情報基礎数理学特選
有限距離空間の離散幾何学とアルゴリズム
(1) 導入，等長埋め込み可能性

岡本 吉央

北陸先端科学技術大学院大学

2011 年 1 月 11 日

”最終更新：2011/02/04 8:02”

目標

この講義は数学と計算理論に関するもの

講義の目標

- 「有限距離空間」に関する問題の理解
  - 数学的問題
  - 計算理論的問題
- 「その応用」に関する理解
  - 大規模データ処理，ネットワーク

前提知識

- 学部 1, 2 年生程度の数学 (線形代数，離散数学，確率)

参考文献

2 冊の書籍

- J. Matoušek,
  Lectures on Discrete Geometry.
  Springer, New York, 2002.
  日本語訳あり
- M. M. Deza and M. Laurent,
  Geometry of Cuts and Metrics.
  Springer, Berlin Heidelberg, 1997.

その他，研究論文

評価

単位修得のための条件

レポートの提出

- 内容：研究論文の要約
- 評価法：要約内容および文章表現の正確さ，的確さ，簡潔さ
- 提出締切：2011 年 2 月 4 日 (金) 23:59 (UTC+9)
- 提出場所：岡本へ直接メールで (okamotoy at jaist.ac.jp)

詳細

- 授業 wiki ページに掲載されている研究論文の 1 つを選択
- その内容の核となる部分を要約
  - どんな問題に取り組んでいるか，主要な貢献は何か，それを理解するために必要な専門用語の意味は何か
- A4 片面で多くても 4 ページぐらいを目安
- 日本語に翻訳することが目的ではないので，英語でもよい

進め方 (予定)

	10:30–	13:00–	14:40–	16:20–
1/11(火)	講義	講義	演習＋討議	講義
1/12(水)	講義	講義	演習＋討議	講義
1/13(木)	講義	講義	演習＋討議	講義
1/14(金)	講義	講義	講義＋討議	

注意：演習と討議には積極的に参加を

講義計画

1. 1/11(2)：導入，等長埋め込み可能性 (理論)
2. 1/11(3)：最適化理論速習
3. 1/11(5)：等長埋め込み可能性 (応用)：
   センサネットワーク位置同定問題
4. 1/12(2)：歪み，次元削減 (理論)：Johnson–Lindenstrauss の補題
5. 1/12(3)：次元削減 (応用)：線形方程式系の疎解
6. 1/12(5)：次元削減 (応用)：近似最近点探索
7. 1/13(2)：低歪み埋め込み (理論)：歪みと次元のトレードオフ
8. 1/13(3)：低歪み埋め込み (理論)：Bourgain の埋め込み
9. 1/13(5)：低歪み埋め込み (理論)：ℓ_2 埋め込みに対する歪みの下界
10. 1/14(2)：低歪み埋め込み (応用)：最疎カット問題と ℓ_1 距離
11. 1/14(3)：低歪み埋め込み (応用)：最疎カット問題と負タイプの距離
12. 1/14(4)：予備

事務的内容

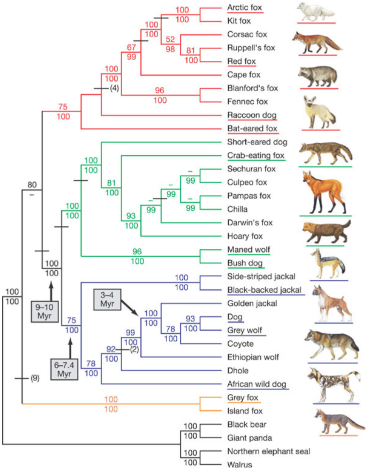
- 講義のウェブページ
  - http://www.jaist.ac.jp/~okamotoy/lect/2010/metemb/
  - 講義スライド，演習問題，レポート問題はここを参照のこと
- 講師：岡本 吉央
  - 北陸先端科学技術大学院大学 大学院教育イニシアティブセンター
  - Email: okamotoy at jaist.ac.jp

1. 導入
2. 有限距離空間：定義と例
3. 有限距離空間の性質
4. 等長埋め込み可能性：定義
5. 等長埋め込み可能性：ℓ_∞
6. 等長埋め込み可能性：ℓ_2
7. 等長埋め込み可能性：ℓ_1

距離空間の例：交通網と経路選択

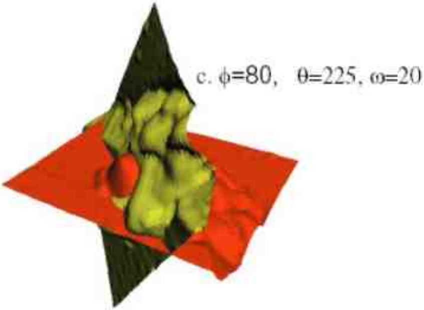
(from Google)

