数式処理 *J.JSSAC (2003)*
Vol. 9, No. 4, pp. 68 - 70

ショートレター

対称行列の半正定値性の条件について

村上 弘*

東京都立短期大学

(Received 2002/12/27　　Revised 2003/2/26)

Abstract

In this note, for the symmetric matrix A of size n, the semi-positive definite condition is derived from the positive definite condition. The number of deteminant expressions to be generated can be reduced to n rather than 2^n in exchange with the penalty of adding one formal variable. This approach could be suited for the QEP (quantifier elimination problems) in case the semi-positive definite condition of the matrix is treated.

命題 1

A を n-次の対称行列とする。以下の議論では 対称が「実対称」でも「*Hermite* 対称」でもまったく同様に扱える。n-次の単位行列 E と、A に含まれない実数の独立変数である ε とを用いて新たな行列 $B(\varepsilon) \equiv A + \varepsilon E$ を作る。このとき行列 A が半正定値であることと、正数 $\varepsilon > 0$ を任意に小とするとき行列 $B(\varepsilon)$ が正定値であることは同値になる。*(証明省略)* これにより対称行列 A の半正定値性の条件を対称行列 $B(\varepsilon)$ の正定値性の条件に帰着できる。

以下 A の行列要素は有界な値をとる数式 (多変数の多項式など) とする。

定理 2

n-次の対称行列 B が正定値であるための必要十分条件は、行列 B の k-次の首座小行列式 *(行と列を 1 から k までに制限した小行列式)* が全ての $k(k = 1, \cdots, n)$ に対して正であることである。*(証明省略：線形代数の教科書 (例えば [1]) を参照。)*

この定理により、各 $k(k = 1, 2, \cdots, n)$ について、$B(\varepsilon)$ から k-次の首座小行列式 $D^{(k)}(\varepsilon)$ が数式として求められているとするとき、任意の正数 ε に対して、$D^{(k)}(\varepsilon) > 0$ が全ての k について成立することが行列 A が半正定値である為の必要十分条件である。さらに、人為変数 ε が正の無限小とみなせることを利用し、ε を消去した形の条件を導くことにする。

*murakami@tmca.ac.jp

記法 1

行列式の性質から $D^{(k)}(\varepsilon)$ は 主係数が 1 である ε の k-次多項式である。$(k-m)$-次の係数を $\alpha_m^{(k)}$ と置いて、$D^{(k)}(\varepsilon)$ を昇巾順に展開する: $D^{(k)}(\varepsilon) \equiv \sum_{m=0}^{k} \alpha_{k-m}^{(k)} \varepsilon^m$, 但し $\alpha_0^{(k)} = 1$.

定理 3

任意に小さな正数 ε に対して、条件 $D^{(k)}(\varepsilon) > 0$ が成り立つかどうかの判定は、上記定義における係数の列: $\alpha_k^{(k)}, \alpha_{k-1}^{(k)}, \cdots, \alpha_0^{(k)}$ を左から順に調べて、最初の非零の値が正なら成立、負なら不成立となる。(証明省略) 列の最後が 1 だから非零の値は必ず存在することに注意。

定義 4

m 個の実変数 $\gamma_j (j = 1, \cdots, m)$ に関する論理式の列 $M^{(m)}(m \geq 0)$ を帰納的に定義する。:

$$
\begin{array}{lll}
m = 0 & \Rightarrow & M^{(0)}() \equiv \text{true}, \\
m > 0 & \Rightarrow & M^{(k)}(\gamma_m, \gamma_{m-1}, \cdots, \gamma_1) \equiv \gamma_m > 0 \vee (\gamma_m = 0 \wedge M^{(m-1)}(\gamma_{m-1}, \gamma_{m-2}, \cdots, \gamma_1)).
\end{array}
$$

この定義を用いれば、前定理中で、$\alpha_k^{(k)}, \cdots, \alpha_0^{(k)}$ の最初に現れる非零の値が正である、という条件は、論理式 $M^{(k)}(\alpha_k^{(k)}, \alpha_{k-1}^{(k)}, \cdots, \alpha_1^{(k)})$ の値が真である、と同値になる。

例として $M^{(m)}(m \geq 1)$ の最初の三個を書いてみる。:

$$
\begin{array}{lll}
M^{(1)}(\gamma_1) & \equiv & \gamma_1 \geq 0, \\
M^{(2)}(\gamma_2, \gamma_1) & \equiv & \gamma_2 > 0 \vee (\gamma_2 = 0 \wedge \gamma_1 \geq 0), \\
M^{(3)}(\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1) & \equiv & \gamma_3 > 0 \vee (\gamma_3 = 0 \wedge (\gamma_2 > 0 \vee (\gamma_2 = 0 \wedge (\gamma_1 \geq 0)))).
\end{array}
$$

注意 1 (考察)

応用上の考察をしてみよう。人為変数 ε を追加するので行列式計算の手間が増加する点が不利であるが、全部で n 個の首座小行列式だけに基づいて、半正定値性の判定や必要十分条件の式の導出を行える。あるいは ε の次数によって $\alpha_m^{(k)}$ に分解したと考えても式の総数は $n(n+1)/2$ 個である。そのため、半正定値問題を *QEP* として考えるとき、行列の次数 n が大きい場合に、単純に $\{1, 2, \cdots, n\}$ の冪集合に対応した 2^n 個の小行列式を先に全て求める方法に比べ、本方法は計算量や途中の記憶資源の要求が少ない利点があると思われる。

