathbf{E}[X_i X_j X_k X_l] - \mathbf{E}[X_i X_j]\mathbf{E}[X_k X_l] \\
& - \mathbf{E}[X_i X_k]\mathbf{E}[X_j X_i] - \mathbf{E}[X_i X_l]\mathbf{E}[X_j X_k]
\end{aligned}
$$

**性質**: $X_k$ と $X_l$ が独立 $\Rightarrow C_{ijkl} = 0$

$$P^* C_{\bullet} P =$$



# 信号処理分野の状況

- 信号源が１次元 $\Longleftrightarrow$ 同時対角化可能
  - 複数行列用 Jacobi 法を適用 ... Cardoso–Souloumiac (1993)
  - （理論保証は無いが）実用的にうまくいく
- 信号源が多次元（既知／未知）
  $\Longleftrightarrow$ 同時ブロック対角化可能
  - 複数行列用 Jacobi 法 (の拡張) ... Theis (2007)
  - （理論保証は無いが）実用的にうまくいく

# [最適化分野]　半正定値計画問題 (SDP)

**(主問題)**

minimize $\quad \langle A_0, X\rangle$

subject to $\quad \langle A_k, X\rangle = b_k \quad (k = 1, \ldots, N)$

$\quad X \succeq O$

**(双対問題)**

maximize $\quad b_1 y_1 + \cdots + b_N y_N$

subject to $\quad A_1 y_1 + \cdots + A_N y_N \preceq A_0$

$\quad y_1, \ldots, y_N \in \mathbb{R}$

---

- **美しい理論（双対理論，...）**
- **高速なアルゴリズム（主双対内点法，...）**
- **広い応用（構造物設計，組合せ問題の緩和問題，...）**

# ブロック対角形の 半正定値計画問題

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \langle \boldsymbol{A_0}, \boldsymbol{X} \rangle \\ \text{subject to} & \langle \boldsymbol{A_k}, \boldsymbol{X} \rangle = \boldsymbol{b_k} \ (\forall \boldsymbol{k}), \quad \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O} \end{array}$$

with

$$\boldsymbol{A_k} = \left[\begin{array}{c|c} \boldsymbol{B_k} & \boldsymbol{O} \\ \hline \boldsymbol{O} & \boldsymbol{C_k} \end{array}\right] \quad (\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{1}, \ldots, \boldsymbol{N})$$

$$\Downarrow \qquad \boldsymbol{X} := \left[\begin{array}{c|c} \boldsymbol{Y} & \boldsymbol{O} \\ \hline \boldsymbol{O} & \boldsymbol{Z} \end{array}\right]$$

• 変数の数 減

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \langle \boldsymbol{B_0}, \boldsymbol{Y} \rangle + \langle \boldsymbol{C_0}, \boldsymbol{Z} \rangle \\ \text{subject to} & \langle \boldsymbol{B_k}, \boldsymbol{Y} \rangle + \langle \boldsymbol{C_k}, \boldsymbol{Z} \rangle = \boldsymbol{b_k}, \quad \boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z} \succeq \boldsymbol{O} \end{array}$$

- 究極のブロック対角形（＝対角形） ＝ 線形計画
- 多くのSDP ソルバーはブロック対角構造を利用

# トラス設計問題

**幾何学的対称性**

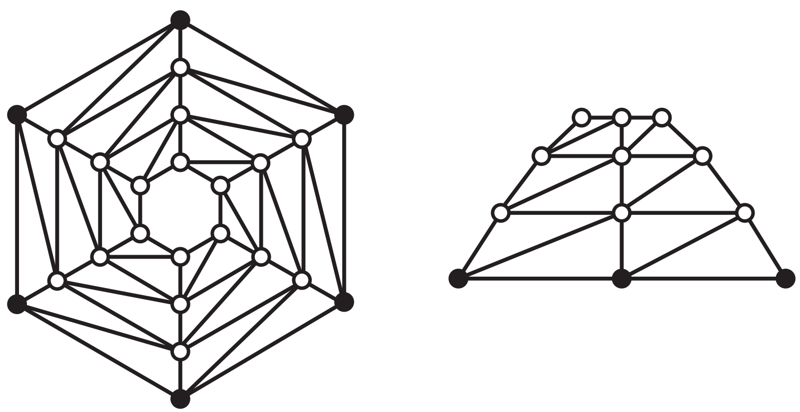
$$\text{minimize} \quad \sum_{i=1}^{t} \ell_i z_i$$

$$\text{subject to} \quad \sum_{i=1}^{t} (K_i - \bar{\Omega} M_i) z_i - \bar{\Omega} M_0 \succeq O$$

$$z_i \geq 0 \quad (i = 1, \dots, t)$$

（$\ell_i$：部材長，$z_i$：部材断面積，$\bar{\Omega}$：振動数下界

$K_i$：剛性行列，$M_i$：質量行列）



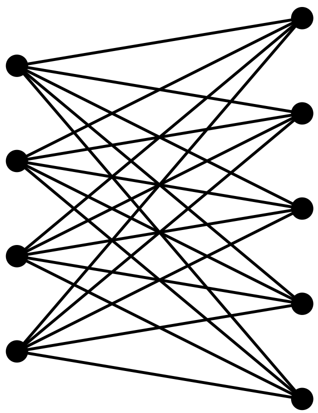
# 完全２部グラフ交差数問題

$(r-1)! \times (r-1)!$

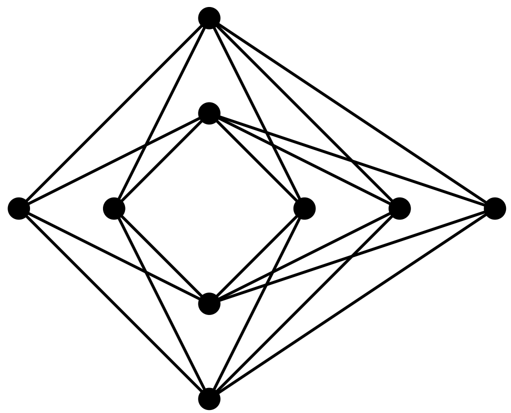
**置換対称性**

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \langle Q, X \rangle \\ \text{subject to} & \langle J, X \rangle = 1 \\ & X \geq 0,\ X \succeq O \end{array}$$

$$\mathrm{cr}(K_{r,s}) \geq \frac{s}{2}\left(s \cdot \mathrm{OPT} - \left\lfloor \frac{r}{2} \right\rfloor \frac{r-1}{2}\right)$$



交差数60



交差数8

# 半正定値計画と対称性：研究の歴史

1994: Kojima–Kojima–Hara　　講究録(1997)　　**＊代数**

Linear algebra for semidefinite programming

**●問題の対称性 vs 解の対称性**

2001: Kanno–Ohsaki–Murota–Katoh (Opt. Eng.)　　**内点法**

**●対称成分の定義／計算法**

2004: Gatermann–Parrilo (J.Pure Appl.Alg.)　　**群表現**

2010: Murota–Kanno–Kojima–Kojima (JJIAM)　　**＊代数**

2011: Maehara–Murota (SIAM,Matrix Anal.)　　**＊代数**

2011: de Klerk–Dobre–Pasechnik (Math.Progr.)　　**＊代数**

**●同型性の利用**

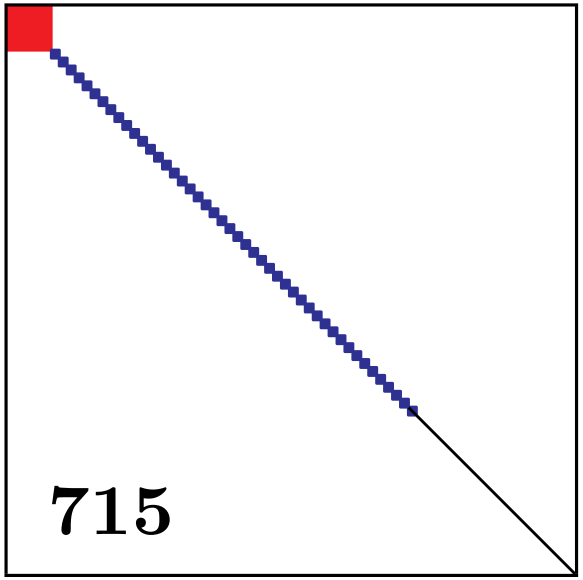
2007: de Klerk–Pasechnik–Schrijver (Math.Progr.)

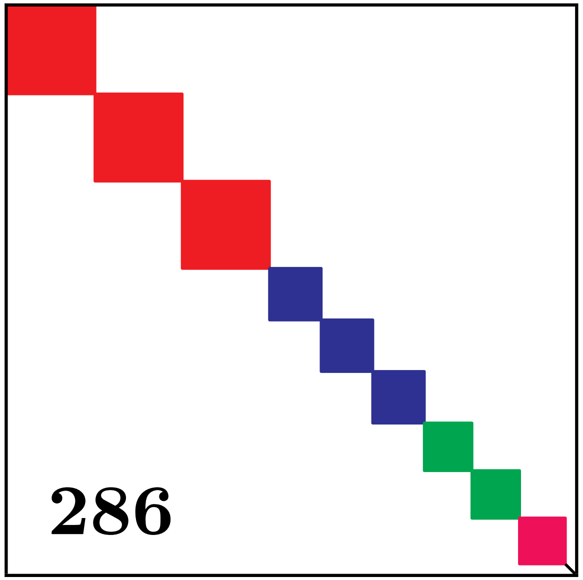
**正則表現，グラフ問題**

# 対称性の利用例　(Gatermann–Parrilo 2004)

- 10変数偶多項式最適化　群 $= \mathrm{C}_2 \times \cdots \times \mathrm{C}_2$（10個）

$\mathbf{715} \Rightarrow \mathbf{55}$ (1個) $+$ $\mathbf{10}$ (45個) $+$ $\mathbf{1}$ (210個)




