

行列スケーリングから非正曲率空間上の測地的凸最適化へ

From matrix scaling to geodesically convex optimization on nonpositively curved spaces

平井 広志^{1*}

Hiroshi Hirai

概要 行列スケーリング問題とは「与えられた非負行列 A に右と左から正の対角行列（スケーリング行列）をかけて、2重確率行列にできるか」という問題で、様々な応用があり古くから研究されてきた。行列スケーリングには、連続最適化と離散最適化、両方の側面がある—スケーリング行列の存在性は、2部グラフの完全マッチングの存在判定に帰着し、スケーリング行列を求める問題は、幾何計画というクラスの凸最適化問題になる。行列スケーリング問題は、作用素スケーリング問題に一般化され、最近になって、その多項式時間アルゴリズムが示された。これを契機にして、さらなる一般化（群軌道ノルム最小化問題）や、様々な分野にまたがる応用がみいだされ、大きな拡がりをみせている。ここでは、上の側面は、非正な曲率をもつ空間上の連続的、そして、離散的な凸最適化へと一般化される。本稿では、その発展の様子やそこで現れる新しいタイプの凸最適化について解説する。

キーワード 行列スケーリング, 作用素スケーリング, 非可換ランク, 測地的凸最適化, アダマール空間・多様体, 対称空間, ユークリッドビルディング, 内点法

1. はじめに

行列スケーリングとは「与えられた非負行列 A に右と左から正の対角行列（スケーリング行列）をかけて、指定された2重確率行列にできるか」という問題で、様々な応用があり古くから研究されてきた。この問題には、連続最適化と離散最適化、両方の側面がある—スケーリング行列の存在性は、2部グラフの完全マッチングの存在判定に帰着し、スケーリング行列を求める問題は、幾何計画というクラスの凸最適化問題になる。行列スケーリング問題は、作用素スケーリング問題に一般化され、最近になって、その多項式時間アルゴリズムが示された。これを契機にして、さらなる一般化（群軌道ノルム最小化問題）や、様々な分野にまたがる応用がみいだされ、大きな拡がりをみせている。ここでは、上の側面は、非正な曲率をもつ空間・多様体（アダマール空間, CAT(0)空間）上の連続的、そして、離散的な凸最適化へと一般化される。本稿では、その発展の様子やそこで現れる新しいタイプの凸最適化について解

¹ 名古屋大学大学院多元数理科学研究科, 〒464-8603 名古屋市千種区不老町
Graduate School of Mathematics, Nagoya University, Furocho, Chikusaku, Nagoya 464-8603, Japan
* E-mail address: hirai.hiroshi@math.nagoya-u.ac.jp

説する。

第2節では、行列スケーリングの数理について最適化の立場から説明する。第3節では、以降の節の準備として非正曲率空間を導入する。第4節では、作用素スケーリングと非可換シンボリックランク計算の最近の発展について述べる。第5節ではさらなる展開について述べる。

2. 行列スケーリング

$A = (A_{ij})$ を $n \times n$ 非負行列とする。 A は、ゼロ行、ゼロ列を含まないとする。正の対角要素を持つ対角行列 X, Y を A の右と左からかけることを「 A をスケーリングする」という。得られる行列 $A' = XAY$ を A のスケーリングと呼ぶことにする。 X, Y の対角要素 X_{ii}, Y_{ii} を x_i, y_i とかくことにする。 $x = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n)^\top, y = (y_1 \ y_2 \ \cdots \ y_n)^\top$ をスケーリングベクトルと呼ぶことにする。行列 $A' = XAY$ は、要素でかくと、

$$A'_{ij} = A_{ij}x_iy_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, n)$$

とかける。ここでは、次の問題を考える：

2重確率スケーリング問題 与えられた A に対して、 XAY が2重確率行列となるようにスケーリングしたい。

すなわち、

$$(XAY)\mathbf{1} = \mathbf{1}, \quad (XAY)^\top\mathbf{1} = \mathbf{1} \quad (2.1)$$

となるような X, Y を求めたいということである。ここでは、この条件を少し緩めた近似的スケーリング可能性を主に扱う。非負行列 A が「近似的に2重確率スケーリング可能である」とは、任意の $\epsilon > 0$ に対して、ある正対角行列 X, Y が存在して、

$$\|XAY\mathbf{1} - \mathbf{1}\| < \epsilon, \quad \|(XAY)^\top\mathbf{1} - \mathbf{1}\| < \epsilon \quad (2.2)$$

となることと定義する。

2.1. Sinkhorn のアルゴリズム

Sinkhorn のアルゴリズム [51] を紹介する。(2.1) の1つ目の式は、 Y を固定したとき、 X については容易に解くことができる：

$$x_i = 1 / \sum_j A_{ij}y_j \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (2.3)$$

同様に、(2.1) の2つ目の式において、 X を固定すると、 Y については、

$$y_j = 1 / \sum_i A_{ij}x_i \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2.4)$$

と解ける。Sinkhorn のアルゴリズムは、 Y を固定して、 X を(2.3)のように決める。そして、今度は X を固定して、 Y を(2.4)のように決める。これを繰り返すアルゴリズムである。

Sinkhorn のアルゴリズム (X, Y を更新)

- 0: $x = y := \mathbf{1}$.
- 1: $x_i \leftarrow 1 / \sum_k A_{ik} y_k$ ($i = 1, 2, \dots, n$).
- 2: $y_j \leftarrow 1 / \sum_k A_{kj} x_k$ ($j = 1, 2, \dots, n$).
- 3: ステップ 1 に戻る.

スケールリングベクトル x, y のかわりに A を更新することにすれば次のようになる.

Sinkhorn のアルゴリズム (A を更新)

- 1: $A_{ij} \leftarrow A_{ij} / \sum_k A_{ik}$ ($i, j = 1, 2, \dots, n$)
- 2: $A_{ij} \leftarrow A_{ij} / \sum_k A_{kj}$ ($i, j = 1, 2, \dots, n$)
- 3: ステップ 1 に戻る.

つまり、行和ベクトルが $\mathbf{1}$ になるように行をスケールリング (行正規化) と列和ベクトルが $\mathbf{1}$ になるように列をスケールリング (列正規化) を繰り返すだけのアルゴリズムである.

2.2. スケールリング可能性の特徴付け

定理 2.1 (Sinkhorn, Knopp [52], Rothblum, Schneider [49]). 以下は同値である.

(a) A は近似的に 2 重確率スケールリング可能である.

$$(b) \inf \left\{ \frac{\left(\sum_{i,j} A_{ij} x_i y_j \right)^n}{x_1 \cdots x_n y_1 \cdots y_n} \mid x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n > 0 \right\} > 0.$$

(c) $A_{ij} = 0$ ($\forall i \in X, \forall j \in Y$) となる任意の部分集合 $X, Y \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ に対して,

$$|X| + |Y| \leq n$$

が成り立つ.

(d) Sinkhorn アルゴリズムによって A は 2 重確率行列に収束する.

資料 [60] にこの定理の証明を含む行列スケールリングの数理の解説がある.

2.3. 連続最適化と行列スケールリング

定理 2.1(b) の最適化問題は、幾何計画と呼ばれるクラスの最適化問題に属する. そのままの形では、非凸最適化問題であるが、変数変換 $x_i = e^{\xi_i}, y_j = e^{\eta_j}$ をおこない、 \log をとることで、凸最適化問題となる:

$$\inf. \quad n \log \sum_{i,j} A_{ij} e^{\xi_i + \eta_j} - \mathbf{1}^\top \xi - \mathbf{1}^\top \eta \quad \text{s.t.} \quad \xi, \eta \in \mathbb{R}^n. \quad (2.5)$$

この問題に対して、交互最適化、 ξ を固定して η で最適化、 η を固定して ξ で最適化、することを考える. すると、更新式は陽にかけて $x_i = e^{\xi_i}, y_j = e^{\eta_j}$ とおいたときの (2.3), (2.4) になる. つまり、Sinkhorn アルゴリズム (X, Y を更新) である. よって、Sinkhorn アルゴリズムは、幾何計画問題に対する交互最適化アルゴリズムと解釈できる. スケールリング行列は、 e^{ξ_i}, e^{η_j} を対角要素にもつ行列に対応する. そのときの (2.5) の目的関数 f_A の勾配 $\nabla f_A(\xi, \eta)$

は、 $(A\mathbf{1} - \mathbf{1}, A^\top \mathbf{1} - \mathbf{1})$ (の定数倍) とかけるので、近似スケーリング条件 (2.2) は、「勾配ノルム $\|\nabla f_A(\xi, \eta)\|$ が ϵ 以下」という条件になる。近似スケーリング可能性は、「原点 0 が勾配空間 $\nabla f_A(\mathbb{R}^{2n})$ の閉包 $\overline{\nabla f_A(\mathbb{R}^{2n})}$ に含まれる」という条件になる。

