CAT(0)空間上のアルゴリズムと最適化について

平井広志
東京大学大学院 情報理工学系研究科
数理情報学専攻
JST, PRESTO
hirai@mist.i.u-tokyo.ac.jp

談話会
大阪大学　２０２１年１０月２５日(月)

自己紹介：平井 広志

2004年:　東京大学大学院 情報理工学系研究科
　数理情報学専攻修士課程 修了（指導教員：室田一雄教授）

2004年～2010年:　京都大学数理解析研究所 助教

2009年:　博士(理学)(京都大学) 取得

2010年～2014年:　東京大学大学院 情報理工学系研究科
　数理情報学専攻　講師

2014年～現在:　同　准教授

専門分野：最適化，アルゴリズム，離散数学

最近やってること：

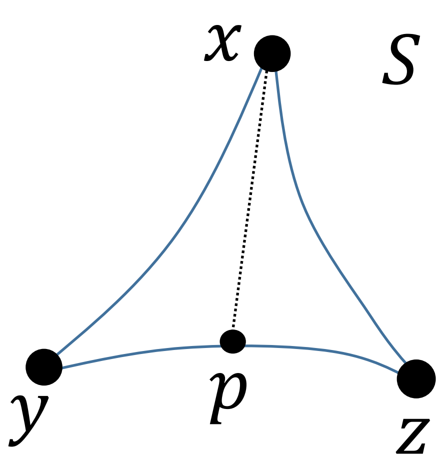
ユークリッド空間 $\mathbb{R}^n$ を超える，非正曲率な空間の凸性に基づく
新しい連続・離散最適化理論への挑戦

JSTさきがけ 「新しい凸性に基づくアルゴリズムと最適化理論」（2019～2023）

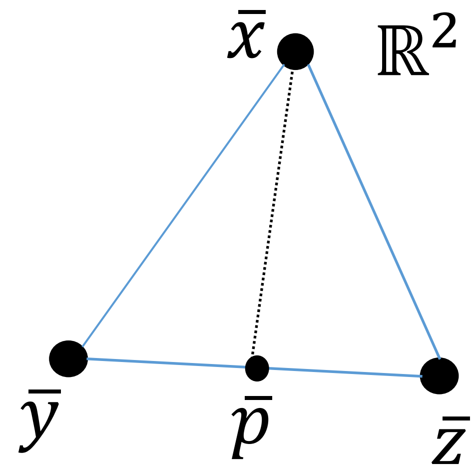
Cartan-Alexandrov-Toponogov　　curvature ≤ 0

CAT(0)空間 Gromov 1987

$\Leftrightarrow$ 測地的距離空間 (S, d) であって
すべての３角形が「痩せている」



$$d(x,p) \leq \|\bar{x} - \bar{p}\|_2$$



$$d(x,y) = \|\bar{x} - \bar{y}\|_2$$
$$d(y,z) = \|\bar{y} - \bar{z}\|_2$$
$$d(z,x) = \|\bar{z} - \bar{x}\|_2$$

事実：CAT(0)空間は一意測地的

CAT(0)空間の例：ユークリッド空間，ツリー，双曲空間，

非コンパクト型対称空間，ユークリッド的ビルディング etc

純粋数学では，幾何学的群論という分野で重要らしい．

ここでは：

CAT(0)空間によるモデリングや，いくつかの結果を

アルゴリズム・最適化理論の立場から紹介する．

内容

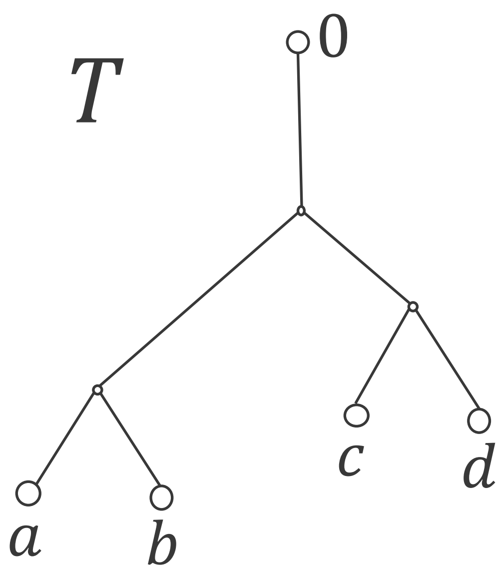
- 系統樹空間と測地線問題
- 組合せ的対象から定義されるCAT(0)空間

  メディアングラフとCAT(0)立方複体

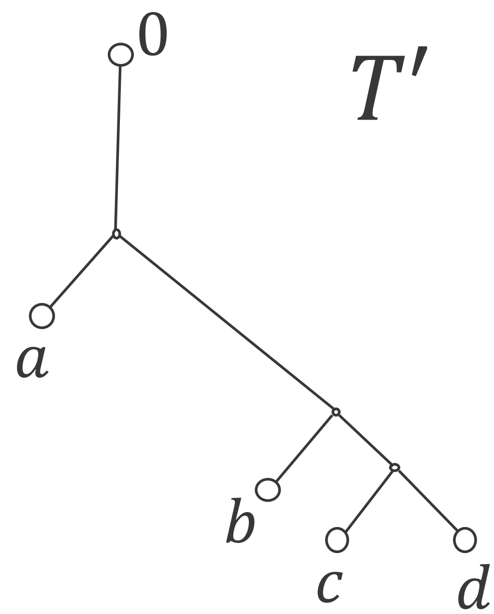
  束・半束に対するオーソスキーム複体
- CAT(0)空間上の凸最適化

  非可換ランク計算への応用

系統樹



$d(T, T')$?