- 4変数対称多項式最適化　群 $= \mathrm{S}_4$　⇒　5個の既約表現

$\mathbf{286} \Rightarrow \mathbf{44}$(3次) $+$ $\mathbf{26}$(3次) $+$ $\mathbf{24}$(2次) $+$ $\mathbf{23}$(1次) $+$ $\mathbf{5}$(1次)

(既約分解の計算にGAPを使用)

# 行列∗代数に基づく 基本アルゴリズム

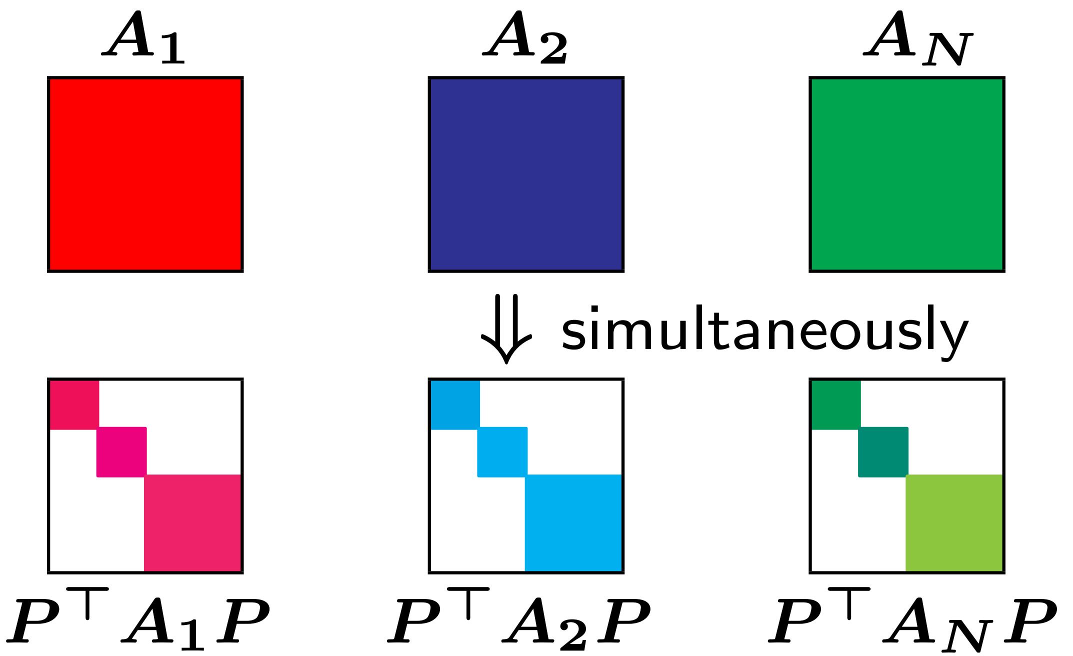
| | | |
|---|---|---|
| 2010 | **室田・寒野・小島・小島／前原・室田** (JJIAM) | MKKKM **法** |
| 2011 | **前原・室田** (SIMAX) | MM **法** |
| 2011 | de Klerk–Dobre–Pasechnik (Math. Progr.) | MKKKM **の変種** |

# 正方行列の同時ブロック対角化

Given　**正方行列** $A_1, \ldots, A_N$　　**[実行列]**

Find　**直交行列** $P$

s.t.　$P^\top A_1 P, \ldots, P^\top A_N P$ **同時ブロック対角形**



# 行列$*$代数

行列 $A_1, \ldots, A_N$ の同時ブロック対角化

$$\Updownarrow$$

$A_1, \ldots, A_N$ の

和・積・スカラー倍・転置によって作られる集合 $\mathcal{T}$

の同時ブロック対角化

($\because$ ブロック対角の和，積，転置，スカラー倍はブロック対角)

行列$*$代数：和・積・スカラー倍・転置で閉じている集合

行列の個数：有限 $\Rightarrow$ 無限

(構造ナシ) (行列$*$代数の構造定理)

# 行列$*$代数の構造定理 (Artin–Wedderburn)

行列$*$代数の **最も細かなブロック対角化構造** を記述

例えば： ↑一意に確定

$$P^\top \mathcal{T} P = \left\{ \left[ \begin{array}{c|c|c} B & & \\ \hline & B & \\ \hline & & C \end{array} \right] \mid B \in \mathcal{M}_3, C \in \mathcal{M}_4 \right\}$$

$\mathcal{M}$ 型サイズ 3 (重複度 2); $\mathcal{M}$ 型サイズ 4 (重複度 1)

- 各ブロックのサイズ
- 重複度
- 型
- 単純成分 vs 既約成分

# 同時ブロック対角化アルゴリズム(MKKKM法)

Murota–Kanno–Kojima–Kojima / Maehara–Murota (2010)

Step 1. **係数行列のランダム結合をつくる**

$$A(r) = r_1 A_1 + \cdots + r_N A_N$$

Step 2. $A(r)$ **の固有値分解を計算**

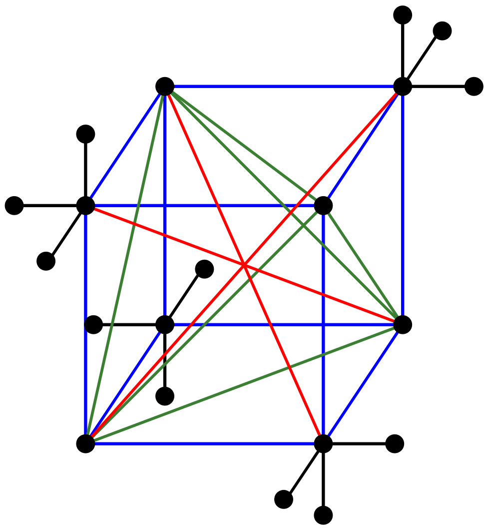
$$P^\top A(r) P = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$$

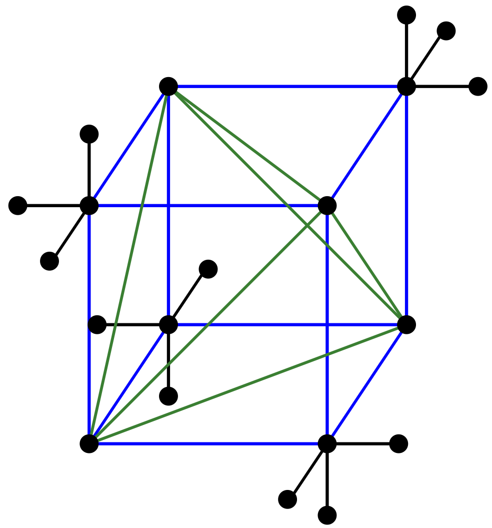
Step 3. $P$ **を修正**

- **数値計算の道具のみで構成**　　**（群論要らず）**
- **確率的アルゴリズム**　　**（確率１で成功）**
- **数値誤差に弱い**　　　　**⇒双対化により解決：MM法**

# MKKKM法の適用例　(室田・寒野・小島・小島 2010)

群 $\simeq \mathrm{S}_4$





| 対角部材あり | | 対角部材なし | |
|---|---|---|---|
| サイズ | 重複度 | サイズ | 重複度 |
| $\mathbf{2}$ | $\mathbf{1}$ | $\mathbf{2}$ | $\mathbf{1}$ |
| $\mathbf{2}$ | $\mathbf{2}$ | $\mathbf{2}$ | $\mathbf{2}$ |
| $\mathbf{2}$ | $\mathbf{3}$ | $\mathbf{2}$ | $\mathbf{3}$ |
| $\mathbf{4}$ | $\mathbf{3}$ | $\mathbf{2}$ | $\mathbf{3}$ |
| | | $\mathbf{2}$ | $\mathbf{3}$ |
| $\boldsymbol{n = 24}$ | | $\boldsymbol{n = 24}$ | |

**行列 $A_k$ の情報だけで可．**　**群構造は未知で可．**

# 行列$*$代数に基づく 双対アルゴリズム

| | | |
|---|---|---|
| 2010 | **室田・寒野・小島・小島／前原・室田** | MKKKM **法** |
| 2011 | **前原・室田** | MM **法** |
| 2011 | de Klerk–Dobre–Pasechnik | MKKKM **の変種** |

- MKKKM **法の双対化**
- **誤差制御つきの 同時ブロック対角化手法**

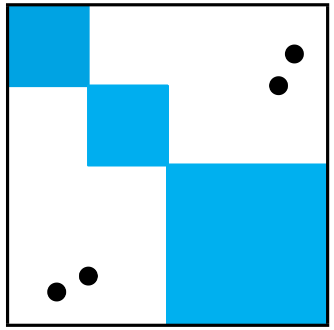
# 数値誤差を含む場合の手法(MM法)

Maehara–Murota (2011)

行列に $\boxed{\text{数値誤差}}$ が含まれている場合

（観測誤差，計算誤差） $\Downarrow$

従来の理論は利用困難



$\Downarrow$

- 行列 $*$ 代数に基づく MKKKM 法 の双対化

$$\boxed{\text{交換子代数} \quad \mathcal{T}' = \{X \mid AX = XA \ (\forall A \in \mathcal{T})\}}$$

のブロック対角化

$\Rightarrow$ もとの $\mathcal{T}$ のブロック対角化

- 許容誤差に応じた $\mathcal{T}'$（対称性）の近似 （cf. 特異値分解）

$$\boxed{\mathcal{T}' \approx \{X \mid \|AX - XA\| \leq \varepsilon \ (\forall A \in \mathcal{T})\}}$$

# 行列$*$代数 $\mathcal{T}$ の交換子代数 $\mathcal{T}'$

$$\mathcal{T}' = \{X \in \mathcal{M}_n : [A, X] = O \ (\forall A \in \mathcal{T})\}$$