行列スケーリング問題や Sinkhorn アルゴリズムに対する最適化・計算量的な立場からの研究は意外と新しく 1990 年代に始まったようである。Sinkhorn アルゴリズムで、(2.2) を満たすスケーリングを得るには、 $1/\epsilon^2$ に比例するオーダーの反復回数が必要となる [39]。その意味で、Sinkhorn アルゴリズムは擬多項式時間アルゴリズムである。行列スケーリングに対する最初の多項式時間アルゴリズムといえるのは、Kalantari, Khachiyan [38] によるもので、内点法を用いることで (2.2) を満たすスケーリングを $O(n^4 \log(\frac{n}{\epsilon} \log n\gamma))$ 時間で求まることが示されている。 γ は、 A の最大非ゼロ要素と最小非ゼロ要素の比である。強多項式時間アルゴリズムは、Linial, Samoroditsky, Wigderson [42] によって与えられた。近年になっても、行列スケーリングの高速化の研究は行われている [3]。

これらの結果では、行列 A がスケーリング可能であると仮定している。なぜなら、次の節で述べるように、スケーリング可能性はマッチングアルゴリズムによって高速に判定できるからである。スケーリング不可能な場合の (収束しない) Sinkhorn アルゴリズムの振る舞いについては [23] を参照。

定理 2.1 の条件 (b) は、幾何計画 (2.2) の有界性と同値であるが、一般に、凸最適化の有界性は後退関数 (recession function) というものを使って調べることができる。後退関数については [48, Section 8] や [33, Section 3.2] を参照。 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ を凸関数として、その後退関数 $f^\infty : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ は

$$f^\infty(u) := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{f(x + tu) - f(x)}{t} \quad (u \in \mathbb{R}^n) \quad (2.6)$$

と定義される。ここで f^∞ は x の取り方によらない。 f^∞ は正斉次凸関数となる。 $f^\infty(u)$ の幾何学的な意味は、 f の u 方向への無限遠での傾きである。そのことから、後退関数の非負性が有界性の必要条件であることがわかる：

$$\inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) > -\infty \text{ ならば } f^\infty(u) \geq 0 \quad (\forall u \in \mathbb{R}^n).$$

逆向きは一般に成立しないが、 f が幾何計画の目的関数であるときは、逆向きも成立する。この事実が、(b) と (c) の同値性を証明する。実際、[49] の原証明も後退関数によるものである。(2.5) の目的関数 f_A の後退関数 f_A^∞ は陽に計算できて、

$$f_A^\infty(u, v) = n \max\{u_i + v_j \mid i, j : A_{ij} > 0\} - \mathbf{1}^\top u - \mathbf{1}^\top v \quad (u, v \in \mathbb{R}^n) \quad (2.7)$$

となる。条件 $f_A^\infty(u, v) \geq 0 \quad (\forall u, v)$ は、 u, v を $0, 1$ ベクトルとしてよく、条件 (c) がでる。

上に述べたように、条件 (a) は、原点 0 が勾配空間 $\nabla f_A(\mathbb{R}^{2n})$ の閉包 $\overline{\nabla f_A(\mathbb{R}^{2n})}$ に含まれると解釈される。まとめると、定理 2.1 は、微分可能な凸関数 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ に一般に成り立つ関

係式

$$\overline{\nabla f(\mathbb{R}^n)} = \overline{\text{dom } f^*} = \text{dom}(f^\infty)^* = \{p \in \mathbb{R}^n \mid p^\top u \leq f^\infty(u) \ (u \in \mathbb{R}^n)\} \quad (2.8)$$

において、目的関数 f_A の特殊性 $\overline{\text{dom } f_A^*} = \text{dom } f_A^*$ を応用したものと理解される。 f^* は、 f の Fenchel-Legendre 共役関数である。後にこの考察を多様体上に拡張することを考える。

2.4. 離散最適化と行列スケーリング

定理 2.1 の条件 (c) は、行列 A のゼロ/非ゼロパターンにしか依存しないことに注意する。そこで、2部グラフ $G_A = ([n] \sqcup [n], E)$ を $E := \{ij \mid A_{ij} > 0\}$ と定義する。片側の頂点集合 $S \subseteq [n]$ に対して、 $\Gamma(S)$ を S に隣接する頂点の集合とする。すると、(c) の条件は、

$$|S| \leq |\Gamma(S)| \quad (\forall S \subseteq [n]) \quad (2.9)$$

と同値である。これは、Hall の結婚定理の完全マッチングの存在条件に他ならない。よって、条件 (c) は

G_A に完全マッチングが存在する

といいかえられる。したがって、近似スケーリング可能性は、 G_A にマッチングアルゴリズム (増加道アルゴリズム) を適用することで高速に判定できる。

興味深いのは、完全マッチングの存在という組合せ的性質 (c) が、Sinkhorn アルゴリズムの収束性という解析的性質 (d) と同値となる点である。では、Sinkhorn アルゴリズムの振る舞いから完全マッチングの存在を判定できないだろうか？実際それは可能で、Linial, Samorodnitsky, Wigderson [42] は、Sinkhorn アルゴリズムを多項式回反復することで、完全マッチングの存在が判定できることを示している。 $G = ([n] \sqcup [n], E)$ を2部グラフとして、行列 A_G を

$$(A_G)_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } ij \in E, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.10)$$

と定義する。

Sinkhorn 反復による完全マッチング存在判定

0: $A \leftarrow A_G$

1: $A_{ij} \leftarrow A_{ij} / \sum_k A_{ik} \ (i, j = 1, 2, \dots, n)$

2: $A_{ij} \leftarrow A_{ij} / \sum_k A_{kj} \ (i, j = 1, 2, \dots, n)$

3: $\|A\mathbf{1} - \mathbf{1}\|_2 < 1/\sqrt{n}$ なら終了。

4: ステップ 1 に戻る。

定理 2.2 ([42]). (1) G に完全マッチングが存在すれば $O(n^2 \log n)$ 反復のうちに終了。

(2) G に完全マッチングが存在しなければ終了しない。

したがって、 $O(n^2 \log n)$ 反復繰り返すことで完全マッチングの存在が判定できる。なお、ステップ 3 の条件は、 $\|A\mathbf{1} - \mathbf{1}\|_1 < 2$ と弱めることができ、具体的な反復回数の上限として

$(1/4)n^2 \log m$ をとることができる [23]. このアルゴリズムは、もちろん増加道アルゴリズムよりも遅いけれども、その簡明さや全く異なるアイデアに基づいている点が興味深い。さらに4節でみるように作用素スケーリングの発展につながっている。

定理 2.2 の証明は、Sinkhorn 反復が f_A に対する最適化アルゴリズムであることに基づく：
 勾配ノルム下界: 完全マッチングがないとき ($\inf f_A = -\infty$) は、つねに $\|A\mathbf{1} - \mathbf{1}\|_1 \geq 2$.

1 反復の減少量: 1 回の反復において、 f_A はすくなくとも $4\|A\mathbf{1} - \mathbf{1}\|_1/n^2$ 減少する。

目的関数の下界: 完全マッチングがあるとき ($\inf f_A > -\infty$) は、 $\inf f_A \geq 0$.

1 つ目の条件から、完全マッチングがないときは停止しない。あるときは、2 つ目の条件、3 つ目の条件、 f_A の初期値 $f_A(0,0) = \log m$ 、から $(1/4)n^2 \log m$ 回以上繰り返すことはできない。

3. 非正曲率空間

次節以降の準備として、非正曲率空間を導入する。ここで考える非正曲率空間は、CAT(0) 空間、または、アダマール空間という距離空間である。リーマン多様体である場合とそうでない場合を考える。CAT(0) 空間とは、任意の測地的 3 角形がユークリッド空間のときと比べても痩せているとして定義される測地的距離空間である。アダマール空間とは、完備な CAT(0) 空間のことである。距離空間 (X, d) の点 x, y を結ぶ測地線とは、 $c(0) = x, c(\ell) = y, d(c(s), c(t)) = |s - t|$ をみたすパス $c: [0, \ell] \mapsto X$ のことである。もしもある $\lambda \geq 0$ に対して $d(c(s), c(t)) = \lambda|s - t|$ とかけるときは定速測地線という。CAT(0) 空間においては、任意の 2 点 x, y を結ぶ測地線は唯一つにきまる。そこで、CAT(0) 空間上の関数 f が測地的凸であることは、任意の測地線 c のうえで関数 $t \mapsto f(c(t))$ が (1 次元) 凸関数となることと定義する。

CAT(0) 空間の正式な定義は [9] を参照。アダマール空間・CAT(0) 空間の情報科学・応用数学への展開は [5, 58] を参照。多様体上の測地的凸最適化については [7, Chapter 11] を参照。リーマン多様体については [62] を参照。

3.1. 正定値行列多様体, 非正曲率対称空間

各点で非正な断面曲率をもち、単連結かつ完備なリーマン多様体のことをアダマール多様体という。リーマン多様体であって、そのリーマン距離から決まる距離空間がアダマール空間になるものである。アダマール多様体の重要な例は、 n 次正定値対称行列のなす集合 P_n である。 P_n の $\mathbb{R}^{n(n+1)/2}$ 内の開集合なので自然に多様体とみなせる。各点 x の接空間 T_x は、対称行列のなす空間 S_n と同一視できて、そこに内積を $\langle S, T \rangle_x := \text{tr } x^{-1} S x^{-1} T$ ($S, T \in T_x = S_n$) と導入する。すると P_n はリーマン多様体になり、 x をとおる定速測地線は、 $g g^\top = x$ となる $g \in GL_n(\mathbb{R})$ と $H \in S_n$ によって $t \mapsto g e^{tH} g^\top$ ($t \in \mathbb{R}^n$) のようになる。これは P_n をユークリッド空間の部分空間とみたときの直線とは異なるものである。

この空間の上で凸関数を考えるときはユークリッド空間と等長になる部分空間に制限して考えるとみやすくなることがある。そのような部分空間で極大なものを極大フラット (maximal flat) という。 P_n の極大フラット F は、 $g \in GL_n(\mathbb{R})$ をもちいて、

$$F = \{ge^{\text{diag } \xi}g^\top \mid \xi \in \mathbb{R}^n\} \quad (3.1)$$

とかける. $\mathbb{R}^n \ni \xi \mapsto ge^{\text{diag } \xi}g^\top$ が, \mathbb{R}^n から F への等長写像である. P_n には, リー群 $GL_n(\mathbb{R})$ が $g \mapsto gxg^\top$ と推移的に作用していて, $x = I$ における固定部分群は直交群 $O(n)$ である. したがって, P_n は, 商多様体 $GL_n(\mathbb{R})/O(n)$ としても実現できる.