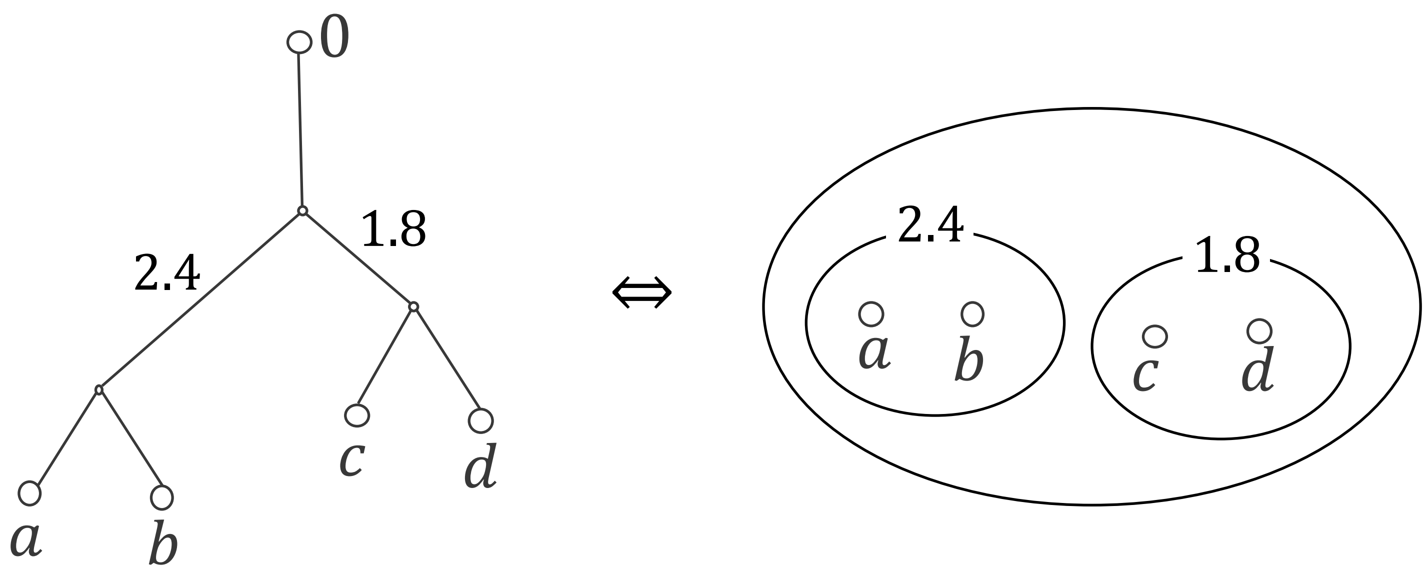
２つの系統樹の「距離」を測りたい

連続量：枝長(進化距離)　v.s.　離散量：木のトポロジー

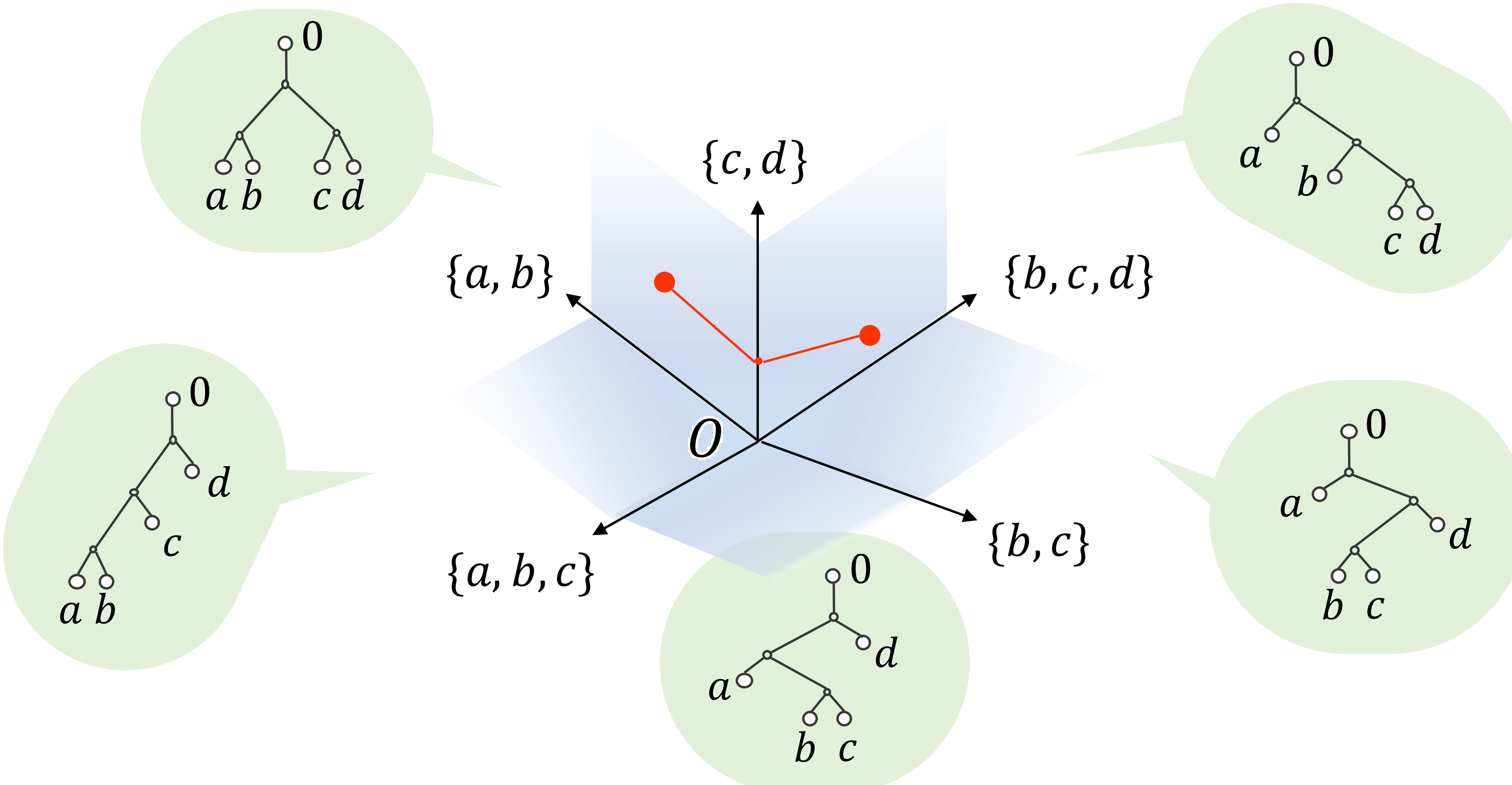
系統樹空間 Billera-Holmes-Vogtman 2001

X: 種の集合， $|X| = n$

系統樹 $T \Leftrightarrow$ $T: 2^X \to \mathbb{R}_+$ s.t. $\mathrm{supp}(T)$がラミナー



系統樹空間 $\mathcal{T} \coloneqq \{T: 2^X \to \mathbb{R}_+ \mid \mathrm{supp}(T)$がラミナー$\}$

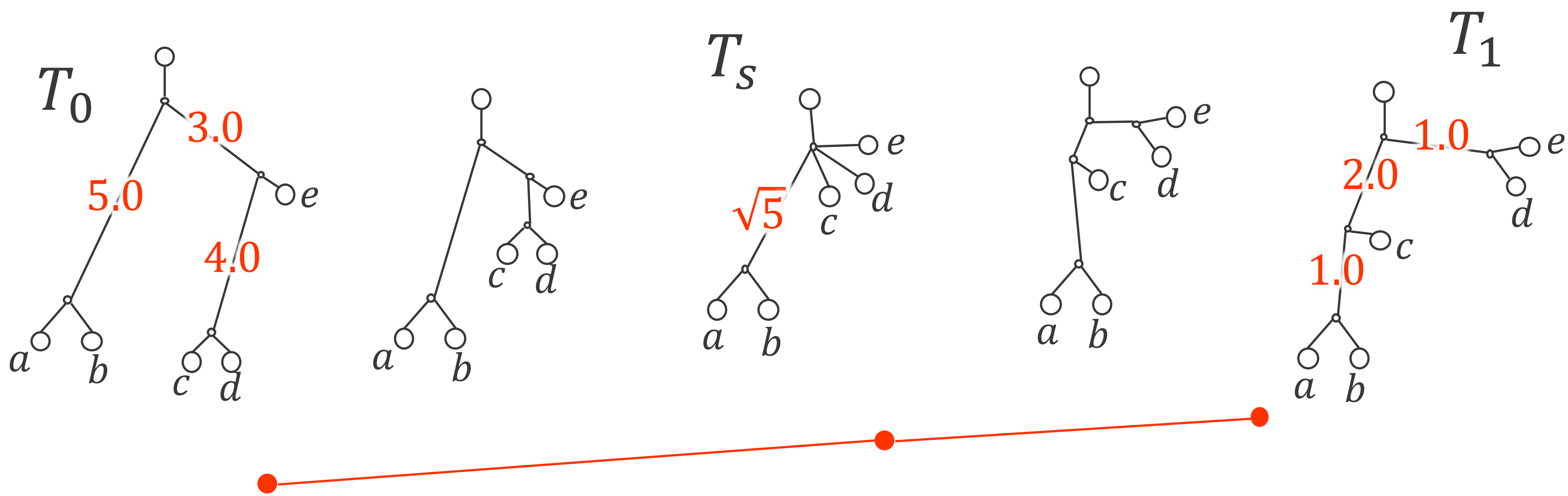


- 系統樹空間は，ラミナー族に対応する非負象限の貼り合せ.
- 系統樹空間 $\mathcal{T} \subset {\mathbb{R}_+}^{2^X}$ は凸集合ではない.
- パスの長さを各象限でユークリッド距離ではかる.

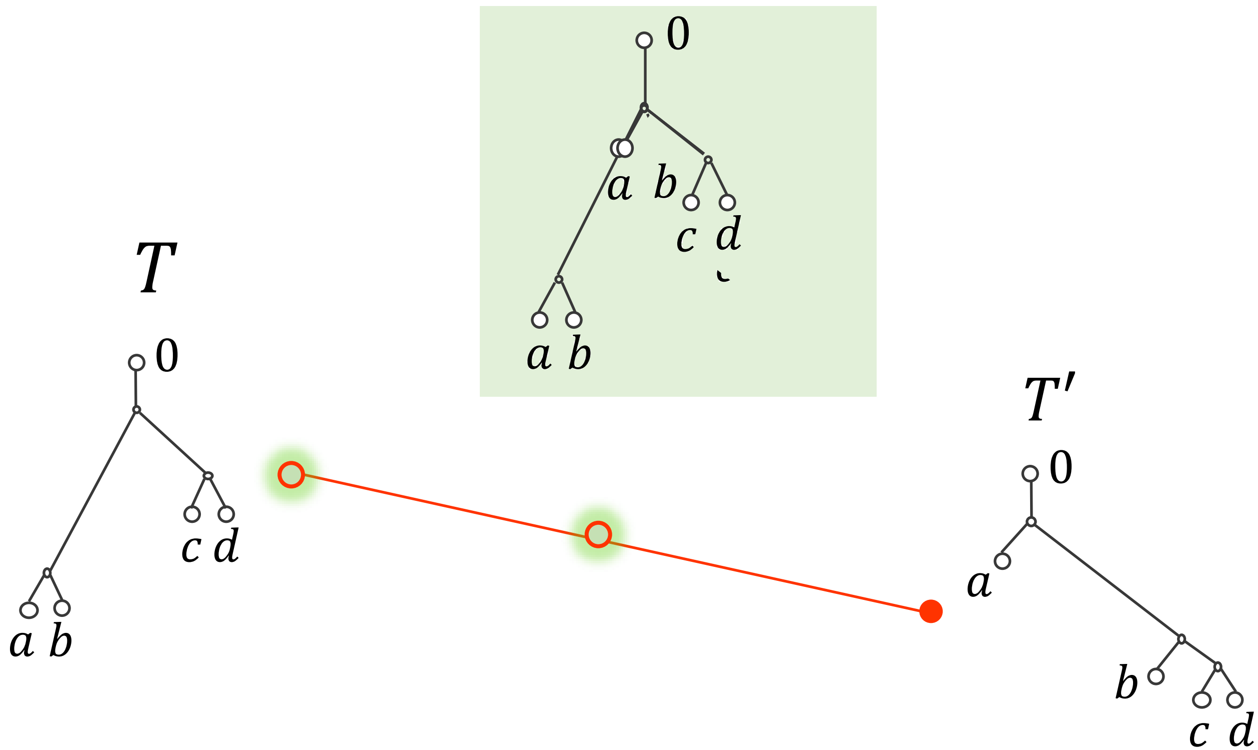
系統樹 T, T' の距離　　$$d(T, T') := \inf_{\substack{P:[0,1]\to\mathcal{T} \\ P(0)=T,\, P(1)=T'}} d(P)$$