$\mathcal{T}'$ も行列$*$代数　　記号：$[A, X] = AX - XA$

例

$$\mathcal{T} = \left\{ \begin{bmatrix} a & & \\ & B & \\ & & B \end{bmatrix} : a \in \mathbb{C}, B \in \mathcal{M}_3 \right\}$$

$$\mathcal{T}' = \left\{ \begin{bmatrix} x & & \\ & yI_3 & zI_3 \\ & vI_3 & wI_3 \end{bmatrix} : x, y, z, v, w \in \mathbb{C} \right\}$$

$$\simeq \left\{ \begin{bmatrix} x & & & \\ & Y & & \\ & & Y & \\ & & & Y \end{bmatrix} : x \in \mathbb{C}, , Y \in \mathcal{M}_2 \right\}$$

# 交換子代数の分解

## 性質

$$P \text{が} \mathcal{T} \text{ を単純分解} \iff P \text{が} \mathcal{T}' \text{ を単純分解}$$

$\mathcal{T}$ を分解するために，$\mathcal{T}'$ を分解するアルゴリズムを使う

## 双対法

1. $\mathcal{T}'$ の(S-genericな)エルミート行列 $X$ をとる
2. $X$ を対角化するユニタリ行列 $P$ を計算

- 正当性は代数的に簡単に示せる
- Step 1.の実現法（S-generic ： ランダムサンプル）

# 交換子代数からのランダムサンプル

$\mathcal{T}$ が $A_1, \ldots, A_N$ から生成されている場合

$$X \in \mathcal{T}' \iff [A_k, X] = O \ (k = 1, \ldots, N)$$

この条件は $X$ の成分の線形方程式

**双対法**

1. $[A_k, X] = O \ (k = 1, \ldots, N)$ のエルミート解をランダムサンプリングして $X$ とする
2. $X$ を対角化するユニタリ行列 $P$ を計算

記号：$[A, X] = AX - XA$

# 双対法は最も細い分解を求める

1. $[A_k, X] = O\ (k = 1, \ldots, N)$のエルミート解をランダムサンプリングして$X$とする
2. $X$を対角化するユニタリ行列$P$を計算

$X$の相異なる固有値の数 $=$ $A$のブロックの個数
$X$の固有値重複度 $=$ $A$の対応するブロックサイズ

**例**

$$\mathcal{T} = \left\{ \begin{bmatrix} a & & \\ & B & \\ & & B \end{bmatrix} : \begin{matrix} a \in \mathbb{C} \\ B \in \mathcal{M}_3 \end{matrix} \right\}, \mathcal{T}' = \left\{ \begin{bmatrix} x & & \\ & yI_3 & zI_3 \\ & vI_3 & wI_3 \end{bmatrix} \right\}$$

ランダムにエルミート $X \in \mathcal{T}'$ を取ると，固有値は

- 重複度1が1つ $\Rightarrow$ $1 \times 1$ブロックが1つ
- 重複度3が2つ $\Rightarrow$ $3 \times 3$ブロックが2つ

# [誤差対応]　双対法＋誤差制御＝MM 法

## 双対法

1. $[A_k, X] = O\ (k = 1, \ldots, N)$ のエルミート解をランダムサンプリングして $X$ とする
2. $X$ を対角化するユニタリ行列 $P$ を計算

$$\Downarrow$$

## MM 法（双対法＋誤差制御）

1. $\|[A_k, X]\| \leq \epsilon\ (k = 1, \ldots, N)$ のエルミート解をランダムサンプリングして $X$ とする
2. $X$ を対角化するユニタリ行列 $P$ を計算

$\epsilon$ は誤差のオーダーをあらわすパラメータ

# 誤差の評価

補題: $A$：任意，$X$：エルミート，$\|[A, X]\| \leq \epsilon$,
$P^* X P = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ のとき

$$|(P^* A P)_{ij} \cdot (\lambda_i - \lambda_j)| \leq \epsilon$$

$A$ と **ほぼ** 交換する $X$ $\Longrightarrow$ $X$ を対角化する $P$

$\Longrightarrow$ $P^* A P$ は $X$ の固有値に応じて **ほぼ** ブロック対角化

$X$ の離れている固有値の数 $=$ $A$ のブロックの個数

$X$ の固有値重複度 $=$ $A$ の対応するブロックサイズ

**例**

$$P^* X P = \begin{bmatrix} 1.00 & 0 & 0 \\ 0 & 2.00 & 0 \\ 0 & 0 & 2.01 \end{bmatrix} \Rightarrow P^* A P = \begin{bmatrix} * & \epsilon & \epsilon \\ \epsilon & * & * \\ \epsilon & * & * \end{bmatrix}$$

# [実装 1]　固有値問題への帰着

1. $\|[A_k, X]\| \le \epsilon \ (k = 1, \dots, N)$ のエルミート解をランダムサンプリングして $X$ とする
2. $X$ を対角化するユニタリ行列 $P$ を計算

記号：$\mathrm{vec}([A_k, X]) =: T_k \ \mathrm{vec}(X)$

$$S = \sum_k (T_k T_k^* + T_k^* T_k) \quad \leftarrow n^2 \times n^2 \text{ 半正定値行列}$$

$$[A_k, X] = O \ (\forall k) \iff T_k \ \mathrm{vec}(X) = 0 \ (\forall k)$$
$$\iff S \ \mathrm{vec}(X) = 0$$

$\Rightarrow$ $S$ に対する固有値問題　　$(\|u\| = 1)$

$$u^\top S u \le \epsilon^2 \Rightarrow u =: \mathrm{vec}(X) \Rightarrow \|[A_k, X]\| \le \epsilon \ (\forall k)$$

# [実装2]　Lanczos 法の適用

$$S = \sum_k (T_k T_k^* + T_k^* T_k)$$

の $\epsilon^2$ 以下の固有値に対応する固有ベクトルを求める

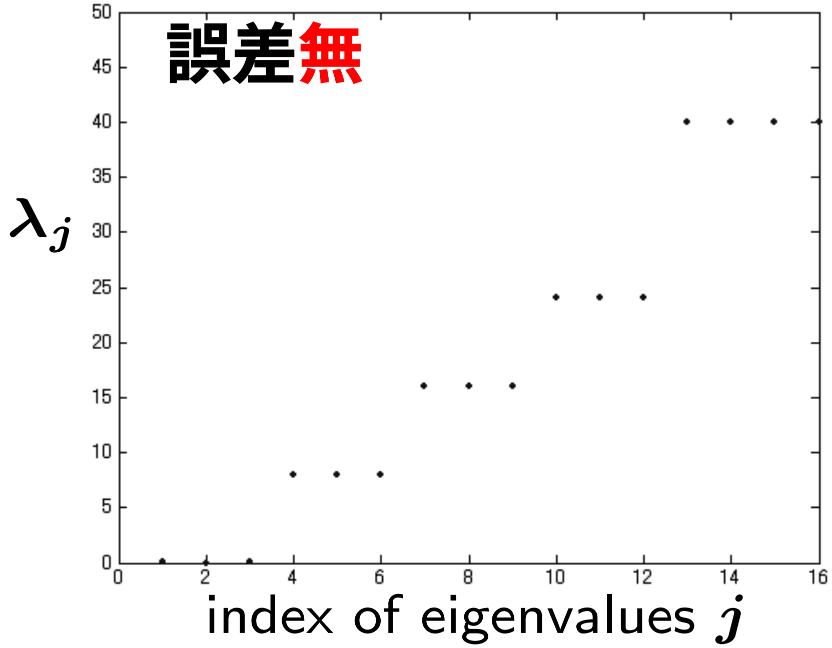
- $S$ は $n^2 \times n^2$ 行列　$\longleftarrow$ 陽に作れない
- $S$ とベクトルの積は効率的に　$\mathrm{O}(Nn^3)$ で　計算可能

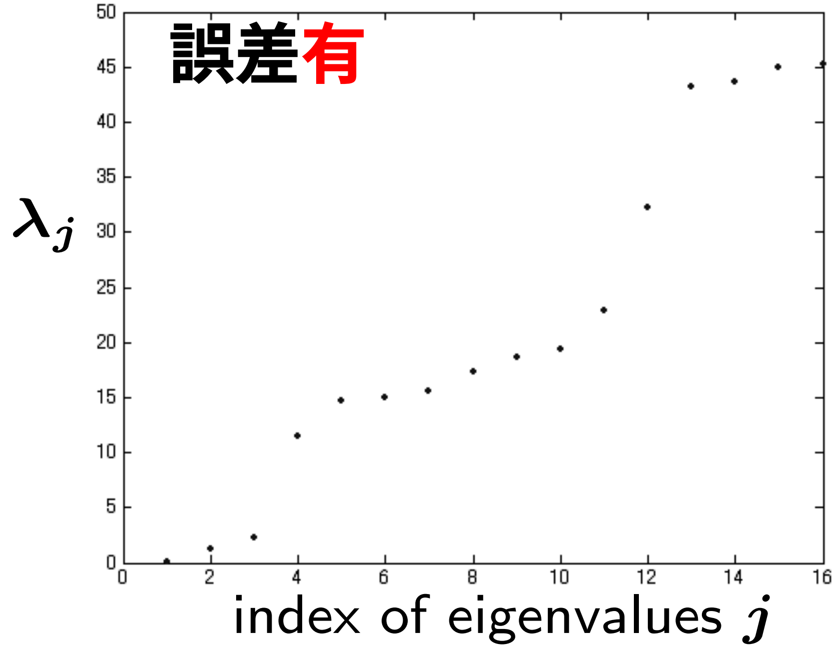
$\Rightarrow$ Lanczos 法を適用

# ［実装３］　誤差制御パラメータ $\epsilon$ の設定法

**行列 $S$ の固有値0の重複度 ＝ 交換子代数 $\mathcal{T}'$ の次元**

- 問題設定から既知の場合 （例：観測器の精度，素子の公称誤差）
- 未知の場合： 行列 $S$ の固有値を小さい順に見る
  - ・誤差無 $S$ の固有値：0が複数 ＋非ゼロ
  - ・誤差有 $S$ の固有値：小さい値が複数 ＋非ゼロ $\Rightarrow$ $\epsilon$ 設定