非正曲率対称空間 (symmetric space of nonpositive curvature) とは, このようにして構成されるアダマール多様体のことで, 双曲空間などを含む広いクラスを形成している. 対称空間の正式な定義と一般論は [24, 55, 61] や [62, IV, 6 節]などを参照. P_n の対称空間としての扱いは [9, Chapter II.10] が参考になる. $G \subseteq GL_n(\mathbb{R})$ を $G = G^\top$ を満たし, 有限個の多項式で定義されたリー群 (簡約代数群) とする. G の極大コンパクト部分群を $K = GL_n(\mathbb{R}) \cap O(n)$ とする. 商多様体 $M = G/K$ には, G の作用で不変なリーマン計量が入り, 得られるリーマン多様体が, 非正曲率対称空間である. より具体的には, 非正曲率対称空間とは, 正定値行列多様体 P_n と簡約代数群 G との交わりとして得られる P_n の部分空間 $P_n \cap G$ と考えてよい. $P_n \cap G$ は, P_n の全測地的部分空間であり, $G/K \ni gK \mapsto gg^\top \in P_n \cap G$ が等長写像になる.

$G = SL_n(\mathbb{R})$ (特殊線形群) のときは, 対称空間 $SL_n(\mathbb{R})/SO(n)$ は, $\det x = 1$ となる正定値行列の空間 $P_n \cap G = \{x \in P_n \mid \det x = 1\}$ である. $G = GL_n(\mathbb{C})$ のときは, 対称空間 $GL_n(\mathbb{C})/U(n)$ は, n 次正定値エルミート行列の空間であり, これも混乱がなければ P_n でかくことにする.

3.2. ユークリッドビルディング

多様体にはならない重要なアダマール空間としては, ユークリッドビルディング (Euclidean building) と呼ばれる空間がある. もっとも簡単なユークリッドビルディングは, どの枝も無限に伸びていくツリーである. ユークリッドビルディングは, アパートメント (apartement) と呼ばれるユークリッド空間のうまい貼り合わせとして定義される. ツリーの例では, 双方に無限にのびるパスがアパートメント ($\simeq \mathbb{R}$) となる. ビルディングの正式な定義は, [1] や [9, Chapter II. 10. Appendix]などを参照.

後の節で登場するユークリッドビルディングは, 以下のような空間である. \mathbb{K} を体として, \mathbb{K} 上のベクトル空間 \mathbb{K}^n を考える. ベクトル空間部分の極大包含列

$$\{0\} = U_0 \subset U_1 \subset \cdots \subset U_n = \mathbb{K}^n$$

のことをフラッグ (flag) という. \mathbb{K}^n のすべてのフラッグを考え, 各フラッグにユークリッド空間内の凸錐

$$\mathbb{R}_\downarrow^n := \{p \in \mathbb{R}^n \mid p_1 \geq p_2 \geq \cdots \geq p_n\}$$

を対応させ, それらを以下のようにして貼り合わせる. 点 $p \in \mathbb{R}_\downarrow^n$ とフラッグ U の対を $p \cdot U$ とかいて, これを「点」とする (擬) 距離空間を考える. 2つの点 $p \cdot U, q \cdot V$ の (擬) 距離を次のように定義する: \mathbb{K}^n の基底 $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ であって, U, V を生成できるものをとる. 番

号をつけかえることで

$$\begin{aligned}\mathcal{U} &= \text{span}\{u_1\} \subset \text{span}\{u_1, u_2\} \subset \cdots \subset \text{span}\{u_1, u_2, \dots, u_n\}, \\ \mathcal{V} &= \text{span}\{u_{\pi(1)}\} \subset \text{span}\{u_{\pi(1)}, u_{\pi(2)}\} \subset \cdots \subset \text{span}\{u_{\pi(1)}, u_{\pi(2)}, \dots, u_{\pi(n)}\},\end{aligned}$$

とできる. ここで π は Jordan-Hölder 置換とよばれる全単射で \mathcal{U}, \mathcal{V} にしかよらない. そして, $p \cdot \mathcal{U}, q \cdot \mathcal{V}$ の距離を

$$d(p \cdot \mathcal{U}, q \cdot \mathcal{V}) := \sqrt{\sum_{i=1}^n \|p_i - q_{\pi^{-1}(i)}\|^2} \quad (3.2)$$

と定義する. $d(p \cdot \mathcal{U}, q \cdot \mathcal{V}) = 0$ となる点と同一視することにより距離空間 (\mathcal{B}, d) が得られる. これがユークリッドビルディングになる. アパートメントは, \mathbb{K}^n の基底 $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ から生成されるフラッグ \mathcal{U} をもつ点 $p \cdot \mathcal{U}$ たちからなり, それは \mathbb{R}^n に等長である.

対称行列の空間 S_n にこのビルディングの構造が入る. 対称行列 $H \in S_n$ を固有値分解して, $H = \sum_{i=1}^n p_i u_i u_i^\top$ とかく. ここで, p_i は固有値, u_i は対応する固有ベクトル, $p_1 \geq p_2 \geq \cdots \geq p_n$ とならべて, $p \in \mathbb{R}_\downarrow^n$ と \mathbb{R}^n のフラッグ $\text{span}\{u_1\} \subset \text{span}\{u_1, u_2\} \subset \cdots \subset \text{span}\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ の対を対応させる. この対応によって, S_n と \mathcal{B} は全単射の関係にあり, (3.2) で距離を導入すれば S_n はユークリッドビルディングになる. この距離空間の位相は, ユークリッド空間の部分空間としての S_n の位相と異なることに注意する. エルミート行列の空間も, 同様の構成によってビルディングの構造がはいる.

4. 作用素スケールリングと非可換 Edmonds 問題

4.1. 作用素スケールリング

非負行列を線形写像 (作用素) とみると, それは, 非負ベクトルを非負ベクトルに写像する, という性質で特徴付けられる. その一般化として, 半正定値行列を半正定値行列に写像する線形写像を正值作用素という. さらに, 正值作用素の重要なクラスとして, 完全正作用素というものがある. Gurvits [21] は, 行列スケールリング・Sinkhorn アルゴリズムの枠組みを完全正作用素に対して拡張した. この拡張は量子情報科学と後に述べるシンボリックランク計算 (Edmonds 問題) に動機付けられている.

$n \times n$ 複素行列の空間 $\mathbb{C}^{n \times n}$ 上の完全正作用素 $T : \mathbb{C}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{C}^{n \times n}$ は, ある $n \times n$ 行列 $A_1, A_2, \dots, A_m \in \mathbb{C}^{n \times n}$ を用いて,

$$T(X) = \sum_{k=1}^m A_k X A_k^\dagger \quad (X \in \mathbb{C}^{n \times n})$$

とかけることによって特徴付けられる. ここで \dagger は共役転置を表す. T の転置写像 T^* は,

$$T^*(X) := \sum_{k=1}^m A_k^\dagger X A_k \quad (X \in \mathbb{C}^{n \times n})$$

と定義される.

T が「2重確率である」ということを「単位行列が単位行列に移る」という性質

$$T(I) = I, \quad T^*(I) = I$$

で定義する. この条件は

$$\sum_{k=1}^m A_k A_k^\dagger = I, \quad \sum_{k=1}^m A_k^\dagger A_k = I$$

ともかける. n 次正則行列 $g, h \in GL_n(\mathbb{C}^n)$ による T のスケーリング $T_{g,h}$ を

$$T_{g,h}(X) = \sum_{k=1}^m (g A_k h^\dagger) X (h A_k^\dagger g^\dagger)$$

と定義する.

2重確率作用素スケーリング問題 $A_1, A_2, \dots, A_m \in \mathbb{C}^{n \times n}$ が与えられたとき, 対応する完全正作用素 T は, 2重確率作用素にスケーリングできるか?