定理 Billera-Holmes-Vogtman 2001

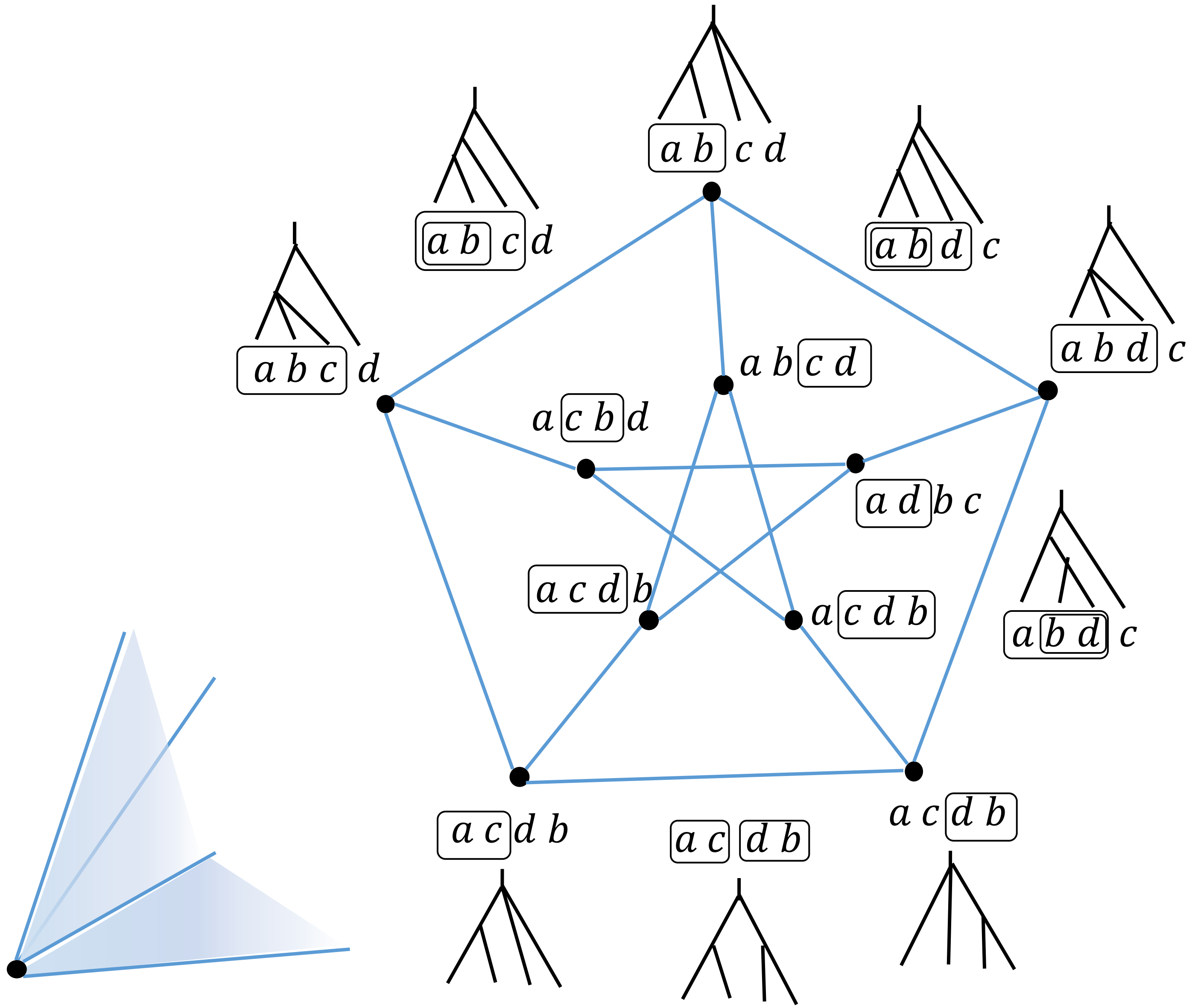
系統樹空間$(\mathcal{T}, d)$はCAT(0)である.



$$s = \frac{5-\sqrt{5}}{4} \approx 0.69$$


0
a b
c d
a b
T
0
c d
a b
T′
0
a
b
c d

4 点 $S = \{a, b, c, d\}$上の系統樹空間の断面



測地線問題：

2 つの系統樹を結ぶ一意な測地線は求めよ.

定理 Owen 2011, Owen-Provan 2011

系統樹空間上の測地線問題は$O(n^4)$時間で解ける.

Owen-Provanのアルゴリズムの概略

- 系統樹空間は，非負象限$\mathbb{R}_+^n$を貼り合わせた複体である．
- 「良い部分複体」が定義でき，その中の測地線は陽に書ける．
- 測地線は，ある「良い部分複体」に含まれる．
- 最も長さの短い測地線を持つ「良い部分複体」を求める問題

  → ２部グラフ上のパラメトリック重み付き最大安定集合問題
- Miller-Owen-Provan 2015: CAT(0)象限空間への拡張

内容

- 系統樹空間と測地線問題
- 組合せ的対象から定義されるCAT(0)空間

  メディアングラフとCAT(0)立方複体

  束・半束に対するオーソスキーム複体
- CAT(0)空間上の凸最適化

  非可換ランク計算への応用

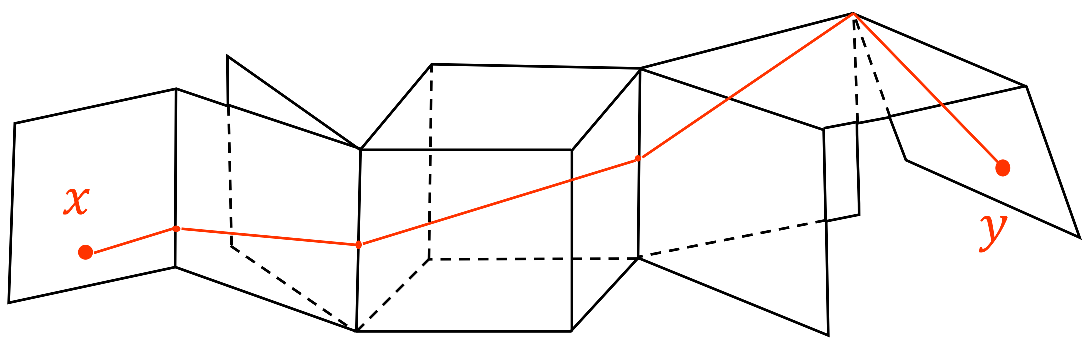
CAT(0)立方複体

立方複体：いくつかのキューブ$[0,1]^n$の貼り合せ

パスの長さ：各キューブで測る.

２点x, yの距離 $d(x,y) \coloneqq \inf\{\, d(P) \mid P \text{ connects } x, y\}$

$[0,1]^2 \simeq$



$\simeq$

$[0,1]^3$

注：この立方複体はCAT(0)でない.