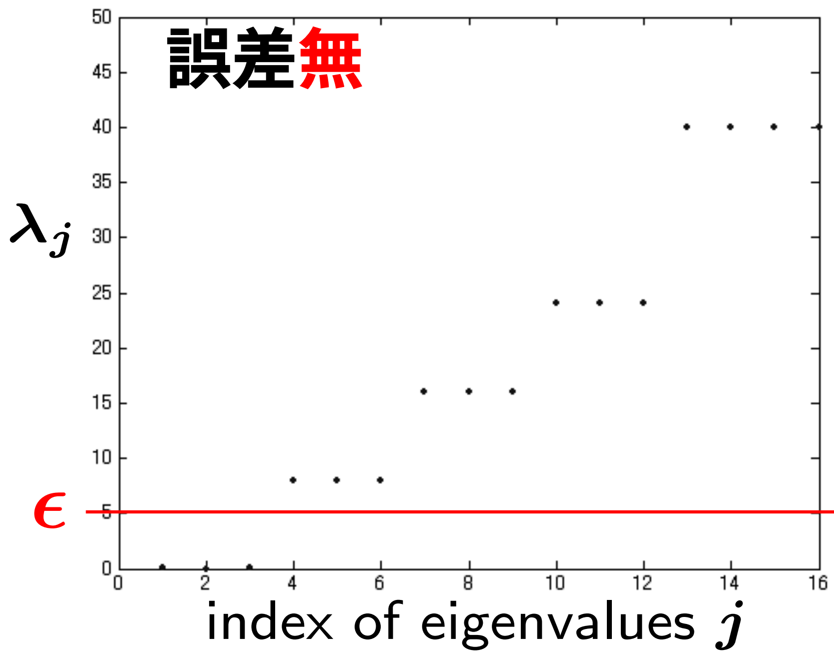


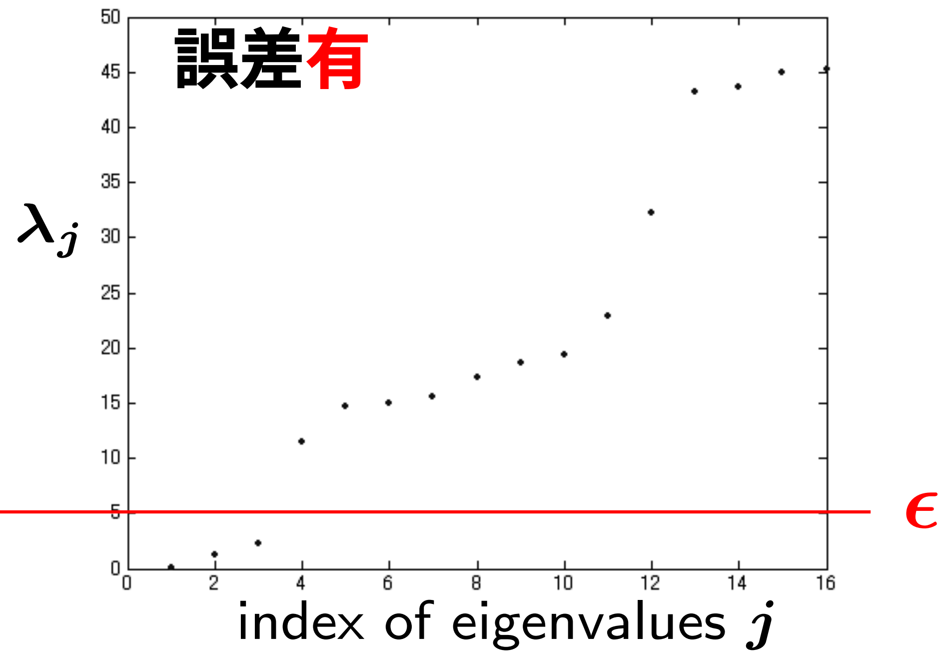



# [実装３]　誤差制御パラメータ $\epsilon$ の設定法

**行列 $S$ の固有値0の重複度 ＝ 交換子代数 $\mathcal{T}'$ の次元**

- 問題設定から既知の場合　（例：観測器の精度，素子の公称誤差）
- 未知の場合：行列 $S$ の固有値を小さい順に見る
  - ・誤差無 $S$ の固有値：0が複数 ＋非ゼロ
  - ・誤差有 $S$ の固有値：小さい値が複数 ＋非ゼロ $\Rightarrow$ $\epsilon$ 設定



http://www.misojiro.t.u-tokyo.ac.jp/~murota/

# 室田 一雄

English version

数理工学の研究をしています． 数理工学 というのは，工学の中に数理を見出し，工学に必要な数理を作り出す学問です．

研究：

- 研究紹介
- 著書
- 発表論文

- 離散凸解析のソフトウェアとデモ: DCP (Discrete Convex Paradigm)
- 混合行列のソフトウェアとデモ: CCF–decomposition
- 同時ブロック対角化のソフトウェア: MM algorithm

- 数理工学の本


ここです

講義：

- 東京大学での講義 (2012年度)
- 昨年度までの講義

http://www.misojiro.t.u-tokyo.ac.jp/~maehara/commdec/

# Error-Controlled Simultaneous Block-Diagonalization Algorithm

http://www.misojiro.t.u-tokyo.ac.jp/~maehara/commdec/

## Problem

The **Simultaneous Block-Diagonalization Problem** is the following problem:

> **Given:** n x n real (or complex) matrices A_1, ..., A_N.
>
> **Find:** An orthogonal (or a unitary) matrix P such that P' A_1 P, ..., P' A_N P become block-diagonal matrices with a common diagonal structure (simultaneous block-diagonal form

The problem is widely studied in many areas such as physics, numerical computation, optimization, signal processing.

In many applications, the input matrices are contaminated with numerical errors (observation errors, approximation errors, etc.) So the error-controlled variant of the problem, **Error-Con Block-Diagonalization Problem**, is more useful in practice:

> **Given:** n x n real (or complex) matrices A_1, ..., A_N and *error-controlling parameter* $\varepsilon \geq 0$.
>
> **Find:** An orthogonal (or a unitary) matrix P such that P' A_1 P, ..., P' A_N P are *ε-approximated* simultaneous block-diagonal form, i.e., P' A_j P = (Block-Diagonal Matrix) + ( O(

See [1] for more introduction and precise definition.

ここです

## Algorithm

In [1], we have proposed the following simple algorithm, "MM-algorithm", for Error-Controlled Simultaneous Block-Diagonalization Problem.

1. Sample randomly from { X: n x n symmetric (or Hermitian) matrix | |X A_j - A_j X| ≤ ε (for all j) }.
2. Return an orthogonal (or a unitary) matrix P which diagonalizes X.

Step 1 is reduced to eigenvalue computation of a large matrix S (n^2 x n^2), and the Lanczos method can be applied.

Remark: The algorithm is a *dual* (in the sense of the *commutant* of the matrix *-algebra) version of the algorithm in [2,3], the so-called "MKKKM algorithm".

## Source Code (in Matlab)

We have implemented the algorithm in Matlab.

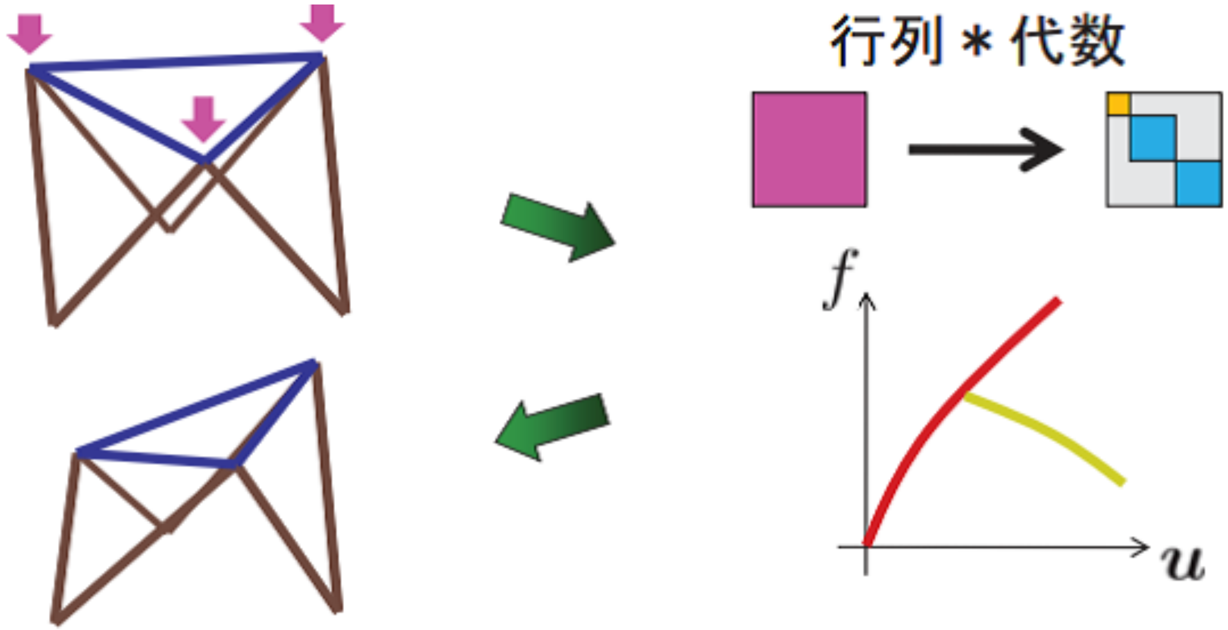
- commdec.m

The program is provided without warranty of any kind. You can use/modify/redistribute the program for any purpose.