いいかえると,

$$\sum_{k=1}^m g A_k h^\dagger h A_k^\dagger g^\dagger = I, \quad \sum_{k=1}^m h A_k^\dagger g^\dagger g A_k h^\dagger = I \quad (4.1)$$

となる正則行列 $g, h \in GL_n(\mathbb{C})$ を見つけよ, という問題である.

行列スケーリングのときと同様に, 近似的なスケーリング可能性を考える. 任意の $\epsilon > 0$ に対して, ある正則行列 $g, h \in GL_n(\mathbb{C})$ が存在して,

$$\|T_{g,h}(I) - I\| < \epsilon, \quad \|T_{g,h}^*(I) - I\| < \epsilon \quad (4.2)$$

となるとき, T は近似的2重確率スケーリング可能という. ノルムはフロベニウスノルムである.

行列スケーリングのときと同様に, (4.1) の一番目の式からは, h を固定すると g はコレスキー分解で簡単にもとまる. 同様に2番目の式から g を固定すると h が求まる. すると, Sinkhorn アルゴリズムのアナロジーとして, 次のアルゴリズムが考えられる.

作用素 Sinkhorn アルゴリズム (Gurvits のアルゴリズム)

0: $g = h := I$

1: h を固定して, g を $g^\dagger g = (\sum_{k=1}^m A_k h^\dagger h A_k^\dagger)^{-1}$ で決める.

2: g を固定して, h を $h^\dagger h = (\sum_{k=1}^m A_k^\dagger g^\dagger g A_k)^{-1}$ で決める.

3: ステップ 1 に戻る.

定理 4.1 ([21]). T を $A_1, A_2, \dots, A_m \in \mathbb{C}^{n \times n}$ に対応する完全正作用素とする. 以下は同値である.

(a) T は近似的2重確率スケーリング可能である.

(b) $\inf \left\{ \frac{(\sum_{k=1}^m \operatorname{tr} X A_k Y A_k^\dagger)^n}{\det X \det Y} \mid X, Y : \text{正定値エルミート行列} \right\} > 0.$

(c) $u^\dagger A_k v = 0$ ($u \in U, v \in V$) となる任意のベクトル空間 U, V に対して,

$$\dim U + \dim V \leq n$$

が成り立つ.

(d) 作用素 Sinkhorn アルゴリズムによって T は 2 重確率作用素に収束する.

条件 (b) に対応する最適化問題は,

$$\inf. \quad n \log \sum_{k=1}^m \operatorname{tr} X A_k Y A_k^\dagger - \log \det X - \log \det Y \quad \text{s.t.} \quad X, Y : \text{正定値エルミート} \quad (4.3)$$

であるが, この問題の最適値 X, Y を $X = gg^\dagger, Y = hh^\dagger$ とコレスキー分解すると, g, h が求めるスケーリング行列となる. さらに, 作用素 Sinkhorn アルゴリズムは, (4.3) の交互最適化 (Y を固定して X で解く, X を固定して Y を解く) とみなすことができる.

Garg, Gurvits, Oliveira, Wigderson [18] は, 作用素 Sinkhorn アルゴリズムの多項式回反復によって, 定理 4.1 の (同値な) 条件が判定できることを示した.

定理 4.2 ([18]). 作用素 Sinkhorn アルゴリズムの多項式回反復によって近似スケーリング可能性が判定できる.

この結果は, 2.4 節で述べた行列スケーリングによる完全マッチング判定 (定理 2.2) の一般化とみなせる. 証明も定理 2.2 のときと同様にすすむ. 1 反復の目的関数の減少量の評価については既知であって, [18] の貢献は, 問題 (4.3) が有界 $> -\infty$ のときに, 目的関数の下限の評価を与えたことである. この成果がもたらした発展を以降で述べていく.

問題 (4.3) は, 正定値行列錐 P_n 上の最適化であるが, 通常の意味での凸最適化ではない. しかし, 3.1 節に述べたように P_n をリーマン多様体としてみると, 目的関数は測地線にそって凸になる. すなわち (4.3) は測地的凸最適化問題となる.

定理 4.3. (4.3) の目的関数は, $P_n \times P_n$ 上測地的凸である.

実際, P_n の極大フラット $(\xi, \eta) \mapsto (g e^{\operatorname{diag} \xi} g^\dagger, h e^{\operatorname{diag} \eta} h^\dagger)$ 上で凸であることをみる. 代入によって

$$n \log \sum_{i,j,k} |(g^\dagger A_k h)_{ij}|^2 e^{\xi_i + \eta_j} - \mathbf{1}^\top \xi - \mathbf{1}^\top \eta - \log |\det g|^2 - \log |\det h|^2 \quad (4.4)$$

となるが, これは幾何計画の目的関数 (凸関数) に他ならない.

Sinkhorn のアルゴリズムと同様に, 作用素 Sinkhorn アルゴリズムも ϵ -近似スケーリング (4.2) を求めるアルゴリズムとしては擬多項式時間アルゴリズムである. Allen-Zhu たち [2] は, 目的関数の 2 次近似から得られる接空間上の凸 2 次計画を各反復で解く信頼領域法アルゴリズムを (4.3) に適用して精度 ϵ に関する依存性が $\log 1/\epsilon$ となる多項式時間アルゴリズムを提案している. Franks [14] は, マージナルが指定された作用素スケーリング問題の拡張を定式化し, 作用素 Sinkhorn アルゴリズム (の拡張) によって, 乱択擬多項式時間アルゴリズムを得ている. 作用素スケーリングのその他の話題については, [19] も参照.

4.2. Edmonds 問題

A_1, A_2, \dots, A_m を一般の体 \mathbb{K} 上の $n \times n$ 行列とする. 変数 x_1, x_2, \dots, x_m を係数とする行列

$$A = A_1x_1 + A_2x_2 + \dots + A_mx_m \quad (4.5)$$

を考える. このような行列を線形シンボリック行列と呼ぶことがある. A を多項式環 $\mathbb{K}[x_1, x_2, \dots, x_m]$, そして, その有理関数体 $\mathbb{K}(x_1, x_2, \dots, x_m)$ の行列とみて, A のランクを決定する問題を考える. この問題は, いろいろな分野において基本的な問題となっていて, Edmonds 問題と呼ばれることもある. 例えば, フレームワークの剛性の判定問題や, あるクラスの組合せ最適化問題は, Edmonds 問題として定式化することができる [44]. 体 \mathbb{K} のサイズが大きいときは, 各変数 x_i に \mathbb{K} の元をランダムに代入してから, ガウスの消去法で \mathbb{K} 上のランクを計算すれば, 高い確率で, A のランクを計算することができる. 実際, この方法で多項式時間の乱択アルゴリズムが設計される [43]. しかし, 決定性多項式時間でできるかはわかっておらず, 理論計算機科学においても, PIT (多項式恒等性判定) や回路計算量とも関連して重要な未解決問題となっている.

Ivanyos, Qiao, Subrahmanyam [34] は, 変数たちが非可換である $x_ix_j \neq x_jx_i$ とした非可換 Edmonds 問題を定式化した. まず, (4.5) の行列 A を非可換多項式環 $\mathbb{K}\langle x_1, x_2, \dots, x_m \rangle$ の元とみる. 非可換多項式環 $\mathbb{K}\langle x_1, x_2, \dots, x_m \rangle$ は, 自由斜体 (free skew field) と呼ばれる斜体 (可除環) $\mathbb{K}(\langle x_1, x_2, \dots, x_m \rangle)$ に埋め込まれる [4]. その斜体上で, A のランクが定義できる. これを非可換ランクといって $\text{nc-rank } A$ とかく. $\text{nc-rank } A = n$ のときは, nc-正則であるということにする. 非可換ランクは, 次の最適化問題の最適値によって与えられる.

定理 4.4 (Fortin, Reutenauer [13]). 非可換ランク $\text{nc-rank } A$ は, 次の問題の最適値に等しい:

$$\begin{aligned} \min. \quad & 2n - \dim U - \dim V \\ \text{s.t.} \quad & A_k(U, V) = \{0\} \quad (k \in [m]), \\ & U, V \subseteq \mathbb{K}^n : \text{ベクトル部分空間.} \end{aligned} \quad (4.6)$$

ここで, 各行列 A_k を $(u, v) \mapsto u^\top A_k v$ によって双線形形式 $A_k : \mathbb{K}^n \times \mathbb{K}^n \rightarrow \mathbb{K}$ とみている. 特に, A が nc-正則であることと, $A_k(U, V) = \{0\}$ ($\forall k$) となる任意のベクトル空間 $U, V \subseteq \mathbb{K}^n$ に対して, $\dim U + \dim V \leq n$ となることは同値である. これは, $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ のときは, 定理 4.1 の条件 (c) に他ならない. したがって,

定理 4.5 ([18]). $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ のとき, 非可換ランクは多項式時間で計算できる.