CAT(0)立方複体の組合せ的特徴付け

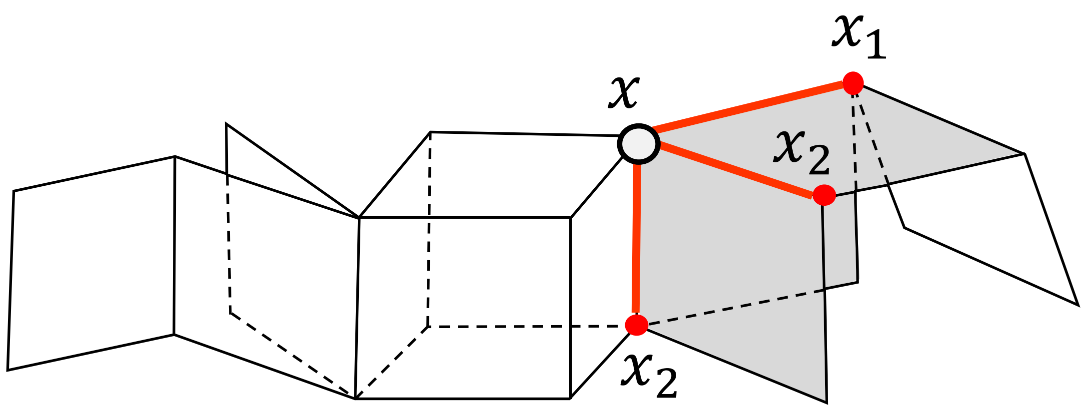
定理 Gromov 1987

立方複体がCAT(0)

$\Leftrightarrow$ 単連結 & 各頂点 x のリンクがフラッグ

xと隣接頂点$x_1, x_2, \ldots, x_k$を含むキューブが存在

$\Leftrightarrow$ x, x_i, x_jを含むキューブが存在$(\forall i, j)$

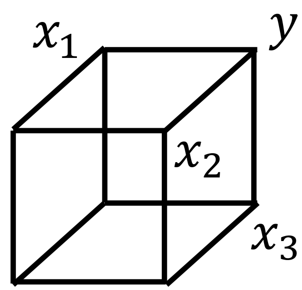


CAT(0)でない

CAT(0)立方複体のグラフ的特徴付け

メディアングラフ G:　$\forall x_1, x_2, x_3 \in V(G), \overset{\text{一意}}{\exists y} \in V(G)$

$$d_G(x_i, x_j) = d_G(x_i, y) + d_G(y, x_j)$$



メディアングラフでない

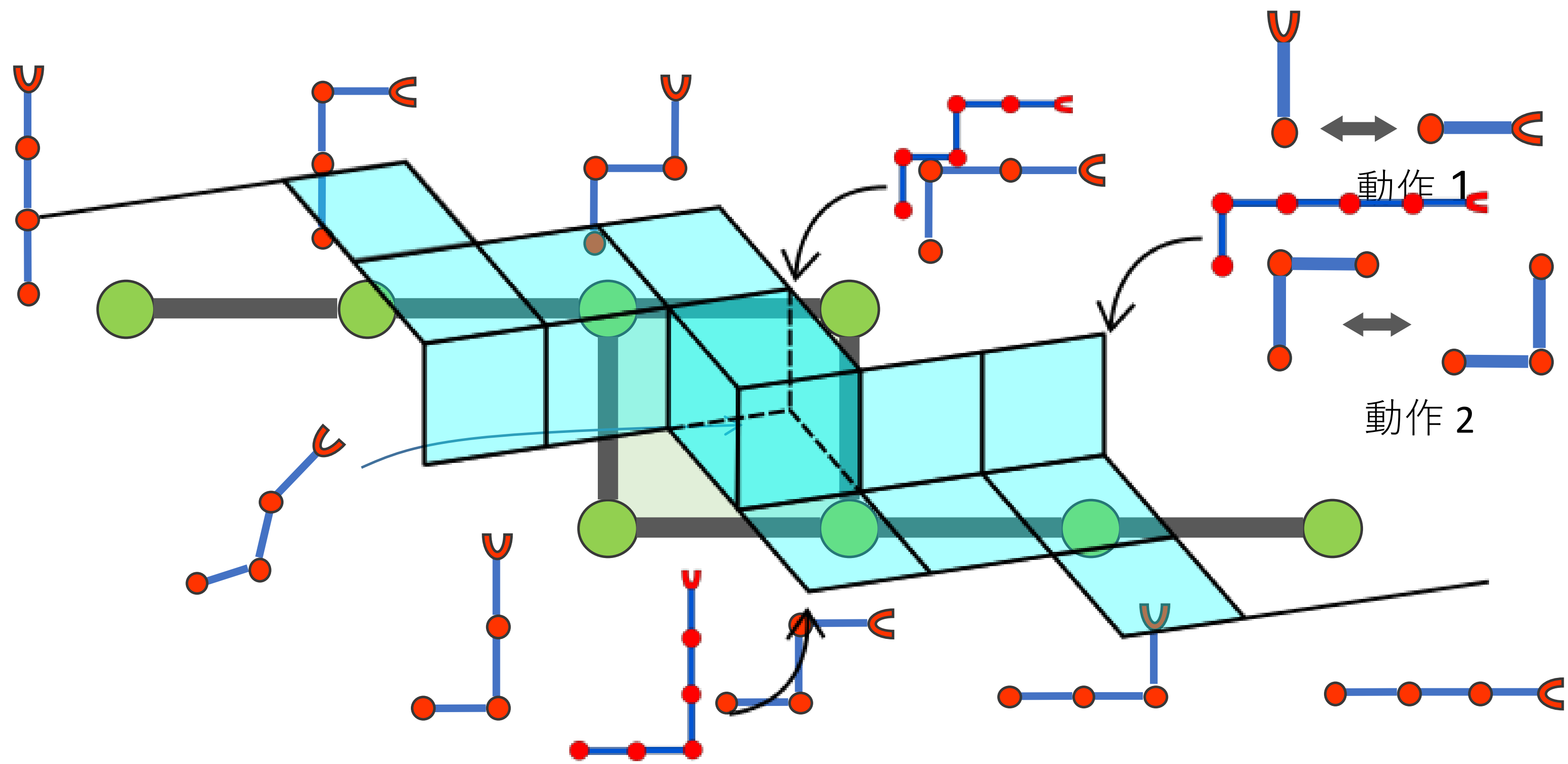
例：ツリー，グリッドグラフ，分配束のハッセ図, and more

定理 Chepoi 2000

- CAT(0)立方複体の1-スケルトンはメディアングラフ.
- メディアングラフのキューブ部分グラフをキューブに置き換えるとCAT(0)立方複体になる.

ロボット動作計画への応用 Abram-Ghrist 2004

ある種の変形ロボットの状態空間はCAT(0)立方複体になる



エネルギー最小の動作計画 ⇒ 測地線問題

CAT(0)立方複体上の測地線問題

注：一般の複体上の測地線問題はNP困難 Canny-Reif 1987

Owen 2011, Owen-Provan 2011: 系統樹空間，多項式時間アルゴリズム

Chepoi-Maftuleac 2013　：２次元，多項式時間アルゴリズム

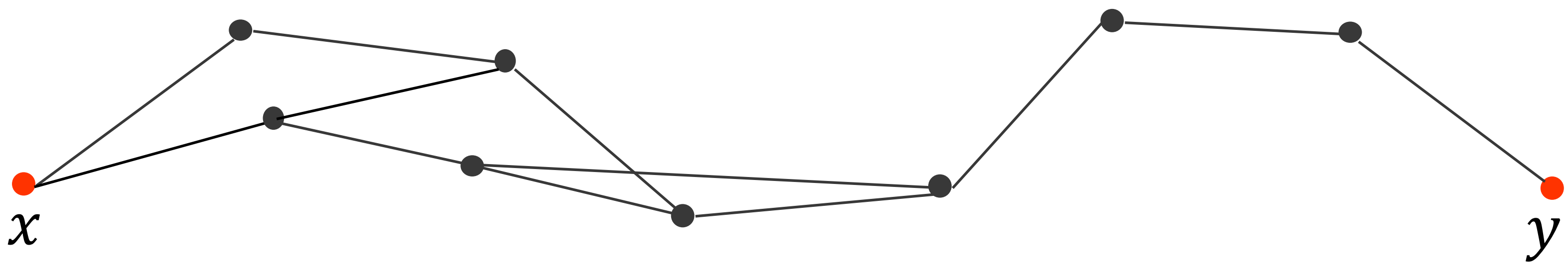
Miller-Owen-Provan 2015　：CAT(0)象限空間，多項式時間アルゴリズム