# 応用１：分岐解析の効率化

相浦・垣村・室田(2011)

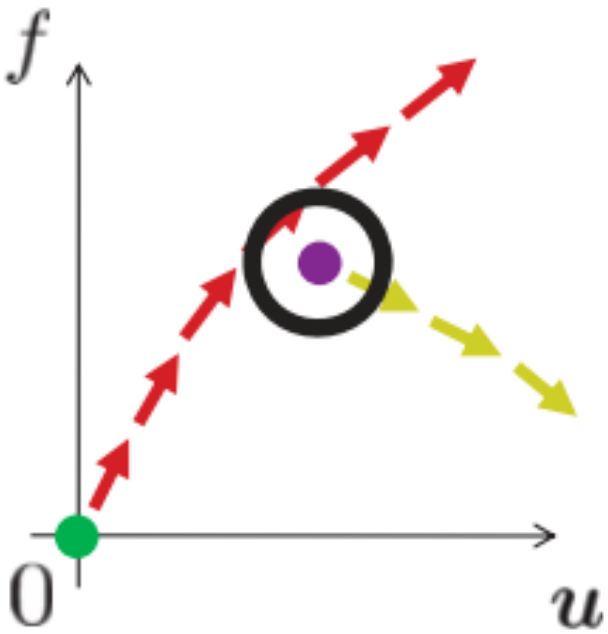
# 概　要




**経路追跡法：構造物の変形を調べるための手法**
**⇒ 行列の同時ブロック対角化による効率化**

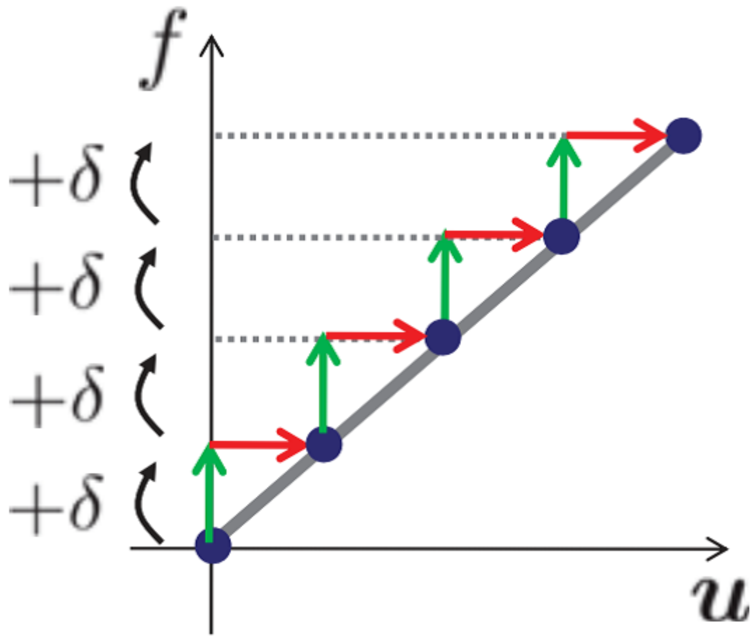
**群の表現論による手法**
**行列＊代数を用いた効率的な経路追跡法を提案**

# 経路追跡法：数値計算で釣合経路を求める




- 釣合経路の追跡
  $\Rightarrow$ ニュートン法
- 分岐点の発見
  $\Rightarrow$ 固有値解析

# 経路追跡法：ニュートン法




$\rightarrow$ ニュートン法

$\uparrow$ $f$を変化させる

**非線形方程式系**

$$F(u,f)=0$$

$$\left[\begin{array}{l} u\in\mathbb{R}^n,\, f\in\mathbb{R} \\ F:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}^n \end{array}\right]$$