その後すぐに Ivanyos, Qiao, Subrahmanyam [35] は, 任意の体 \mathbb{K} で非可換ランクを計算する多項式時間アルゴリズムを示した. 問題 (4.6) は, 2 部マッチング問題の一般化であるが, 彼らのアルゴリズム (IQS アルゴリズム) は, 交互道アルゴリズムの代数的一般化 (Wong sequence) と斜体の元による最大ランク行列補完に基づく大変興味深いもので, プライマルとデュアルの最適性の証拠, 特に (4.6) の最適解, を出力する. ただし, アルゴリズムも大変複

雑である。

そのような流れを独立に Hamada, Hirai [22] は、問題 (4.6) を考察していて、問題構造のもつ劣モジュラ性を利用する多項式時間アルゴリズムを提案している。問題 (4.6) は、ベクトル部分空間のなすモジュラ束上の劣モジュラ最適化とみなすことができる。通常の劣モジュラ関数 $f: \{0, 1\}^n \rightarrow \mathbb{R}$ が Lovász 拡張によって凸関数 $\bar{f}: [0, 1]^n \rightarrow \mathbb{R}$ に拡張されたように、そして、Lovász 拡張によってアダマール空間上の測地的凸最適化問題へと拡張される [26]。具体的には、3.2 節で述べたユークリッドビルディング上の凸最適化問題

$$\begin{aligned} \min. \quad & 2n - \sum_i p_i - \sum_j q_j + \sum_k g_k(p \cdot \mathcal{U}, q \cdot \mathcal{V}) \\ \text{s.t.} \quad & p, q \in \mathbb{R}_+^n \cap [0, 1]^n, \mathcal{U}, \mathcal{V}: \mathbb{K}^n \text{ のフラッグ} \end{aligned} \quad (4.7)$$

と拡張される。ここで、 g_k は制約 $A_k(U, V) = \{0\}$ をペナルティ項にした凸関数である。Hamada, Hirai [22] は、目的関数の分離性を利用して、アダマール空間上の分割近接点法 (Bačák [5]) とその収束評価 (Ohta, Pálfi [46]) を応用することで多項式時間アルゴリズムを示した。このアルゴリズムは、体 \mathbb{K} が何であっても特別な工夫を必要とせず、原理的にはシンプルなアルゴリズムで問題 (4.6) の最適解を出力する。しかし、アルゴリズム内でベクトル部分空間 (の基底) を更新を行うことから、 $\mathbb{K} = \mathbb{Q}$ のときは、基底を表現するビット長が指数的に大きくなる可能性が排除できていない。[22] では、その問題を回避するため、 p 進付値を用いて、有限体 GF_p 上の問題に多項式時間帰着させる手法も導入している。ただし、(4.6) の最適値は得られるが、最適解は得られない。

問題 (4.6) の最適解を出力することは、現在のところかなり難しく、一般の体で動くのは IQS アルゴリズムのみのものである。作用素 Sinkhorn アルゴリズムに基づく [18] のアルゴリズムもその動作原理から nc-非正則性の証拠、すなわち、条件 (c) をやぶるベクトル空間 $U, V \subseteq \mathbb{C}^n$ を出力しない。最近になって、Franks, Soma, Goemans [15] は、作用素 Sinkhorn アルゴリズムを修正して多項式回反復で (4.6) の最適解を求めるアルゴリズムを与えている。しかし、こちらもなかなか大変なアルゴリズムである。

Edmonds 問題は、名前のとおり、J. Edmonds [12] によって導入されたもので組合せ最適化がルーツである。したがって、非可換 Edmonds 問題の導入・発展は、組合せ最適化にも強く影響をあたえている。実際、非可換ランク計算にインスパイアされた新しいアルゴリズムの設計や非可換ランク計算を拡張した非可換行列次数計算の導入とその組合せ最適化・多面体的組合せ論へのフィードバックが展開されてきている。この方面の発展については、スライド資料 [59]、最近の論文 [27, 29, 30, 36, 47]、解説記事 [56, 57] を参照されたい。これらの研究においても、上の問題 (4.7) のようなユークリッドビルディング上の凸最適化 (の離散化) が現れる。

5. 話題

5.1. Brascamp-Lieb 不等式

Brascamp-Lieb 不等式 [8, 41] とは, 全射線形写像 $B_j : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n_j}$ と非負実数 $p_j \in \mathbb{R}_+$ ($j = 1, 2, \dots, m$) の組をパラメータ (BL データ) として, 任意の非負可測関数 $f_j : \mathbb{R}^{n_j} \rightarrow \mathbb{R}_+$ ($j = 1, 2, \dots, m$) に対して

$$\int_{x \in \mathbb{R}^n} \prod_{j=1}^m f_j(B_j x)^{p_j} dx \leq C_{\text{BL}} \prod_{j=1}^m \left(\int_{x_j \in \mathbb{R}^{n_j}} f_j(x_j) dx_j \right)^{p_j} \quad (5.1)$$

が成り立つというものである. 定数 C_{BL} (BL 定数) は

$$C_{\text{BL}} := \left(\inf_{X_j} \frac{\det \sum_{j=1}^m p_j B_j^\top X_j B_j}{\prod_{j=1}^m (\det X_j)^{p_j}} \right)^{-\frac{1}{2}} \in [0, \infty), \quad (5.2)$$

で与えられる. ここで \inf は各 $j \in [m]$ についてサイズ n_j の正定値行列 X_j にわたってとる. Hölder の不等式などの重要な不等式が特別な場合として一挙に導かれる. 例えば, Cauchy-Schwarz の不等式は, BL データが $p_1 = p_2 = 1/2, B_1 = B_2 = I$ の場合である.

BL 定数にあわられる最適化問題は,

$$\inf. \log \det \sum_{j=1}^m p_j B_j^\top X_j B_j - \sum_{j=1}^m p_j \log \det X_j \quad \text{s.t. } X_j: \text{正定値対称 } (j \in [m]). \quad (5.3)$$

であるが, 目的関数は $P_{n_1} \times P_{n_2} \times \dots \times P_{n_j}$ 上測地的凸であり, 測地的凸最適化問題となる. Brascamp-Lieb 不等式が意味をもつのは, $C_{\text{BL}} < \infty$ の場合であるが, そのときの特徴付けは以下のようなになる.

定理 5.1 (Bennet, Carbery, Christ, Tao [6]). 以下は同値 :

- (1) $C_{\text{BL}} < \infty$.
- (2) $\sum_{j=1}^m p_j n_j = n$ を満たし, 任意のベクトル部分空間 $V \subseteq \mathbb{R}^n$ に対し不等式 $\sum_{j=1}^m p_j \dim B_j V \geq \dim V$ を満たす.

Garg, Gurvits, Oliveira, Wigderson [17] は, 各 p_j が有理数のとき, 問題 (5.3) が, 作用素スケーリングの最適化問題に帰着することを示し, 作用素スケーリングを用いて, C_{BL} の有限性の判定と C_{BL} の計算をする擬多項式時間アルゴリズムを与えている.

C_{BL} の有限性の判定は, p_j が定理 5.1 の条件 (2) で定義される有理多面体 (BL 多面体) に入っているかと問うメンバシップ問題である. BL 多面体は, 組合せ最適化からみても興味深い. もしも, すべて $n_j = 1$ なら, BL 多面体は B_j の行ベクトルたちがつくる線形マトロイドのマトロイド基多面体に一致する. Franks, Soma, Goemans [15] は, $n_j = 2 (\forall j)$ の場合, BL 多面体は, B_j の行ベクトルたちから定義される完全分数マトロイドマッチング多面体に一致することを示している. したがって, 分数マトロイドマッチング上の線形最適化によって, BL 多面体のメンバシップが解けることになる. 分数マトロイドマッチング上の線形最適化につい

て Gijswijt, Pap [20] が多項式時間アルゴリズムを与えていたが、このアルゴリズムは、ビット複雑度が多項式サイズにおさえられる保証がない。Franks, Soma, Goemans [15] は、この事実を指摘して、修正された作用素 Sinkhorn アルゴリズムを用いることで、ランク 2 の BL 多面体のメンバシップ問題が $NP \cap co-NP$ に入っていることを示した。Hirai, Iwamasa, Oki, Soma [31] では、非可換行列式次数計算の枠組みから、この線形最適化がビット複雑度を考慮したうえでも多項式時間で解けることを示し、ランク 2 の BL 多面体のメンバシップの多項式時間可解性が示された。

一般の BL 多面体のメンバシップが、 $NP \cap co-NP$ に入っているか、多項式時間で解けるかどうか、はわかっていない。なお、BL 多面体のメンバシップは、最適化問題

$$\min. \quad \dim V - \sum_{j=1}^m p_j \dim B_j V \quad \text{s.t.} \quad V \subseteq \mathbb{R}^n : \text{ベクトル部分空間} \quad (5.4)$$

を帰着するが、これもベクトル部分空間のなすモジュラ束上の劣モジュラ最適化であり、(4.7) のようなユークリッドビルディング上の凸最適化へと拡張される。Hamada, Hirai [22] のアプローチも適用はできるが、計算量に p_j が入り、多項式時間アルゴリズムにはならず、ビット長の指数爆発の問題も残る。