Ardila-Owen-Sullivant 2012　：一般，？時間アルゴリズム

定理 Hayashi 2021

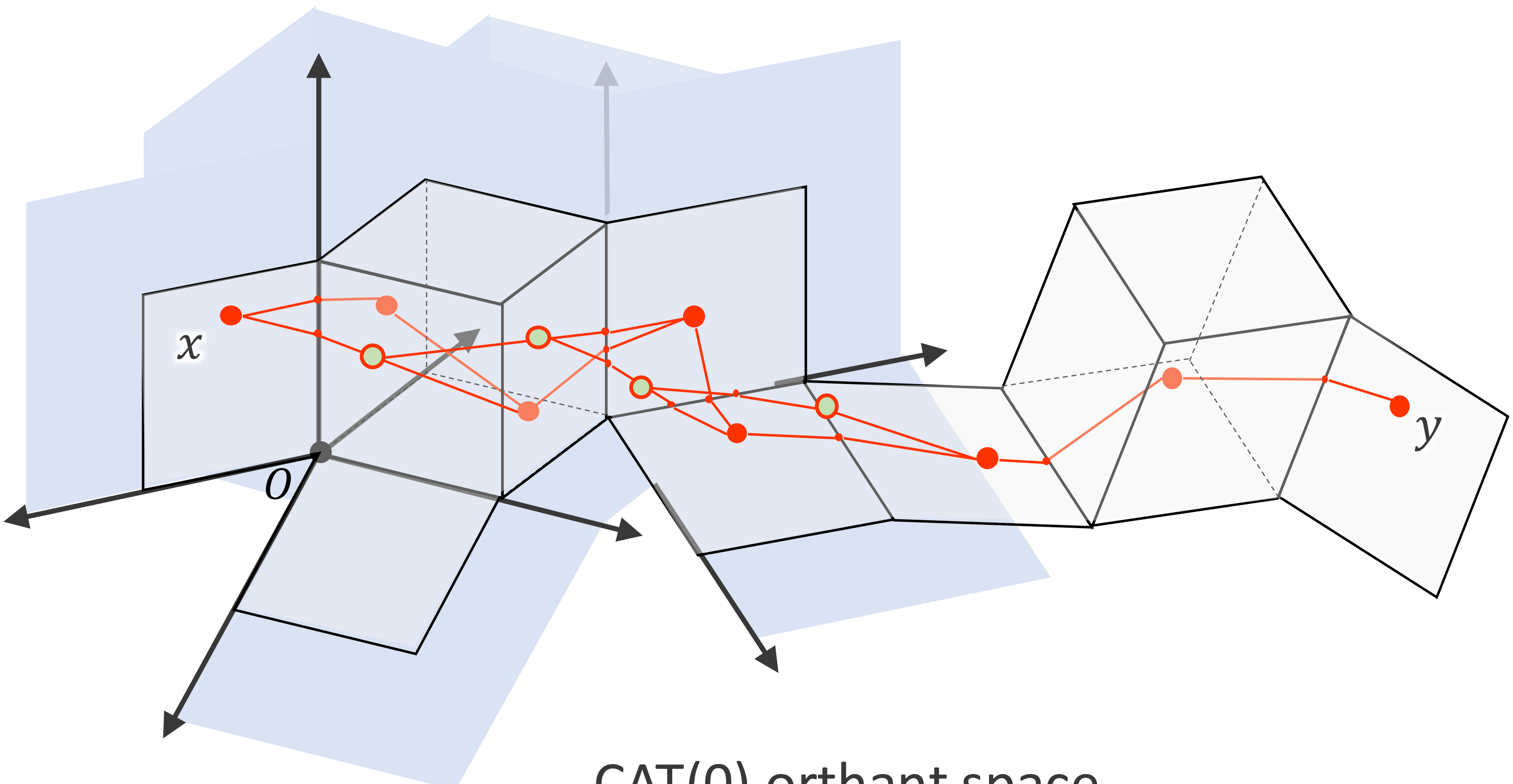
CAT(0)立方複体上の測地線問題は多項式時間で解ける.

Hayashiのアルゴリズム



- シンプルな折れ線パスの局所的更新
- CAT(0)立方複体は局所的には象限複体とみなせ,
  更新にはMiller-Owen-Provanのアルゴリズムを用いる.
- 測地線への収束に「距離関数は凸」というCAT(0)空間の性質を使用.
- 「局所的に測地線が計算できるCAT(0)空間」に適用可能.
- インプットはCAT(0)立方複体のコンパクト表現PIP

Hayashi (ICALP 2018): a polynomial iterative geodesic algorithm for general CAT(0) cubical complexes, by using Owen-Provan algorithm as a subroutine.



CAT(0) orthant space

CAT(0) orthant space

内容

- 系統樹空間と測地線問題
- 組合せ的対象から定義されるCAT(0)空間

  メディアングラフとCAT(0)立方複体

  束・半束に対するオーソスキーム複体
- CAT(0)空間上の凸最適化

  非可換ランク計算への応用

Orthoscheme Complex Brady-McCammond 2012

$\mathcal{M}$: graded poset

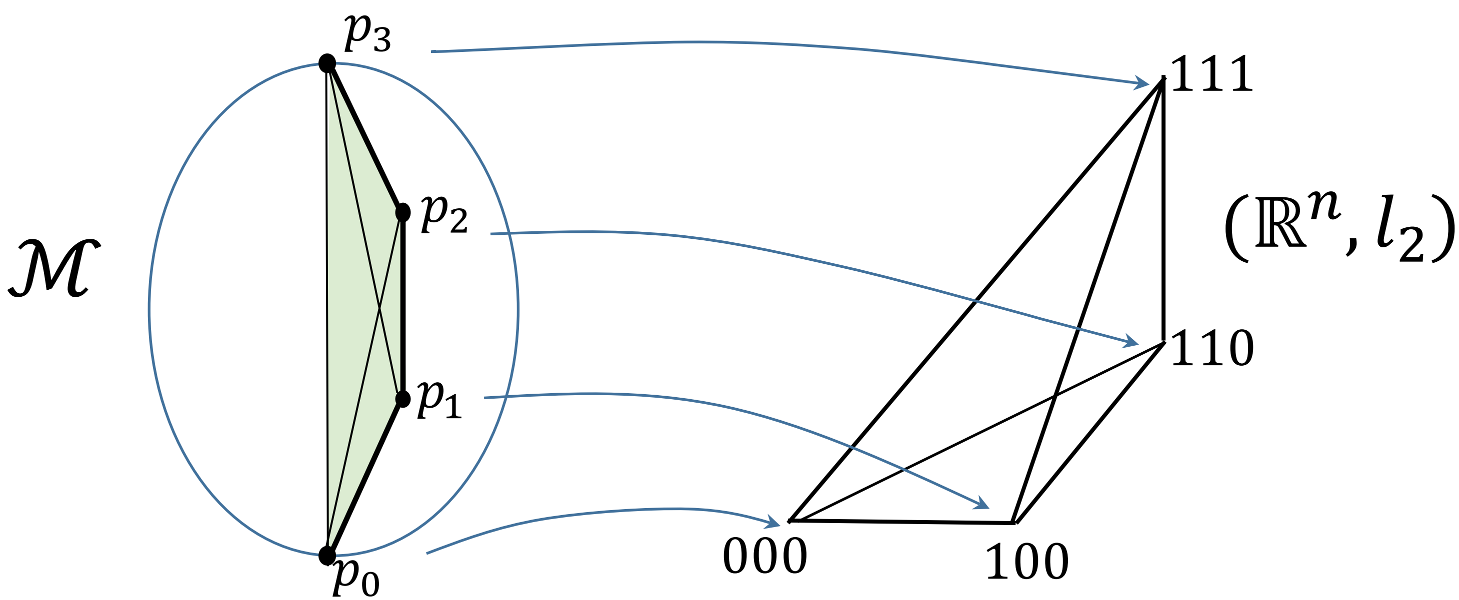
formal convex combination $\sum_i \mu_i = 1, \mu_i \geq 0$

$$K(\mathcal{M}) \coloneqq \{ \ \sum_i \mu_i p_i \mid p_0 \prec p_1 \prec \cdots \prec p_n, \ \ p_i \in \mathcal{M} \ \}$$

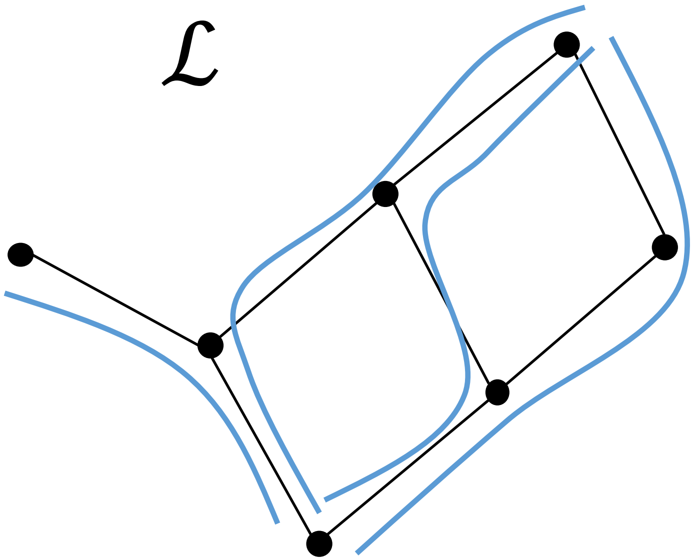
= the order complex of $\mathcal{M}$

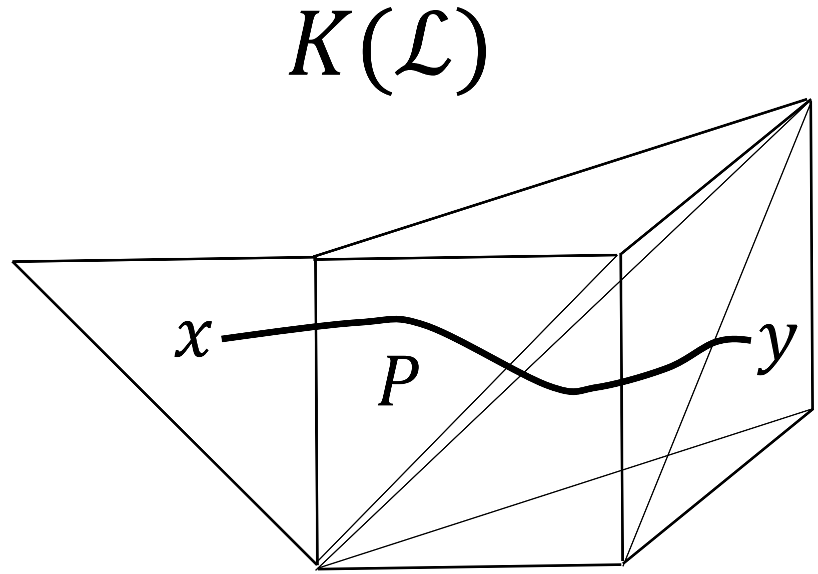
metrized by filling *orthoscheme* to each simplex:

$$\sum_i \mu_i p_i \longmapsto \sum_i \mu_i (\overbrace{1, \dots, 1}^{i}, 0, \dots, 0)$$