但し、後につづく生成された連立不等式の解法は困難であり、逆に 2^n 個の中に含まれるより多くの単純な不等式も利用できた方が便利な場合もあるだろう。(たとえば一番最後の対角要素が負なら、半正定値性が成立しないことは明白だが、本方法に忠実に左上から首座小行列式を順に計算していく場合に得られる連立不等式の論理式からは、それは自明ではない。) どのような方法であれ式を要素とする首座小行列式の計算は行列の次数が高ければ困難を極めるので、現実的には変数の少ない多項式か、変数が含まれている要素が疎な行列、変数への値代入後の行列などでないと、大きな n に対しては結局計算量の点で破綻し、現実の処理が不可能であろう。

問題 1 (例題)

実対称行列 A の要素が一般元 $x_{ij}(= x_{ji})$ により与えられているとするとき、A が半正定値である条件を要素の式で書き下そう。

まず、$B(\varepsilon)=A+\varepsilon E$ の首座小行列式の最初の三個は:

$$\begin{aligned}
D^{(1)} &= \det\begin{pmatrix} x_{11}+\varepsilon \end{pmatrix} = x_{11}+\varepsilon,\\
D^{(2)} &= \det\begin{pmatrix} x_{11}+\varepsilon & x_{12}\\ x_{12} & x_{22}+\varepsilon \end{pmatrix} = x_{11}x_{22}-x_{12}^2+(x_{11}+x_{22})\varepsilon+\varepsilon^2,\\
D^{(3)} &= \det\begin{pmatrix} x_{11}+\varepsilon & x_{12} & x_{13}\\ x_{12} & x_{22}+\varepsilon & x_{23}\\ x_{13} & x_{23} & x_{33}+\varepsilon \end{pmatrix}\\
&= x_{11}x_{22}x_{33}+2x_{12}x_{23}x_{31}-x_{11}x_{23}^2-x_{22}x_{13}^2-x_{33}x_{12}^2\\
&\quad +(x_{11}x_{22}+x_{22}x_{33}+x_{33}x_{11}-x_{12}^2-x_{23}^2-x_{13}^2)\varepsilon+(x_{11}+x_{22}+x_{33})\varepsilon^2+\varepsilon^3.
\end{aligned}$$

これらから ε に関しての係数を求めると (主係数は省略する):

$$\begin{aligned}
\alpha_1^{(1)} &= x_{11},\\
\alpha_2^{(2)} &= x_{11}x_{22}-x_{12}^2,\\
\alpha_1^{(2)} &= x_{11}+x_{22},\\
\alpha_3^{(3)} &= x_{11}x_{22}x_{33}+2x_{12}x_{23}x_{13}-x_{11}x_{23}^2-x_{22}x_{13}^2-x_{33}x_{12}^2,\\
\alpha_2^{(3)} &= x_{11}x_{22}+x_{22}x_{33}+x_{33}x_{11}-x_{12}^2-x_{23}^2-x_{13}^2,\\
\alpha_1^{(3)} &= x_{11}+x_{22}+x_{33},
\end{aligned}$$

いま n-次の実対称行列 A が半正定値である為の n 個の条件:

$$M^{(1)}(\alpha_1^{(1)}),\quad M^{(2)}(\alpha_2^{(2)},\alpha_1^{(2)}),\quad M^{(3)}(\alpha_3^{(3)},\alpha_2^{(3)},\alpha_1^{(3)}),\quad \cdots,\quad M^{(n)}(\alpha_n^{(n)},\cdots,\alpha_1^{(3)})$$

のうち最初の三個の条件:

$$\begin{aligned}
M^{(1)} \equiv&\quad \alpha_1^{(1)}\geq 0,\\
M^{(2)} \equiv&\quad \alpha_2^{(2)}>0\vee(\alpha_2^{(2)}=0\wedge\alpha_1^{(2)}\geq 0),\\
M^{(3)} \equiv&\quad \alpha_3^{(3)}>0\vee(\alpha_3^{(3)}=0\wedge(\alpha_2^{(3)}>0\vee(\alpha_2^{(3)}=0\wedge\alpha_1^{(3)}\geq 0)))
\end{aligned}$$

を行列要素を用いて書くと:

$$\begin{aligned}
M^{(1)} \equiv&\quad x_{11}\geq 0,\\
M^{(2)} \equiv&\quad x_{11}x_{22}-x_{12}^2>0\vee(x_{11}x_{22}-x_{12}^2=0\wedge x_{11}+x_{22}\geq 0),\\
M^{(3)} \equiv&\quad x_{11}x_{22}x_{33}+2x_{12}x_{23}x_{13}-x_{11}x_{23}^2-x_{22}x_{13}^2-x_{33}x_{12}^2>0\\
&\quad \vee(x_{11}x_{22}x_{33}+2x_{12}x_{23}x_{13}-x_{11}x_{23}^2-x_{22}x_{13}^2-x_{33}x_{12}^2=0\\
&\quad \wedge(x_{11}x_{22}+x_{22}x_{33}+x_{33}x_{11}-x_{12}^2-x_{23}^2-x_{13}^2>0\\
&\quad \vee(x_{11}x_{22}+x_{22}x_{33}+x_{33}x_{11}-x_{12}^2-x_{23}^2-x_{13}^2=0\\
&\quad \wedge x_{11}+x_{22}+x_{33}\geq 0)))
\end{aligned}$$

となる。次数 n が 3 なら、A が半正定値であることと上の三条件が全て成立が同値になる。

参 考 文 献

[1] 伊理正夫:線形代数 II(基礎 I), 岩波講座応用数学、岩波書店、東京,1994. (§2.5,137 頁)