$\Downarrow$ $f=f_0$ を1つ与える

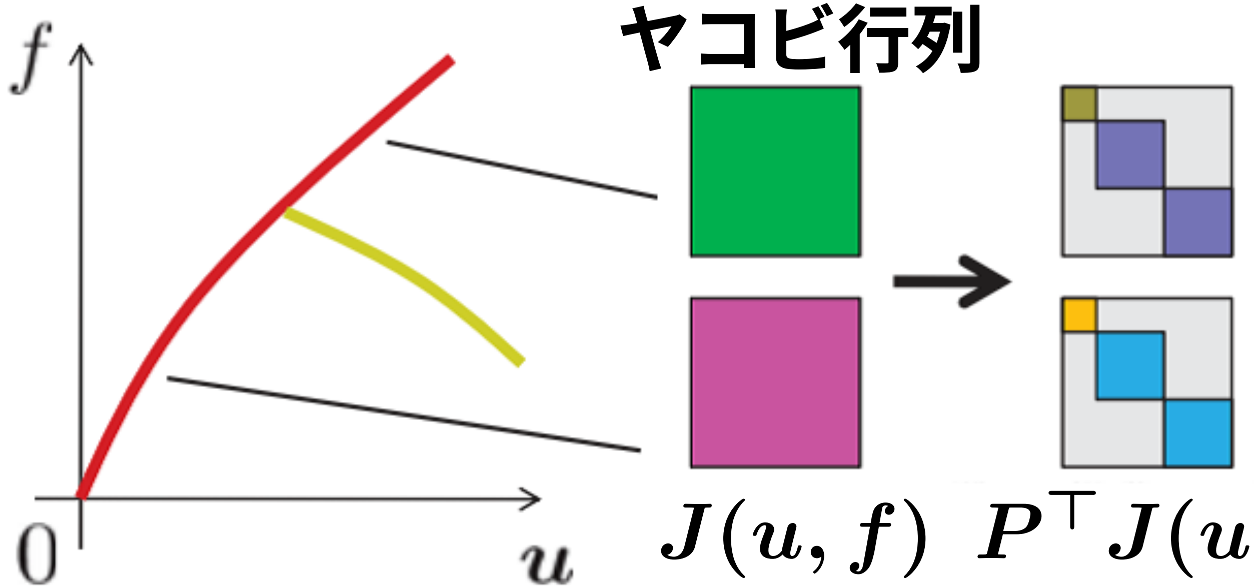
**$u$に関するニュートン法**

$$u^{(\nu+1)}=u^{(\nu)}-J(u^{(\nu)},f_0)^{-1}F(u^{(\nu)},f_0)$$

$J(u,f)$ : ヤコビ行列

# 対称性の利用：ヤコビ行列の同時ブロック対角化

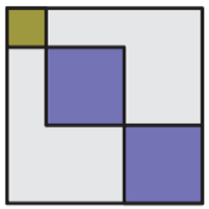
ヤコビ行列




**１つの直交行列で**
**すべてを同時に**
**ブロック対角化**

ニュートン法

$$u^{(\nu+1)} = u^{(\nu)} - $$



$$^{-1} F(u^{(\nu)}, f_0)$$

$P^\top J(f, u) P$

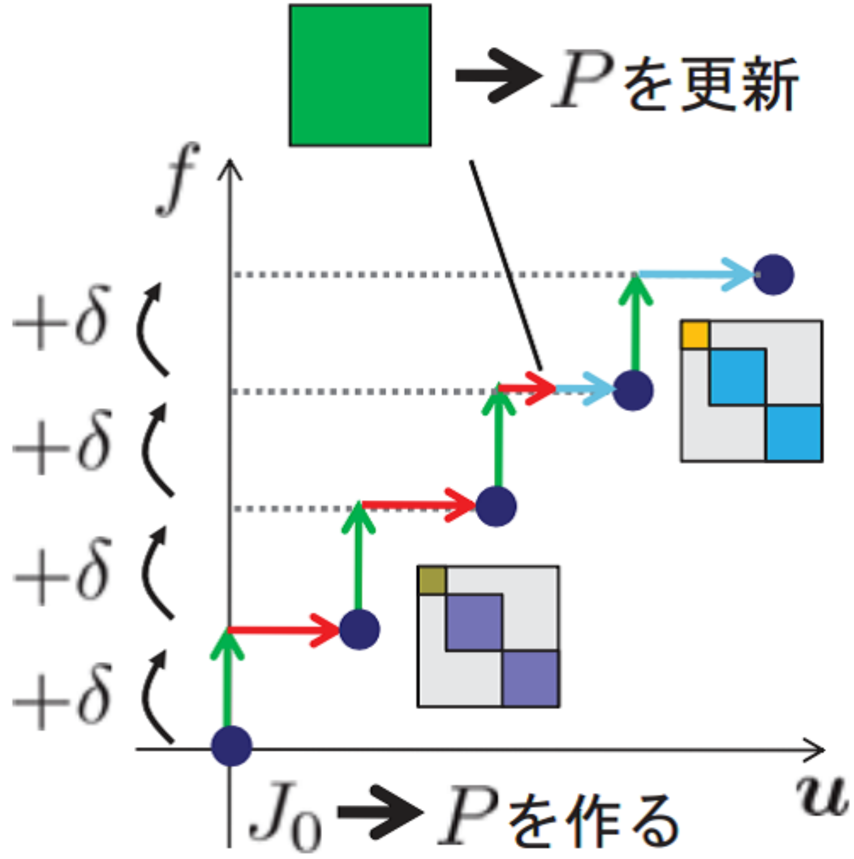
計算の
- 効率化
- 高精度化

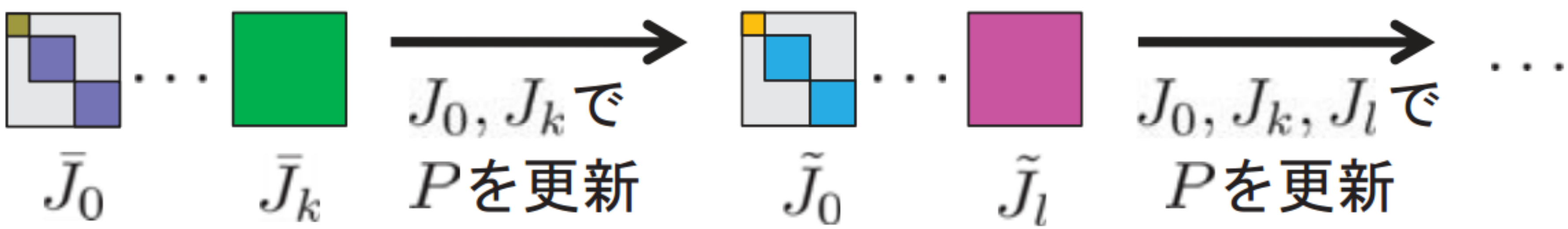
# 行列 * 代数を用いた釣合経路追跡法

Step 1: **直交行列 $P$ の初期化**

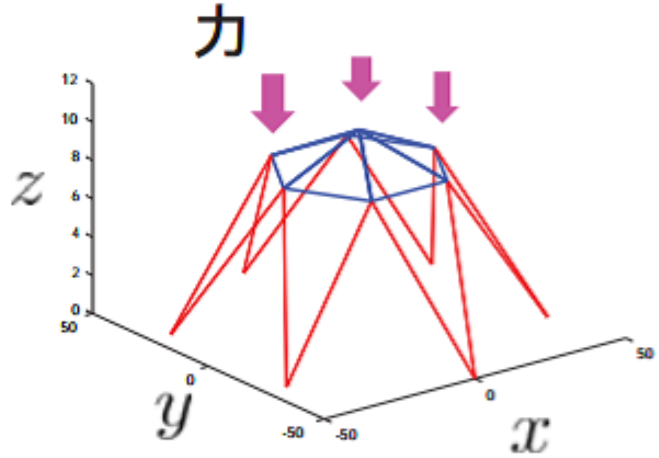
Step 2: **$P$ を用いて**
**ブロック対角化しながら**
**釣合経路を追跡**

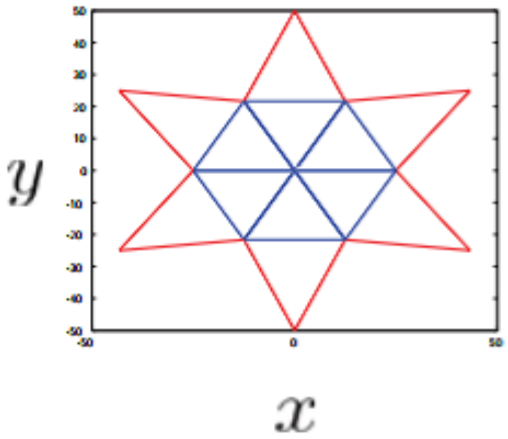
Step 3: **ブロック構造が壊れたら**
MM **アルゴリズムで**
**$P$ を更新**