Orthoscheme = conv $\{(0,0, \dots, 0), (1,0, \dots, 0), (1,1,0, \dots, 0), \dots, (1,1,1, \dots, 1)\}$





The length $d(P)$ of a path $P: [0,1] \to K(\mathcal{L})$ is well-defined

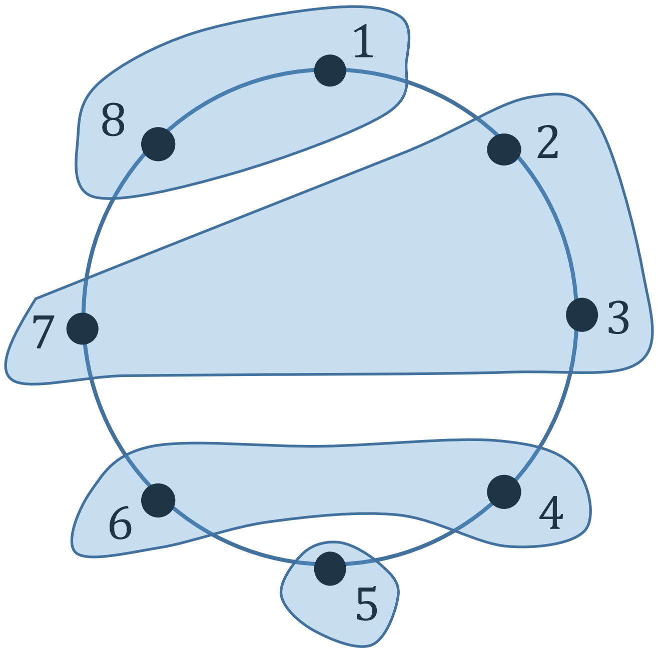
$$d(x, y) := \inf\{d(P) \mid P: (x, y)\text{−path}\}$$

$\to (K(\mathcal{L}), d)$ is a geodesic metric space

Question in GGT [Brady-McCammond 2012]:
Which is the class of posets $\mathcal{L}$ having CAT(0) $K(\mathcal{L})$?

Brady-McCammond Conjecture

(Brady-McCammond 2012)



Noncrossing partition on $\{1,2,\ldots,8\}$

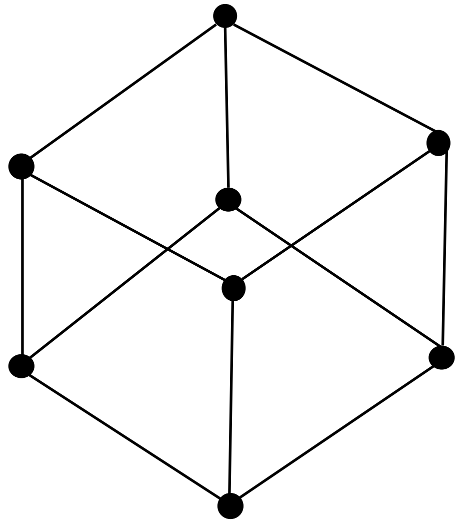
Ex. $\{\{8,1\},\{7,2,3\},\{4,6\},\{5\}\}$

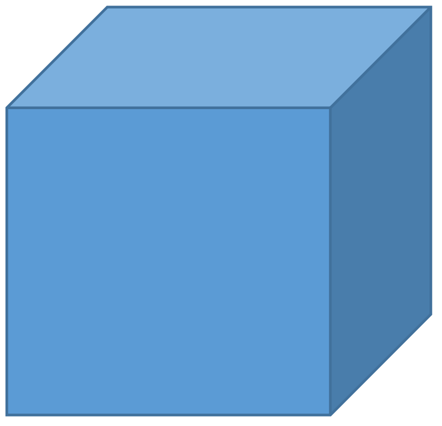
Noncrossing partition lattice
:= { noncrossing partitions }
w.r.t. refinement relation

Conj. [BM12]
$\mathcal{L}$: noncrossing partition lattice $\Rightarrow K(\mathcal{L})$: CAT(0)

Thm. [BM12]
BM conjecture true $\Rightarrow$ braid group is CAT(0) group

Boolean Lattice

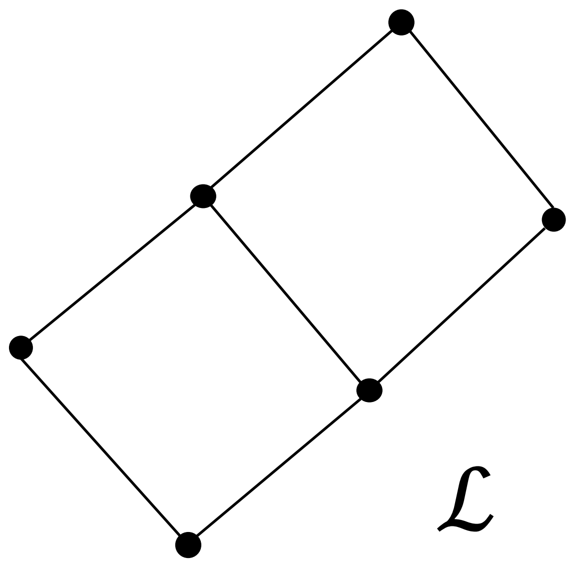




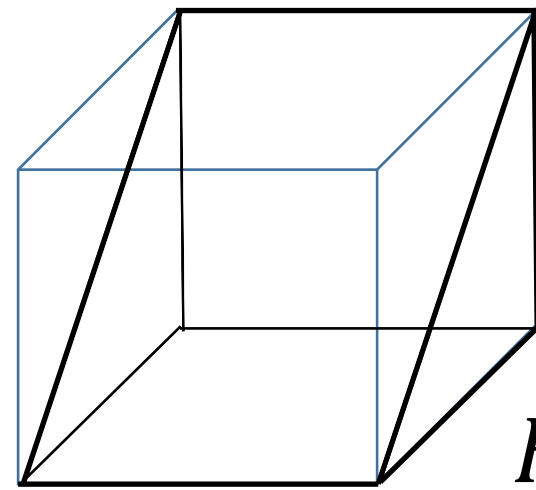
Lem: $\mathcal{L} = 2^{\{1,2,\ldots,n\}} \Rightarrow K(\mathcal{L}) \simeq [0,1]^n$

$\rightarrow$ CAT(0)

Distributive Lattice



$\mathcal{L}$



$K(\mathcal{L})$

Birkhoff

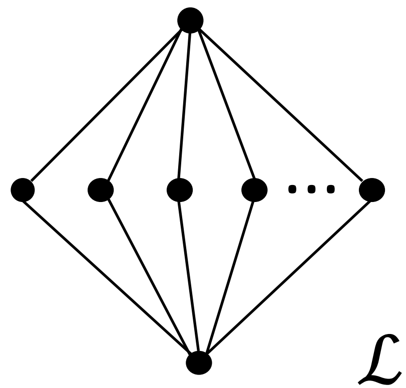
Lem: $\mathcal{L} =$ The family of ideals in a poset $(V, \preccurlyeq)$

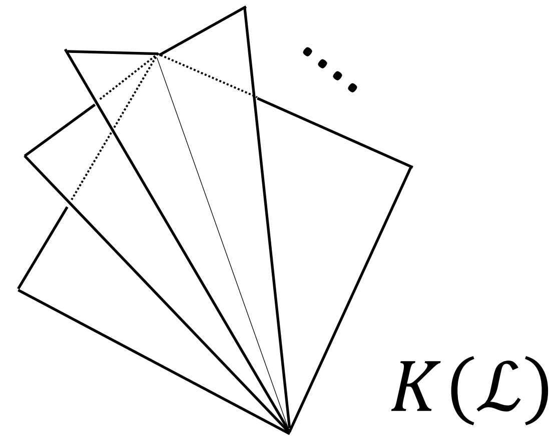
$$K(\mathcal{L}) \simeq \{x \in [0,1]^V \mid x(j) \leq x(i) \ (i, j \in V: i \preccurlyeq j)\}$$