5.2. 群軌道上のノルム最小化問題

作用素スケーリング、BL 不等式で現れたような測地的凸最適化問題は、さまざまな分野に現れることがわかってきた。Bürgisser たち [10] は、それらを統合して「群軌道上のノルム最小化問題」として定式化した。 $G \subseteq GL_n(\mathbb{C})$ を \mathbb{C} 上の簡約代数群とする。すなわち有限個の多項式で定義された $GL_n(\mathbb{C})$ の部分群で、 $g \in G$ ならば $g^\dagger \in G$ を満たすものとする。 $\pi : G \rightarrow GL_N(\mathbb{C})$ を有理表現とする。非ゼロベクトル $v \in \mathbb{C}^N$ の軌道 $\pi(G)v = \{\pi(g)v \mid g \in G\}$ 上でノルムを最小化する問題を考える。すなわち、

$$\inf. \quad \log \|\pi(g)v\| \quad \text{s.t.} \quad g \in G \quad (5.5)$$

を考える。表現空間の内積・ノルムとして、 G の極大コンパクト部分群 $K = G \cap U(n)$ 上で、不変 $\|\pi(k)v\| = \|v\| (\forall k \in K)$ となるものを考える。例えば、作用素スケーリングのときは、 $G = SL_n(\mathbb{C}) \times SL_n(\mathbb{C})$ 、表現空間を $\mathbb{C}^{n \times n \times m} = \{(A_1, A_2, \dots, A_m) \mid A_i \in \mathbb{C}^{n \times n}\}$ 、表現 $\pi : G \rightarrow GL_{n \times n \times m}(\mathbb{C})$ を $\pi(g, h) := (gA_1h^\dagger, gA_2h^\dagger, \dots, gA_mh^\dagger)$ 、ノルムを l_2 ノルムとすると $SU(n) \times SU(n)$ -不変で、(5.5) は (4.3) と一致する。(4.3) では、 $\det X = \det Y = 1$ に制限してよいことに注意する。行列スケーリングも同様の定式化ができる。

この問題 (5.5) が、非正曲率対称空間 $P_n \cap G$ 上の凸最適化問題となることをみる。まず、 $\|\pi(g)v\|^2 = \langle \pi(g)v, \pi(g)v \rangle = \langle v, \pi(g)^\dagger \pi(g)v \rangle = \langle v, \pi(g^\dagger) \pi(g)v \rangle = \langle v, \pi(g^\dagger g)v \rangle$ で、 $g^\dagger g \in P_n \cap G$ であるから、以下の問題と同値である：

$$\inf. \quad f_v(x) := \log \langle v, \pi(x)v \rangle \quad \text{s.t.} \quad x \in P_n \cap G. \quad (5.6)$$

定理 5.2 ([10]). 目的関数 f_v は, $P_n \cap G$ 上測地的凸関数である.

$G = GL_n(\mathbb{C})$ のときを考える. P_n の極大フラットは, $\{g^\dagger e^{\text{diag } \xi} g \mid \xi \in \mathbb{R}^n\}$ のようにかける. 表現 π を可換部分群 $(e^{\text{diag } \xi})_{\xi \in \mathbb{R}^n}$ に制限すると同時対角可能なので, 有限集合 $\Omega(\pi) \subseteq \mathbb{R}^n$ (π のウェイトの集合) によって

$$f_v(g^\dagger e^{\text{diag } \xi} g) = \log \langle v, \pi(g^\dagger) \pi(e^{\text{diag } \xi}) \pi(g) v \rangle = \log \sum_{\omega \in \Omega(\pi)} \|(\pi(g)v)_\omega\|^2 e^{\omega^\top \xi}$$

とかける. ここで, $(\cdot)_\omega$ は ω に対応する固有空間への直交射影である. これは幾何計画の目的関数 (凸関数) である.

この設定のもとで, スケーリング可能性の特徴付け (定理 2.1, 定理 4.1) は, 次のように一般化される.

定理 5.3 (Kempf-Ness の定理 & Hilbert-Mumford の規準). 以下は同値である :

- (a) $\inf_{x \in P_n \cap G} \|\nabla f_v(x)\| = 0$.
- (b) $\inf_{x \in P_n \cap G} f_v(x) > -\infty$.
- (c) G は, $\lim_{t \rightarrow \infty} \pi(e^{ht})v = 0$ となるワンパラメータ部分群 $t \mapsto e^{ht}$ をもたない.

(a) と (b) の同値性が Kempf-Ness の定理より従い, (c) が Hilbert-Mumford の規準である. これらは不変式論 (たとえば [54]) の結果であるが, 行列スケーリングの数理がこのような形で一般化されて理解されるのは大変興味深い.

Bürgisser たち [10] は, 多様体 $P_n \cap G$ 上の勾配法にもとづく勾配ノルムが ϵ 以下の解を求めるアルゴリズム, 信頼領域法にもとづく最適値との加法的誤差 ϵ 以下の解を求めるアルゴリズムをあたえている. 前者は, ユークリッド空間上の L 平滑関数に対する最急降下法 (ステップサイズ $1/L$) のときの議論のダイレクトな拡張で, 反復回数のオーダーが $1/\epsilon^2$ に比例する. 後者は, [2] の拡張で, 反復回数の精度パラメータ ϵ に対する依存性が $\log 1/\epsilon$ に改良されているが, 表現 π から決まる他のパラメータに関して指数的である. [10] では, 関連する他の問題 (p -スケーリング問題, モーメント多面体メンバシップ) も扱っている.

5.3. 多様体上の多項式時間内点法への挑戦

前節の問題群においては, 「すべての入力パラメータに対して多項式時間のアルゴリズムをつくれるか?」が1つの焦点となっている. Franks, Reidenbach [16] は, 求めたい ϵ -近似解が「指数的に遠くにある」インスタンスを構成した. それにより, 信頼領域法などのステップ幅が固定された反復アルゴリズムでは, 一般に多項式時間アルゴリズムを得られないことがわかった. したがって, 多項式時間アルゴリズムの設計に向けては, 行列スケーリングや幾何計画問題に多項式時間アルゴリズムをもたらした楕円体法や内点法を対称空間 $P_n \cap G$ 上へと拡張することが1つの自然なアプローチと考えられる.

多様体上の楕円体法に関わる結果として, Rusciano [50] によるアダマール多様体上の (非構成的な) 切除平面法の研究がある. そこでは, 凸関数の最適解を含む領域の体積を指数的に減少させる (劣勾配から決まる) 切除平面の列の存在が示されている. これは, 楕円体法の多

項式性の根拠となる性質である。しかし、ユークリッド空間の時とは異なり、体積が直径に対して指数的になりうる。例えば、双曲空間の半径 R の球の体積は、 $O(e^R)$ である。したがって、最適解が指数的に遠くにある状況においては、実装できたとしても多項式時間アルゴリズムにはならない。この方面の研究は [11] も参照。

内点法はどうか。実は、Nesterov, Nemirovskii [45] による凸最適化に対する多項式時間内点法の一般的枠組み（自己整合関数の理論）を多様体で考える試みは、Udriste [53], Jiang, Moore, Ji [37] にある。そこでは、 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ が α -自己整合 (self-concordant) の定義をユークリッドのときのダイレクトな拡張として共変微分 ∇ を用いて、

$$|(\nabla^3 f)_x(u, u, u)| \leq \frac{2}{\sqrt{\alpha}} |(\nabla^2 f)_x(u, u)|^{3/2} \quad (x \in M, u \in T_x) \quad (5.7)$$

としている。パス追跡法の枠組みに必要な Newton 法の局所 2 次収束性と Newton decrement による数値的 2 次収束性保証を示すには、条件

$$|(\nabla^3 f)_x(u, u, v)| \leq \frac{2}{\sqrt{\alpha}} (\nabla^2 f)_x(v, v)^{1/2} (\nabla^2 f)_x(u, u) \quad (x \in M, u, v \in T_x) \quad (5.8)$$

を使うことになる。ユークリッド空間のときは、共変微分が可換 (= 曲率テンソルがゼロ) で、 $\nabla^3 f$ が対称 3 次形式となり、(5.7) と (5.8) は同値となる [45, Appendix 1]。しかし、曲率テンソルがゼロでないときは、 $\nabla^3 f$ は対称とならず、(5.7) と (5.8) は同値ではない。論文 [37, 53] では、この点が考慮されておらず、他にも不明瞭な点が散見される。

Hirai, Nieuwboer, Walter [32] では、この事実を指摘したうえで、(5.8) を自己整合関数の定義として、多項式時間パス追跡法の枠組みを多様体上へと拡張している ([28] も参照)。その証明の多くは、ユークリッド空間のときの議論 [45] をダイレクトに多様体上に拡張していくものであるが、強い定義 (5.8) を使うためにいくつかの場面で工夫が必要となる。

自己整合の条件 (5.8) を具体的な関数に対して示すのは、かなり大変な計算を要する。[32] では、複雑な計算のすえ対称空間上の 2 乗距離関数 (凸関数) の自己整合性を証明した。

定理 5.4 ([32]). 非正曲率対称空間 $P_n \cap G$ において、 $x \mapsto d(I, x)^2$ は、2-自己整合である。

さらに対数バリア関数の構成法により、バリアパラメータ θ が $O(R^2)$ の半径 R の距離球の自己整合バリア関数 F_R を構成している。しかし、パス追跡法の反復回数は $\sqrt{\theta}$ に比例するので、このバリアでは最適解が遠くにある場合の困難性を突破することはできない。とはいえ、具体的な問題への応用が示されている。[32] では、ノルム最小化問題 (5.5) の目的関数 f_v に対しては、 $tf_v + F_R$ ($\forall t$) が $1/N(\pi)^2$ -自己整合であることを示し、半径 R の距離球内の ϵ -近似解を求める $O(RN(\pi) \log RN(\pi)/\epsilon)$ 反復のパス追跡法を示した。 $N(\pi)$ は、表現 π のウェイトの最大ノルムである。これは、信頼領域法による [10] のものと同性能である。さらに、その他の問題 (非正曲率対称空間上の最小包含球問題、双曲空間上のメディアン問題) にこの枠組みを適用して、精度 ϵ の依存性が $\log 1/\epsilon$ となるはじめてのアルゴリズムを構成している。バリア F_R を使うので、最適解の存在が保証される距離球の半径 R の依存性を取りのぞくことはでき

ていない.