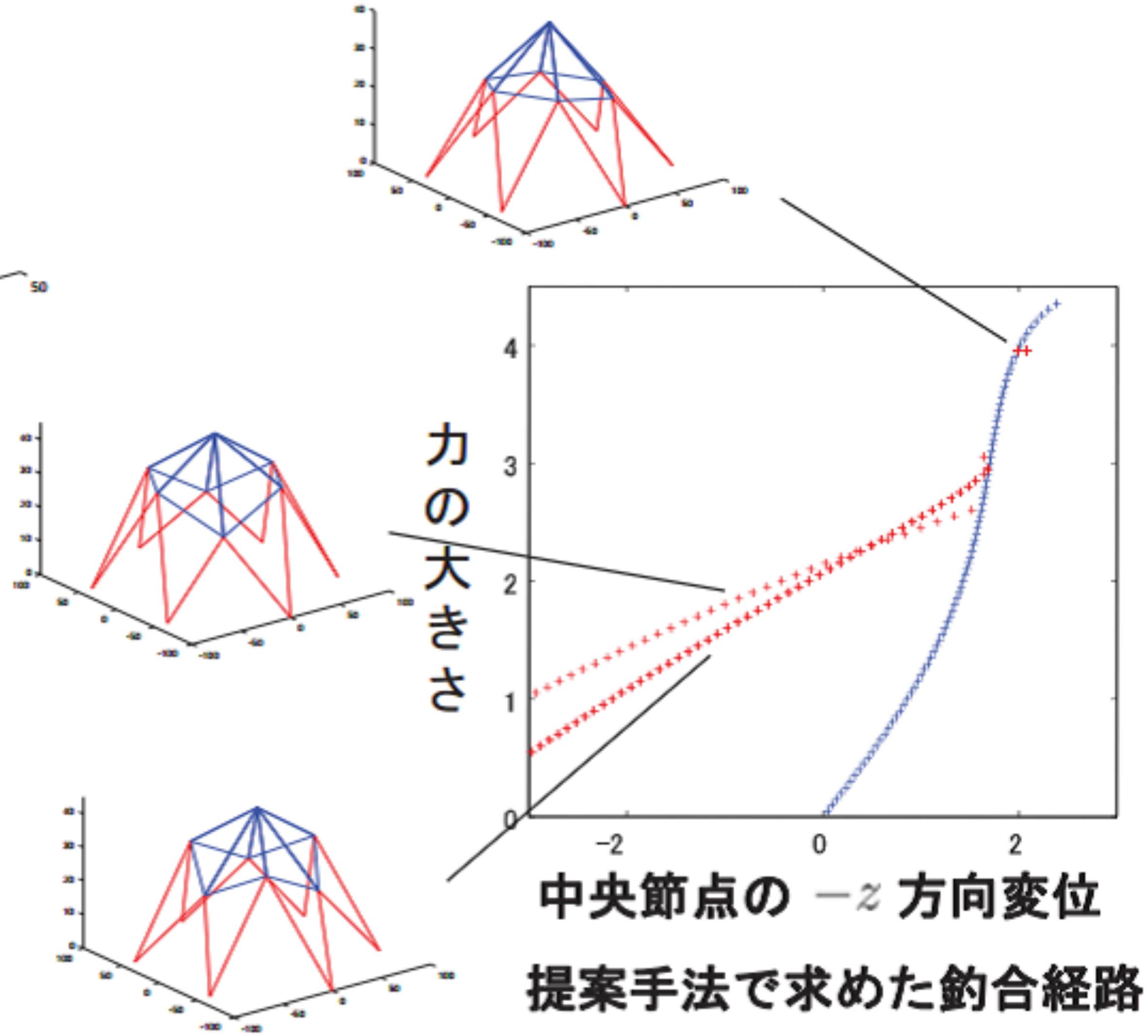


# 数値実験：正六角形トラスドーム



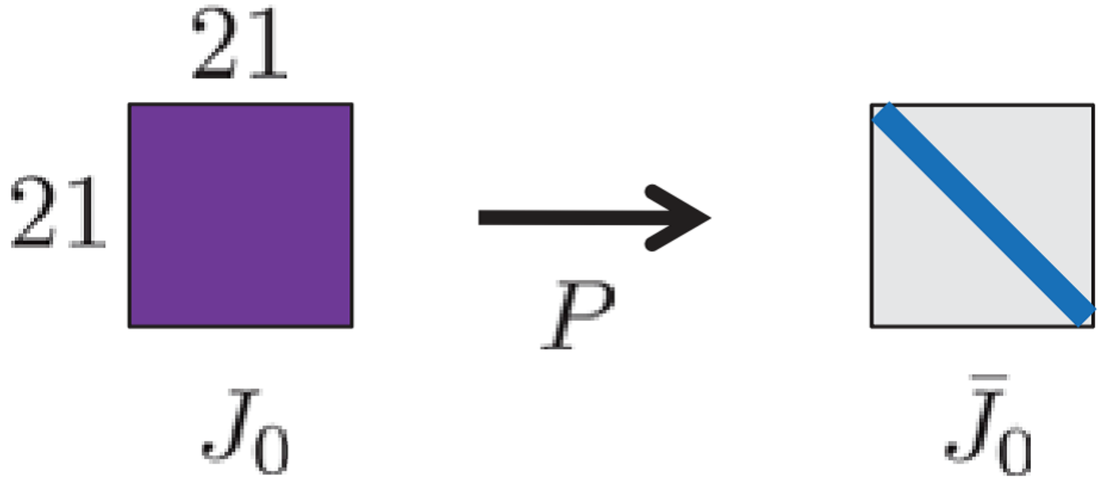



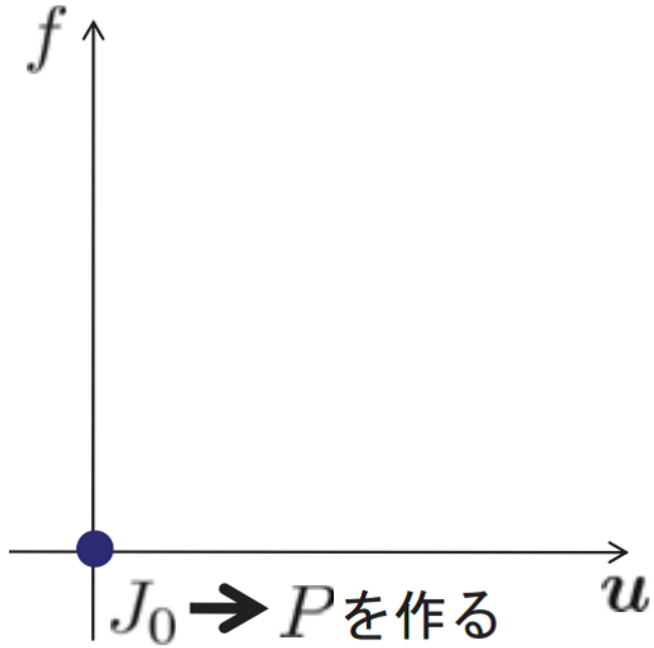

提案手法で求めた釣合経路

# 数値実験：直交行列の更新の様子

Step 1: **直交行列 $P$ の初期化**

**最初の点でのヤコビ行列を対角化**

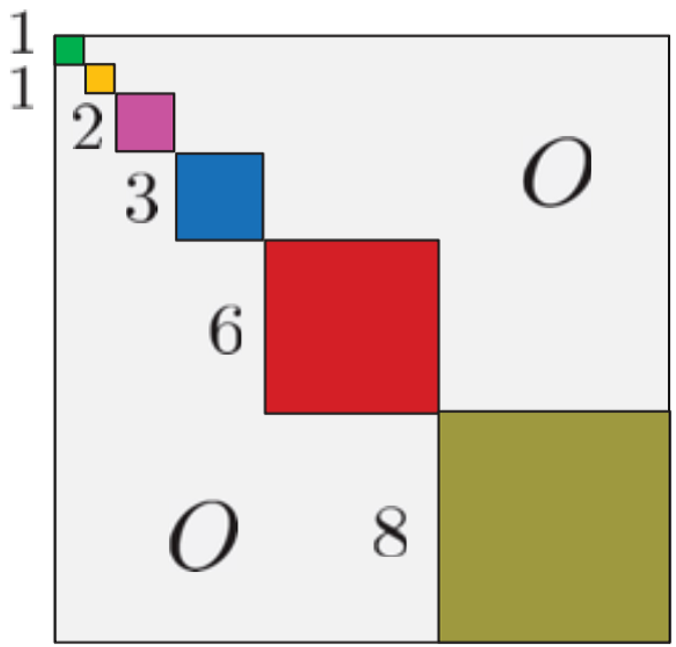


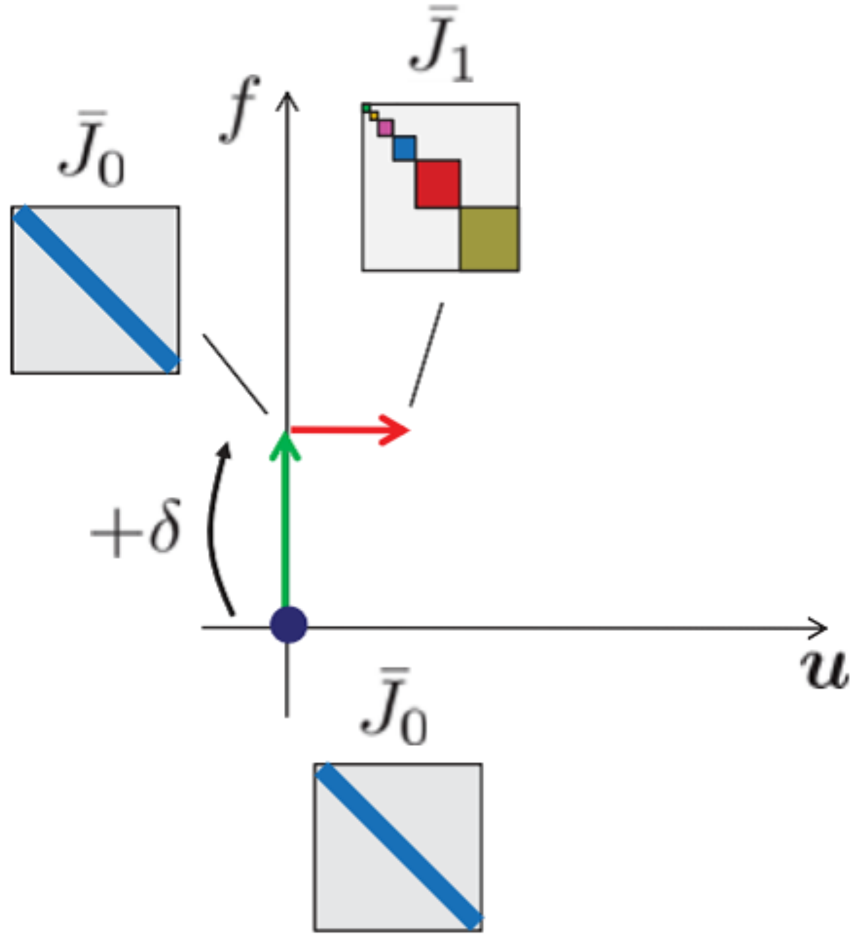



# 数値実験：直交行列の更新の様子

Step 2: $P$を用いて
**ブロック対角化**しながら
釣合経路を追跡

$\bar{J}_1 =$

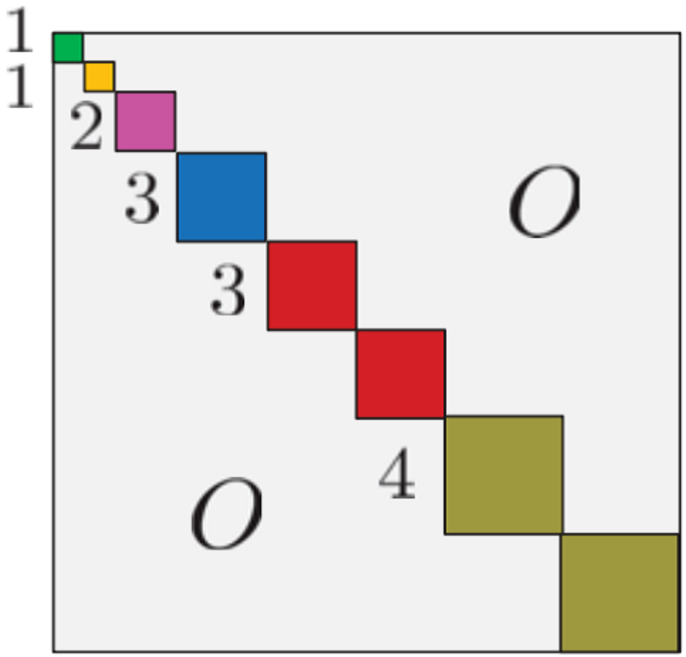


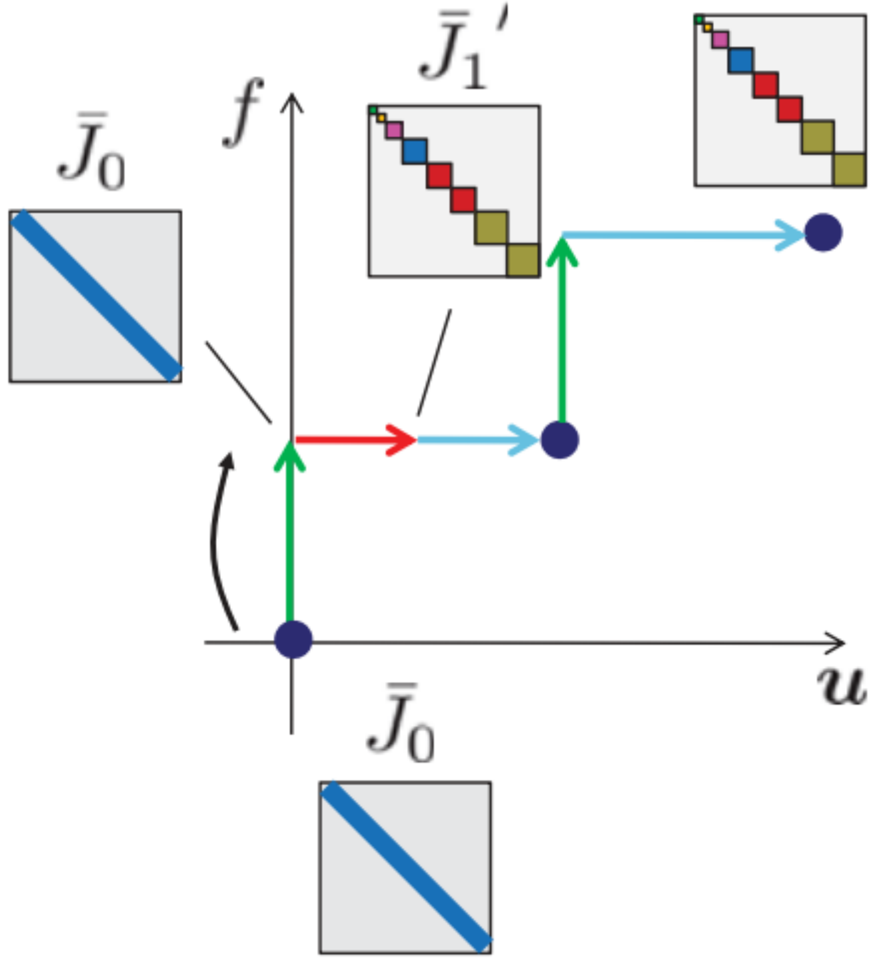



## 数値実験：直交行列の更新の様子

Step 3: **ブロック構造が壊れたら**
**MM アルゴリズムで**
**$P$ を更新**

$\bar{J}_1' =$



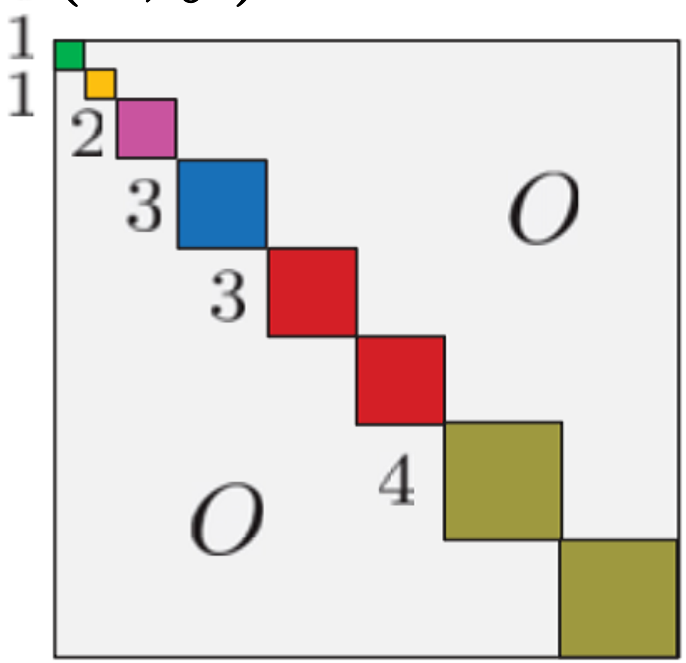



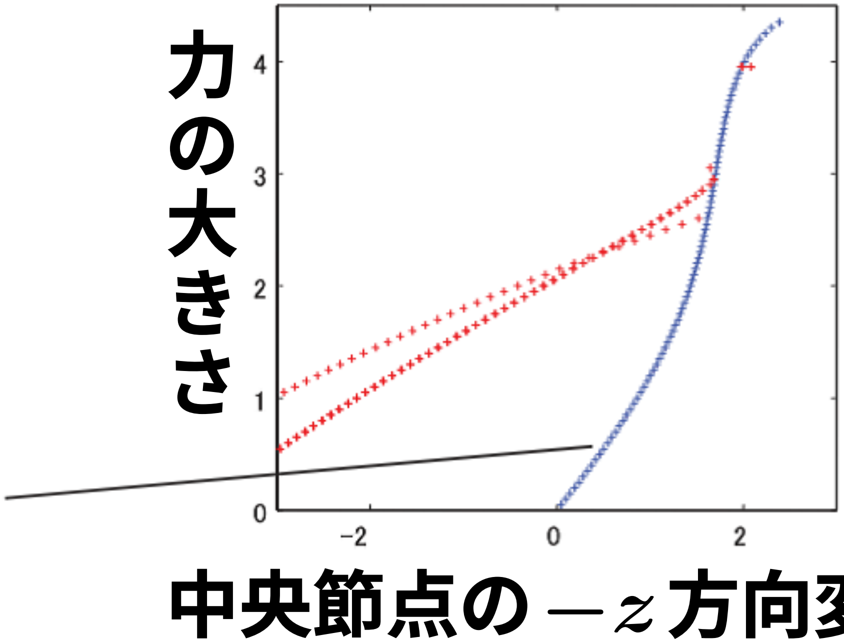

**$J_1$ 以降 Step 3 は実行されなかった**

# 数値実験：結果

- 釣合経路を求めることができた
  （計算時間はあまり変わらなかった）
- 群の表現論による手法と同じブロック構造が得られた
- MM アルゴリズムの実行回数はほとんどの場合で２回

$$P^\top J(u,f)P =$$




提案手法で求めた釣合経路

# 生成元の個数

Aiura-Kakimura-Murota (LAA 2012)

- **対称行列で R上の＊代数を生成**
- **既約成分の３つの型：　実型$\mathcal{M}_n$, 複素型$\mathcal{C}_n$, 四元型$\mathcal{H}_n$**

| | $n=1$ | $n=2$ | $n=3$ | $n\geq 4$ |
|---|---|---|---|---|
| $\mathcal{M}_n$ | 1 | 2 | | |
| $\mathcal{C}_n$ | — | 3 | 2 | |
| $\mathcal{H}_n$ | — | 4 | 3 | 2 |

**任意の＊代数は４つの対称行列で生成できる**
**（ランダムに選べばよい）**

**正六角形ドームは実型しかもたないので，2個で済んだ**

# 応用２：誤差推定と構造抽出

前原・室田(2010)

# 一般的な問題設定

数値データ　$\overset{\text{抽出}}{\Longrightarrow}$　構造情報

$\Uparrow$ 混入

数値誤差
（観測誤差・計算誤差）

基本的な問題

- 抽出手法
- 誤差の推定
- 誤差の除去

本質的な構造
＝○○対称性

# 問題の定式化

入力：$n \times n$ 実行列 $\tilde{A}_1, \ldots . \tilde{A}_N$

$$\tilde{A}_k = \underbrace{A_k}_{\text{真の行列}} + \underbrace{W_k}_{\text{誤差}}$$

（対称性を持つ）　（$A_k$, $W_k$ は未知）

入力行列 $\tilde{A}_k$ から**誤差成分 $W_k$** の大きさを推定

---

イメージ（構造物の解析）：

入力 $\tilde{A}_k$ ＝ 実際に測定したデータ

真の行列 $A_k$ ＝ 設計書の公称データ（手元に無い）

**誤差成分 $W_k$** ＝ 測定誤差・部品の製造誤差，数%程度

# 「対称性をもっている」ことの定式化

**真の行列** $A_1, \ldots, A_N$ **は対称性を持つ**

$$\Leftrightarrow \exists \boldsymbol{P} \neq \{I, -I\} \in O(n) \text{ s.t. } \boldsymbol{P}^\top A_k \boldsymbol{P} = A_k \ (\forall k)$$

$$\Leftrightarrow \exists \boldsymbol{X} \neq \alpha I \text{ s.t. } A_k \boldsymbol{X} = \boldsymbol{X} A_k,\ A_k^\top \boldsymbol{X} = \boldsymbol{X} A_k^\top$$