$\rightarrow$ CAT(0)

c.f. order polytope [Stanley 86]

Modular Lattice

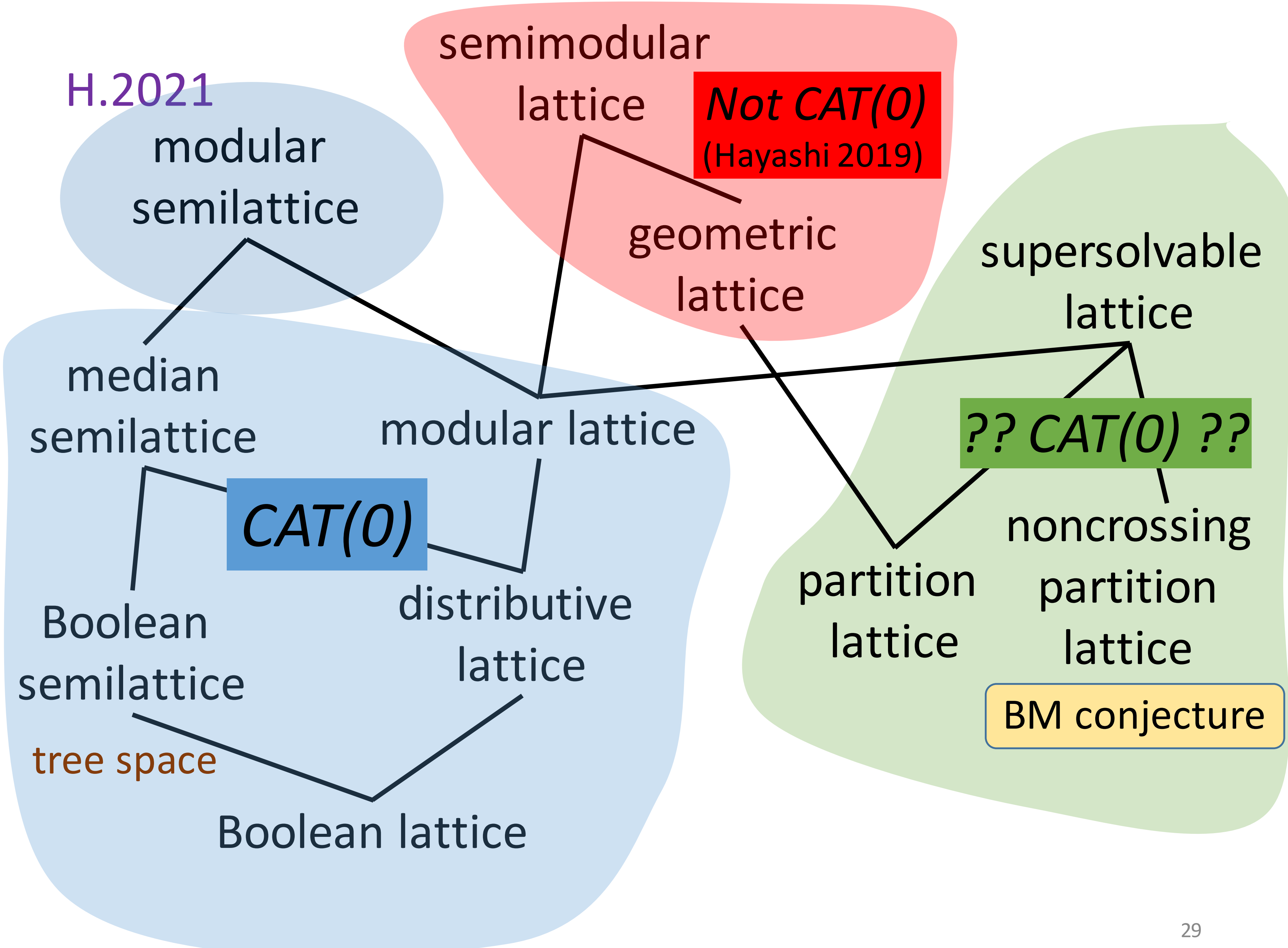




Thm. [Chalopin-Chepoi-H-Osajda 2020]
$\mathcal{L}$: modular lattice ⇒ $K(\mathcal{L})$: CAT(0)

Proof：lattice theoretic argument:

A key lemma [Birkhoff-Dedekind]
Two chains in a modular lattice generates a distributive lattice


H.2021
modular semilattice
semimodular lattice
Not CAT(0)
(Hayashi 2019)
geometric lattice
supersolvable lattice
median semilattice
modular lattice
?? CAT(0) ??
CAT(0)
Boolean semilattice
distributive lattice
partition lattice
noncrossing partition lattice
BM conjecture
tree space
Boolean lattice

Thm. [H2021] Conj [CCHO2020]
$\mathcal{L}$: modular semilattice $\Rightarrow$ $K(\mathcal{L})$: CAT(0)

∀principal ideal is a modular lattice
$x \vee y, y \vee z, z \vee x \in \mathcal{L} \Rightarrow x \vee y \vee z \in \mathcal{L}$

Proof Outline:

For $K(\mathcal{L})$, CAT(0) property $\Leftrightarrow$ Unique Geodesic Property

We prove UGP in constructive way

Key Fact: Owen-Provan algorithm
for geodesics in tree space $\mathcal{T}_n$
can prove UGP (*without knowing CAT(0)*)

→ We extend this argument in lattice theoretic way

内容

- 系統樹空間と測地線問題
- 組合せ的対象から定義されるCAT(0)空間

  メディアングラフとCAT(0)立方複体

  束・半束に対するオーソスキーム複体
- **CAT(0)空間上の凸最適化**

  非可換ランク計算への応用

CAT(0)空間上の凸最適化

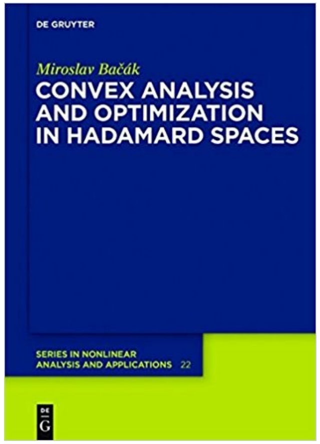
事実：CAT(0)空間Xは一意測地的である.

定義：$f\colon X \to \mathbb{R}$ が凸 $\Leftrightarrow$

$$(1-t)f(x) + tf(y) \geq f\big(P(t)\big) \qquad (x, y \in X, t \in [0,1]),$$

ここで，$P\colon [0,1] \to X$は，xからyへの測地線.

M. Bačák: *Convex Analysis and Optimization in Hadamard Spaces*, De Gruyter, Berlin, 2014.



注：アダマール空間 = 完備なCAT(0)空間

分割近接点法

X: 完備なCAT(0)空間　$f_1, f_2, \dots, f_N$: 凸関数

目標　$\sum_{i=1}^{N} f_i$　の最小化

分割近接点法の更新式：

$$x^{k+1} := \operatorname{argmin}_{x \in X}\ f_{k \bmod N}(x) + \frac{1}{\lambda_k} d(x, x^k)^2$$