5.4. アダマール空間上の凸解析の試み

2.4節でみたように行列スケーリングのときは、後退関数を用いて有界性と同値な条件 (c) を導くことができた. そこで、一般のアダマール空間上でも後退関数にあたるものを考えることは自然であろう. 実際、微分幾何学の文脈において、Kapovich, Leeb, Millson [40] は、凸関数の漸近傾き (asymptotic slope) という概念を導入し、Hilbert-Mumford の規準との関係を示している. Hirai [25] では、この考え方を最適化・凸解析的に拡張して上述の問題へと応用している. アダマール空間 M 上では、後退関数は、 M の無限遠境界 (boundary at infinity) 上の関数と定義される. そのために境界を定義しよう (くわしくは [9, Part II, Chapter 8] を参照). 無限に伸びる測地線 $t \mapsto c(t)$ ($t \in \mathbb{R}_+$) の集合に「漸近的である」という同値関係をいれる: 2つの測地線 $c(t), c'(t)$ が漸近的 $\Leftrightarrow \exists C : d(c(t), c'(t)) < C (\forall t \in \mathbb{R}_+)$. 無限に伸びる測地線の集合をこの同値関係で割った集合を M の無限遠境界と呼んで M^∞ であらわす. さらにその錐 $CM^\infty := (M^\infty \times \mathbb{R}_+) / \sim$ を考える: $(\xi, r) \sim (\xi', r') \Leftrightarrow (\xi, r) = (\xi', r')$ or $r = r' = 0$. 空間 CM^∞ は定速測地線 $t \mapsto c(rt)$ の同値類である. M が多様体のときは、接空間 T_x の元 v に定速測地線 $t \mapsto \exp_x tv$ を対応させることで、 T_x と CM^∞ の間の全単射が得られる. これにより CM^∞ の位相 $\simeq T_x$ が誘導される. この位相 (錐位相) は x の取り方によらない. CM^∞ にはそれとは異なる位相を持つ距離空間の構造が入る. 2点 $p = (\xi, r), q = (\xi', r') \in CM^\infty$ の距離 $d^\infty(p, q)$ を

$$d^\infty(p, q)^2 = r^2 + r'^2 - 2rr' \inf_{x \in M} \langle v, v' \rangle \quad (5.9)$$

で定義する. ここで、測地線 $t \mapsto \exp_x tv, t \mapsto \exp_x tv'$ の同値類が、 $\xi, \xi' \in CM^\infty$ となるものとする. 得られる距離空間 (CM^∞, d^∞) はアダマール空間になり、その上で凸性が議論できる.

この設定のもとで、凸関数 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ の後退関数 $f^\infty : CM^\infty \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ を

$$f^\infty(p) := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{f(c(t)) - f(c(0))}{t} \quad (p \in CM^\infty) \quad (5.10)$$

と定義する. ここで、 c は定速測地線で同値類が p となるもので、 $f^\infty(p)$ は、 c の取り方によらず決まる. [40] では、漸近傾きを M^∞ 上の定義しており、後退関数 f^∞ はそれを正斉次的に拡張したものである. ユークリッド空間のときのアナロジーとして以下がなりたつ.

定理 5.5 ([25]). f^∞ は正斉次凸関数である.

また、定義から

$$\inf_{x \in M} f(x) > \infty \text{ ならば } f^\infty(p) \geq 0 \quad (\forall p \in CM^\infty)$$

がすぐわかるが、ノルム最小化問題の目的関数 f_v においては、逆方向も成立する. 特に、定理 5.3 の Hilbert-Mumford の規準 (c) は

$$f_v^\infty(p) \geq 0 \quad (\forall p \in CM^\infty).$$

ともかくことができる。この条件は、境界 CM^∞ 上の f_v^∞ を最小化する凸最適化によって判定できる。対称空間 M の境界 CM^∞ はユークリッドビルディングになることが知られており、ユークリッドビルディング上の凸最適化である。特に、 $M = P_n$ のときは、境界 CM^∞ は、接空間 T_l との同一視によってエルミート行列の空間とみなせるが、 (CM^∞, d^∞) は、3.2 節の方法でビルディングの構造をいれたものと等長となる。この事実は、これまでみてきた P_n 上の測地的凸最適化とベクトル部分空間の最適化の関係を統一的に説明するものである。

[25] では、さらに、境界 CM^∞ を「 M の双対空間」のように扱う凸解析的理論を展開している。たとえば、勾配 $\nabla f(x) \in T_x$ から、定速測地線 $t \mapsto \exp_x t \nabla f(x)$ の同値類として $\nabla^\infty f(x) \in CM^\infty$ を定義することができる。 $x \mapsto \nabla^\infty f(x)$ は勾配写像のアナロジーである。また、 CM^∞ の各点 p には、アフィン関数のアナログとして Busemann 関数 b_p という凸関数を対応させることができる。 $M = \mathbb{R}^n$ のときは、 $CM^\infty = \mathbb{R}^n$ で、Busemann 関数は、アフィン関数 $x \mapsto -\langle p, x \rangle$ である。すると、 $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ の共役関数 $f^* : CM^\infty \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ が

$$f^*(p) := \sup_{x \in M} -b_p(x) - f(x) \quad (x \in M) \quad (5.11)$$

と定義される。 f^* は凸関数とは限らないが、 M が対称空間のときは、ビルディング CM^∞ を構成する各錐のうえでは凸関数になる。 [25] では、これらの概念を用いて、等式 (2.8) のアナロジーやノルム最小化問題 (5.5) を一般化した p -スケールリング問題やモーメント多面体メンバシップ問題を議論している。

謝辞

発表の機会をいただいたオーガナイザーの塩浦昭義先生に感謝します。

参考文献

- [1] P. Abramenko and K. S. Brown. *Buildings*. Springer, New York, 2008.
- [2] Z. Allen-Zhu, A. Garg, Y. Li, R. Oliveira, and A. Wigderson. Operator scaling via geodesically convex optimization, invariant theory and polynomial identity testing. In *Proceedings of the 50th Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing (STOC)*, pp. 172–181, 2018.
- [3] Z. Allen-Zhu, Y. Li, R. Oliveira, and A. Wigderson. Much faster algorithms for matrix scaling. In *Proceedings of the 58th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS)*, pp. 890–901. 2017.
- [4] S. A. Amitsur. Rational identities and applications to algebra and geometry. *Journal of Algebra*, Vol. 3, pp. 304–359, 1966.
- [5] M. Bačák. *Convex Analysis and Optimization in Hadamard spaces*. De Gruyter, Berlin, 2014.
- [6] J. Bennett, A. Carbery, M. Christ, and T. Tao. The Brascamp-Lieb inequalities: Finiteness, structure and extremals. *Geometric and Functional Analysis*, Vol. 17, pp. 1343–1415, 2008.
- [7] N. Boumal. *An Introduction to Optimization on Smooth Manifolds*. Cambridge University Press, Cambridge, 2023.
- [8] H. Brascamp and E. Lieb. Best constants in Young’s inequality, its converse, and its generalization to more than three functions. *Advances in Mathematics*, Vol. 20, pp. 151–173, 1976.