$$\Leftrightarrow \exists \boldsymbol{X} \neq \alpha I \text{ s.t. } T_k \mathrm{vec}(\boldsymbol{X}) = 0,\ T_k^\top \mathrm{vec}(\boldsymbol{X}) = 0$$

**記号：** $\mathrm{vec}(A_k \boldsymbol{X} - \boldsymbol{X} A_k) =: T_k \ \mathrm{vec}(\boldsymbol{X})$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\left(\frac{1}{N}\sum_k T_k T_k^\top + T_k^\top T_k\right)}_{S} \mathrm{vec}(X) = 0$$

- $S$ **は** $n^2 \times n^2$ **半正定値対称行列（固有値** $\geq 0$**）**
- $S$ **のゼロ固有値の数** $= \dim\{X : A_k X = X A_k \ \forall k\}$

# 誤差推定の方法（誤差による $S$ の変化）

$$S = \frac{1}{N}\sum_k (T_k T_k^\top + T_k^\top T_k) \qquad \leftarrow \text{真の値}$$

$$\tilde{S} = \frac{1}{N}\sum_k (\tilde{T}_k \tilde{T}_k^\top + \tilde{T}_k^\top \tilde{T}_k) \qquad \leftarrow \text{誤差有}$$

**命題** $\tilde{A}_k = A_k + W_k, \quad W_k \sim N(0, \sigma^2)$ のとき

$$\tilde{S} \sim S + 4n\sigma^2 \left(I - ee^\top\right) \qquad e = \mathrm{vec}(I)$$

$S$ のゼロ固有ベクトル $u \quad (u \perp e)$

$$\frac{u^\top \tilde{S} u}{u^\top u} \sim 4n\sigma^2 \implies \sigma \sim \sqrt{\frac{\tilde{S}\text{の小さな固有値}}{4n}}$$

# 誤差推定アルゴリズム

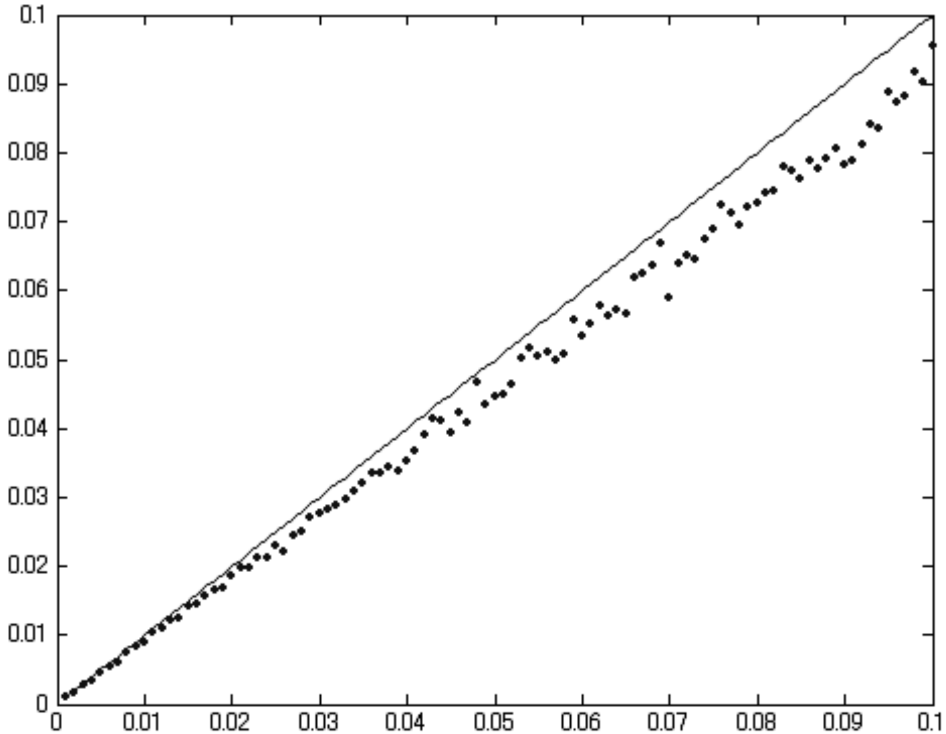
(1) $\tilde{S}$ の **下から２番目の固有値 $\lambda$** を逆反復＋CG法 で計算

(2) $\sqrt{\lambda/4n}$ を推定誤差として出力

計算量：$O(Nn^3) \times$ 反復回数

（反復回数は問題依存．実験では高々数十回）

# 数値実験：テスト問題




**入力：$4 \times 4 + 8 \times 8$に分解可能行列**

**（ほかの入力でもほぼ同じ結果）**

# 参考文献

[1] K. Murota, Y. Kanno, M. Kojima and S. Kojima: A numerical algorithm for block-diagonal decomposition of matrix $*$-algebras with application to semidefinite programming, JJIAM, 27 (2010), 125–160.
[2] T. Maehara and K. Murota: A numerical algorithm for block-diagonal decomposition of matrix $*$-algebras with general irreducible components, JJIAM, 27 (2010), 263–293.
[3] T. Maehara and K. Murota: Algorithm for error-controlled simultaneous block-diagonalization of matrices, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 32 (2011), 605–620.
[4] D. Aiura, N. Kakimura, and K. Murota: On the number of matrices to generate a matrix $*$-algebra over the real field, Linear Algebra Appl., http://dx.doi.org/10.1016/j.laa.2012.08.022