定理 Bačák 2014

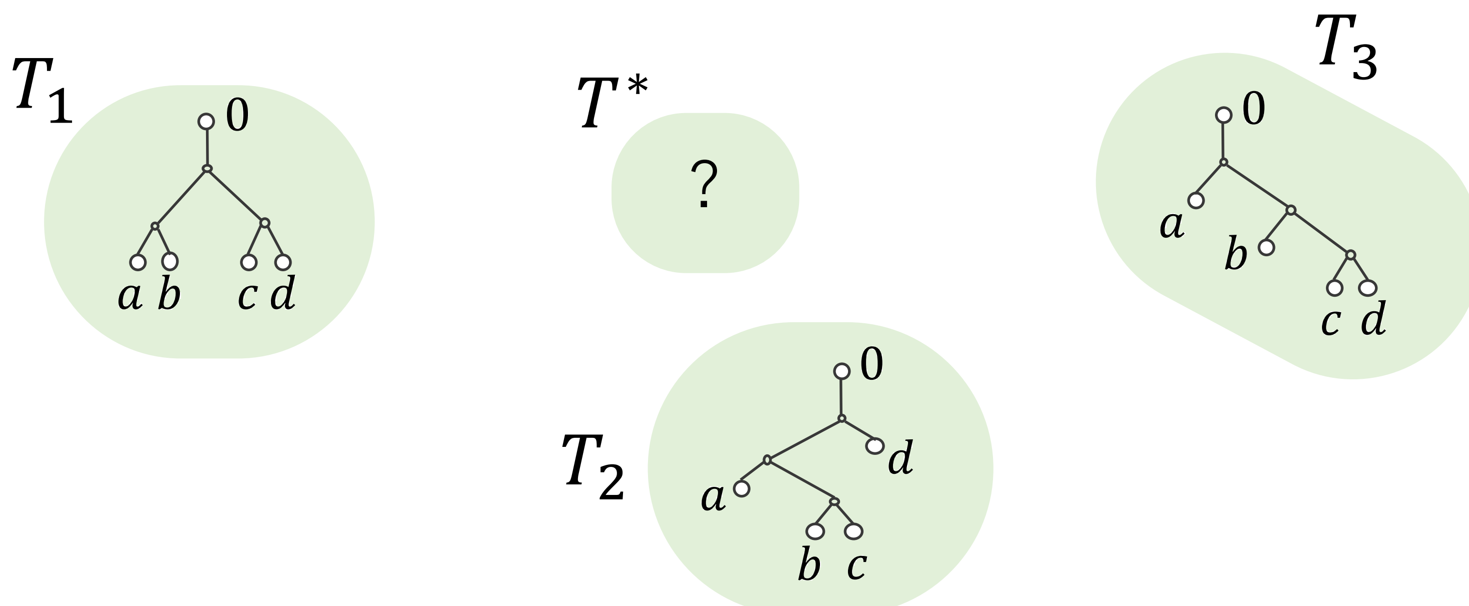
適切な仮定のもと，$\lim_{k \to \infty} x^k =$ 最適解

Ohta-Pálfia 2015: 収束のスピードの評価

応用：系統樹たち$T_1, T_2, \ldots, T_N$の「平均」T^*

$$T^* := \operatorname{argmin}_T \sum_{i=1}^{N} d(T_i, T)$$

凸関数



- 各反復で Min. $d(T_i, T) + \frac{1}{\lambda_k} d(T^k, T)$を解く.
- T^{k+1}は，T_iとT^kを結ぶ測地線内に存在.

→ 測地線問題に帰着

CAT(0)空間上の凸最適化を

離散的な最適化問題の連続緩和問題として

使えないか？

Thm. [Chalopin-Chepoi-H-Osajda 2020]

$\mathcal{L}$: modular lattice $\Rightarrow$ $K(\mathcal{L})$: CAT(0)

Thm. [H.18] $\mathcal{L}$: modular lattice

$f : \mathcal{L} \to \overline{\mathbb{R}}$ is submodular $\Leftrightarrow$ $\bar{f} : K(\mathcal{L}) \to \overline{\mathbb{R}}$ is convex

$f(p) + f(q) \geq f(p \wedge q) + f(p \vee q)$

$\bar{f}(x) \coloneqq \sum_i \lambda_i f(p_i) \quad (x = \sum_i \lambda_i p_i \in K(\mathcal{L}))$

→ 非可換Edmonds問題への応用（Hamada-Hirai 2021）

Edmonds Problem Edmonds 1967

Can we compute the rank of

$$A = A_1 x_1 + A_2 x_2 + \cdots + A_m x_m$$

in polynomial time ?

x_i : variables, A_i: $n \times n$ matrices over field $\mathbb{K}$

A: matrix over $\mathbb{K}[x_1, x_2, \ldots, x_m] \subset \mathbb{K}(x_1, x_2, \ldots, x_m)$

- RP, but P ? (for large field)
- Related to fundamental problems in diverse areas
  ～ combinatorial optimization, rigidity theory, TCS,…

Non-commutative Edmonds Problem

Ivanyos-Qiao-Subrahmanyam 2017

Can we compute the rank ***(nc-rank)*** of

$$A = A_1 x_1 + A_2 x_2 + \cdots + A_m x_m$$

in polynomial time ?

x_i : noncommutative variables, A_i: matrices over field $\mathbb{K}$

A: matrix over free ring $\mathbb{K}\langle x_1, x_2, \dots, x_m\rangle$

$\cap$

free skew field $\mathbb{K}(\langle x_1, x_2, \dots, x_m\rangle)$

- Broaden the literature:
  Noncommutative algebra, Invariant theory, ...

Null cone membership for left-right action

$SL_n \times SL_n \ni (S, T) \mapsto (SA_k T)_{k=1,2,\dots,m}$

nc-rank in **P**

- Garg-Gurvits-Oliveira-Wigderson 2019 : $\mathbb{K} = \mathbb{Q}, \mathbb{R}, \mathbb{C}$

Gurvits' operator scaling $\approx$ alternating minimization for
a *geodesically convex* function
on symmetric space GL_n/U_n

nc-nonsingularity $\Leftrightarrow$ $\inf\left\{ \log \frac{\det \sum A_i X A_i^T}{\det X} : X \succ 0 \right\} > -\infty$

→ *Noncommutative optimization* (Bürgisser et al.)

→ GCT (Geometric Complexity Theory) との合流

- Ivanyos-Qiao-Subrahmanyam 2018: $\mathbb{K}$ arbitrary

Wong sequence --- vector-space analogue of augmenting path

Matrix completion by cyclic division algebra

Our contribution [Hamada-H 2020]

A different polytime algorithm to compute nc-rank

Features / techniques:

- Submodular optimization on modular lattice

$$f(p) + f(q) \geq f(p \wedge q) + f(p \vee q)$$

- Convex optimization on CAT(0) space

non-manifold

For nc-rank over $\mathbb{Q}$ (to avoid bit-complexity issue):

- reduction to nc-rank over $\mathrm{GF}(p)$ by p-adic valuation

→ discrete convex optimization

on Euclidean building for $GL_n(\mathbb{Q})$

Submodularity in nc-rank

Thm (Fortin-Reutenauer 2004)

$$\text{nc-rank} \sum_k A_k x_k = 2n - \text{Max. } r + s$$

$$\text{s.t.} \quad PA_kQ = \begin{array}{cc} & \\ r & \begin{bmatrix} * & * \\ 0 & * \end{bmatrix} \\ & s \end{array} \quad (\forall k)$$

$$P, Q \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{K})$$

$$\text{Max.} \quad \dim X + \dim Y \quad \text{s.t.} \quad A_k(X, Y) = \{0\} \ (\forall k)$$

$X, Y \subseteq \mathbb{K}^n$ vector subspaces

where $A_k(x, y) := x^T A_k y$

$$\text{Max.}\quad \dim X + \dim Y \quad \text{s.t.}\quad A_k(X,Y) = 0\ (\forall k)$$

$X, Y \subseteq \mathbb{K}^n$ vector subspaces

$\geqq$

$2n+1$

$$\text{Min.}\quad -\dim X - \dim Y + C \textstyle\sum_k \operatorname{rank} A_k|_{X\times Y}$$

$$\text{s.t.}\ (X,Y) \in \mathcal{L} \times \mathcal{L}$$

$\mathcal{L}$: the modular lattice of all vector subspaces of $\mathbb{K}^n$

partial order reversed

Lem: The objective function is submodular in $\mathcal{L} \times \mathcal{L}^*$

$$f(X,Y) + f(X',Y') \geq f(X+X', Y\cap Y') + f(X\cap X', Y+Y')$$

$\wedge = (+,\cap),\ \vee = (\cap,+)$

Our polytime algorithm to solve SFM for nc-rank

$$\text{Min.}\quad -\dim X - \dim Y + C\textstyle\sum_i \operatorname{rank} A_i|_{X\times Y}$$

$$\text{s.t.}\ (X,Y) \in \mathcal{M} = \mathcal{L}\times\mathcal{L}^*$$

- Continuous & convex relaxation to *CAT(0) space*

$$\mathcal{M} \quad \overset{\text{orthoscheme complex}}{\Longrightarrow} \quad K(\mathcal{M}),\ \text{a CAT(0) space}$$

$$f \quad \overset{\text{Lovász extension}}{\Longrightarrow} \quad \bar{f}: K(\mathcal{M}) \to \mathbb{R},\ \text{convex}$$

- Minimize $\bar{f}$ by SPPA & apply convergence estimate

- SPPA is implementable ← lattice theoretic argument

参考文献

J. Chalopin, V. Chepoi, H. Hirai, and D. Osajda: Weakly modular graphs and nonpositive curvature, *Memoirs of the AMS*, 268, no.1309, (2020)

K. Hayashi: A polynomial time algorithm to compute geodesics in CAT(0) cubical complexes, *Discrete & Computational Geometry* 65 (2021), 636--654.

H. Hirai: A nonpositive curvature property of modular semilattices, *Geometriae Dedicata*, 214 (2021), 427--463.

M. Hamada and H. Hirai: Computing the nc-rank via discrete convex optimization on CAT(0) spaces, *SIAM Journal on Applied Geometry and Algebra* 5 (2021), 455--478.