- [9] M. R. Bridson and A. Haefliger. *Metric Spaces of Non-Positive Curvature*. Springer-Verlag, Berlin, 1999.
- [10] P. Bürgisser, C. Franks, A. Garg, R. Oliveira, M. Walter, and A. Wigderson. Towards a theory of non-commutative optimization: Geodesic 1st and 2nd order methods for moment maps and polytopes. In *Proceedings of the 60th IEEE Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS)*, pp. 845–861, 2019.
- [11] C. Criscitiello, D. Martínez-Rubio, and N. Boumal. Open problem: Polynomial linearly-convergent method for g-convex optimization? In *Proceedings of the 36th Conference on Learning Theory (COLT)*, pp. 5950–5956, 2023.
- [12] J. Edmonds. Systems of distinct representatives and linear algebra. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, Vol. 71B, pp. 241–245, 1967.
- [13] M. Fortin and C. Reutenauer. Commutative/non-commutative rank of linear matrices and subspaces of matrices of low rank. *Séminaire Lotharingien de Combinatoire*, Vol. 52, No. B52f, 2004.
- [14] C. Franks. Operator scaling with specified marginals. In *Proceedings of the 50th Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing (STOC)*, pp. 190–203. ACM, New York, 2018.
- [15] C. Franks, T. Soma, and M. X Goemans. Shrunk subspaces via operator sinkhorn iteration. In *Proceedings of the 2023 Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms (SODA)*, pp. 1655–1668, 2023.
- [16] W. C. Franks and P. Reichenbach. Barriers for recent methods in geodesic optimization. In *Proceeding of the 36th Computational Complexity Conference (CCC)*, Vol. 200 of *LIPIcs*. 2021. Article Number 13, 54 pages.
- [17] A. Garg, L. Gurvits, R. Oliveira, and A. Wigderson. Algorithmic and optimization aspects of Brascamp-Lieb inequalities, via operator scaling. *Geometric and Functional Analysis*, Vol. 28, pp. 100–145, 2018. (the conference version in STOC 2017).
- [18] A. Garg, L. Gurvits, R. Oliveira, and A. Wigderson. Operator scaling: theory and applications. *Foundations of Computational Mathematics*, Vol. 20, pp. 223–290, 2020. (the conference version in FOCS 2016).
- [19] A. Garg and R Oliveira. Recent progress on scaling algorithms and applications. *Bulletin of the European Association for Theoretical Computer Science. EATCS*, Vol. 125, pp. 14–49, 2018.
- [20] D. Gijswijt and G. Pap. An algorithm for weighted fractional matroid matching. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, Vol. 103, pp. 509–520, 2013.
- [21] L. Gurvits. Classical complexity and quantum entanglement. *Journal of Computer and System Sciences*, Vol. 69, pp. 448–484, 2004.
- [22] M. Hamada and H. Hirai. Computing the nc-rank via discrete convex optimization on CAT(0) spaces. *SIAM Journal on Applied Geometry and Algebra*, Vol. 5, pp. 455–478, 2021.
- [23] K. Hayashi, H. Hirai, and K. Sakabe. Finding Hall blockers by matrix scaling. *Mathematics of Operations Research*. to appear.
- [24] S. Helgason. *Differential Geometry, Lie Groups, and Symmetric Spaces*. Academic Press, New York-London, 1978.
- [25] H. Hirai. Convex analysis on Hadamard spaces and scaling problems. *Foundation of Computational Mathematics*. to appear.
- [26] H. Hirai. L-convexity on graph structures. *Journal of the Operations Research Society of Japan*, Vol. 61, pp. 71–109, 2018.
- [27] H. Hirai. Computing the degree of determinants via discrete convex optimization on Euclidean buildings. *SIAM Journal on Applied Geometry and Algebra*, Vol. 3, pp. 523–557, 2019.
- [28] H. Hirai. On a manifold formulation of self-concordant functions, 2023. arXiv:2212.10981.

- [29] H. Hirai and M. Ikeda. A cost-scaling algorithm for computing the degree of determinants. *Computational Complexity*, Vol. 31, No. 10, 2022.
- [30] H. Hirai and Y. Iwamasa. A combinatorial algorithm for computing the rank of a generic partitioned matrix with 2×2 submatrices. *Mathematical Programming, Series A*, Vol. 195, pp. 1–37, 2022. (the conference version in IPCO 2020).
- [31] H. Hirai, Y. Iwamasa, T. Oki, and T. Soma. Algebraic combinatorial optimization on the degree of determinants of noncommutative symbolic matrices. 2023. arXiv:2310.15502.
- [32] H. Hirai, H. Nieuwboer, and M. Walter. Interior-point methods on manifolds: theory and applications. 2023. arXiv:2303.04771, to appear in FOCS 2023.
- [33] J.-B. Hiriart-Urruty and C. Lemaréchal. *Fundamentals of Convex Analysis*. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [34] G. Ivanyos, Y. Qiao, and K. V. Subrahmanyam. Non-commutative Edmonds’ problem and matrix semi-invariants. *Computational Complexity*, Vol. 26, pp. 717–763, 2017.
- [35] G. Ivanyos, Y. Qiao, and K. V. Subrahmanyam. Constructive noncommutative rank computation in deterministic polynomial time over fields of arbitrary characteristics. *Computational Complexity*, Vol. 27, pp. 561–593, 2018. (the conference version in ITCS 2017).
- [36] Y. Iwamasa. A combinatorial algorithm for computing the entire sequence of the maximum degree of minors of a generic partitioned polynomial matrix with 2×2 submatrices. *Mathematical Programming, Series A*, pp. 1–53, 2023.
- [37] D. Jiang, J. B. Moore, and H. Ji. Self-concordant functions for optimization on smooth manifolds. *Journal of Global Optimization*, Vol. 38, pp. 437–457, 2007.
- [38] B. Kalantari and L. Khachiyan. On the complexity of nonnegative-matrix scaling. *Linear Algebra and its Applications*, Vol. 240, pp. 87–103, 1996.
- [39] B. Kalantari, I. Lari, F. Ricca, and B. Simeone. On the complexity of general matrix scaling and entropy minimization via the RAS algorithm. *Mathematical Programming, Series A*, Vol. 112, pp. 371–401, 2008.
- [40] M. Kapovich, B. Leeb, and J. Millson. Convex functions on symmetric spaces, side lengths of polygons and the stability inequalities for weighted configurations at infinity. *Journal of Differential Geometry*, Vol. 81, pp. 297–354, 2009.
- [41] E. Lieb. Gaussian kernels have only Gaussian maximizers. *Inventiones Mathematicae*, Vol. 102, pp. 179–208, 1990.
- [42] N. Linial, A. Samorodnitsky, and A. Wigderson. A deterministic strongly polynomial algorithm for matrix scaling and approximate permanents. *Combinatorica*, Vol. 20, pp. 545–568, 2000.
- [43] L. Lovász. On determinants, matchings, and random algorithms. In *Fundamentals of Computation Theory FCT’79*, pp. 565–574, 1979.
- [44] L. Lovász. Singular spaces of matrices and their application in combinatorics. *Boletim da Sociedade Brasileira de Matemática*, Vol. 20, pp. 87–99, 1989.
- [45] Y. Nesterov and A. Nemirovskii. *Interior-Point Polynomial Algorithms in Convex Programming*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 1994.
- [46] S. Ohta and M. Pálfi. Discrete-time gradient flows and law of large numbers in Alexandrov spaces. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations*, Vol. 54, pp. 1591–1610, 2015.
- [47] T. Oki and T. Soma. Algebraic algorithms for fractional linear matroid parity via non-commutative rank. In *Proceedings of the 2023 Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms (SODA)*, pp. 4188–4204, 2023.
- [48] R. T. Rockafellar. *Convex Analysis*. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1970.
- [49] U. G. Rothblum and H. Schneider. Scalings of matrices which have prespecified row sums and

The Thirty-Fifth RAMP Symposium

- column sums via optimization. *Linear Algebra and its Applications*, Vol. 114/115, pp. 737–764, 1989.
- [50] A. Ruschiano. A Riemannian corollary of Helly’s theorem. *Journal of Convex Analysis*, Vol. 27, pp. 1261–1275, 2020.
- [51] R. Sinkhorn. A relationship between arbitrary positive matrices and doubly stochastic matrices. *Annals of Mathematical Statistics*, Vol. 35, pp. 876–879, 1964.
- [52] R. Sinkhorn and P. Knopp. Concerning nonnegative matrices and doubly stochastic matrices. *Pacific Journal of Mathematics*, Vol. 21, pp. 343–348, 1967.
- [53] C. Udriste. Optimization methods on Riemannian manifolds. *Algebras, Groups and Geometries*, Vol. 14, pp. 339–358, 1997.
- [54] N. R. Wallach. *Geometric Invariant Theory*. Springer, Cham, 2017.
- [55] 堀田良之. 対称空間今昔譚. 数学書房, 東京, 2019.
- [56] 岩政勇仁. 2部マッチング理論の代数的一般化について. 第32回 RAMP 数理最適化シンポジウム論文集, pp. 1–14, 2020.
- [57] 岩政勇仁. 2部マッチング理論の代数的一般化について. オペレーションズ・リサーチ, 第66巻, pp. 342–348, 2021.
- [58] 平井広志. CAT(0)空間上のアルゴリズムと最適化について. 電子情報通信学会誌, 第101巻, pp. 276–279, 2018.
- [59] 平井広志. 代数的組合せ最適化—Edmonds問題の最近の発展について—, 組合せ最適化セミナー資料, 2019. <https://www.math.nagoya-u.ac.jp/~hirai.hiroshi/j-writings.html> からダウンロード可.
- [60] 平井広志. 行列スケーリングの数理, 4年演習資料, 2022. <https://www.math.nagoya-u.ac.jp/~hirai.hiroshi/j-writings.html> からダウンロード可.
- [61] 竹内勝. Lie群II. 岩波講座基礎数学. 岩波書店, 東京, 1978.
- [62] 酒井隆. リーマン幾何学. 裳華房, 東京, 1992.