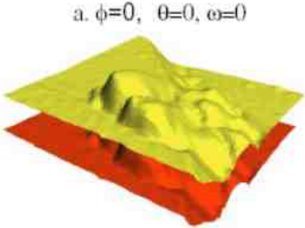
距離空間の例：生物種と進化系統樹



Lindblad-Toh et al., *Nature* 438 (2005) 803–819

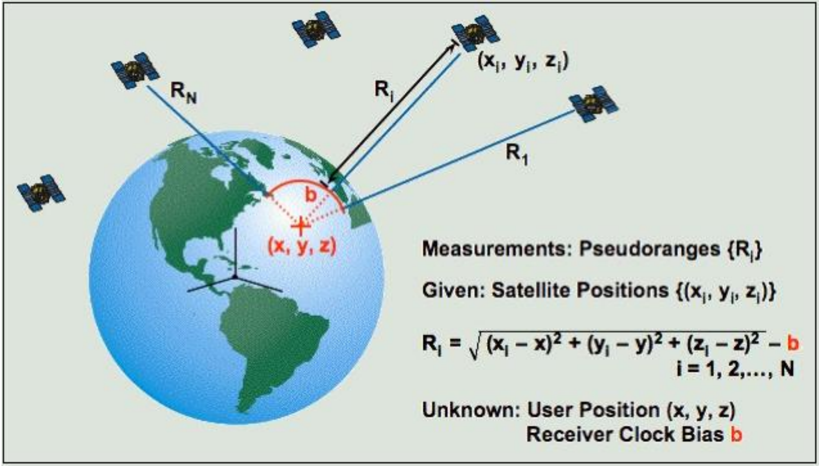
距離空間の例：形状モデリングとマッチング





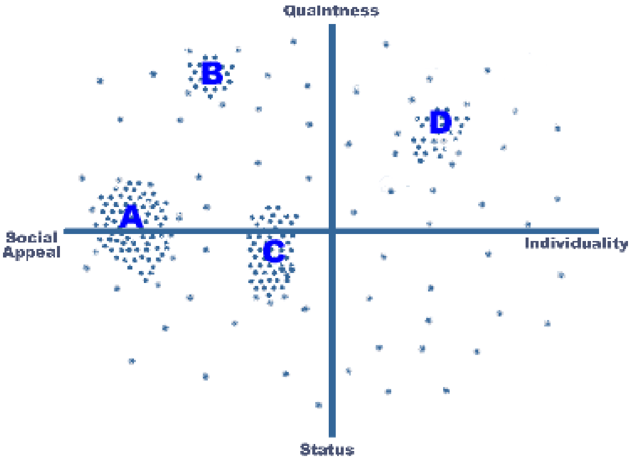
http://parlab.epfl.ch/page79375.html?matrix=1237804470776

距離空間の例：GPS 測量



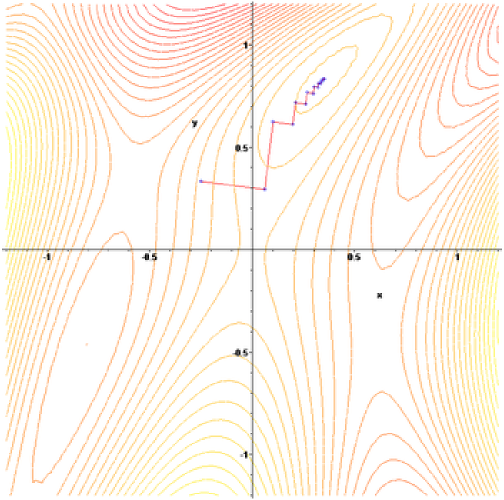
http://www.gpstextbook.com/

距離空間の例：マーケティング・データとクラスタリング



http://en.wikipedia.org/wiki/Cluster_analysis_(in_marketing)

距離空間の例：アルゴリズムの進行



http://en.wikipedia.org/wiki/Gradient_descent

なぜ距離空間？

- 多様な分野に登場
- 定義が極めて単純
- 豊かな数学的構造
- 近年の活発な研究

距離空間：定義

X：集合

定義：距離

関数 $\mu \colon X \times X \to \mathbb{R}$ が X 上の**距離** (metric) であるとは，
次の 3 つの条件を満たすこと

1. $\forall\, x, y \in X \colon\ \mu(x, y) = \mu(y, x)$ (対称性)
2. $\forall\, x, y \in X \colon\ \mu(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$
3. $\forall\, x, y, z \in X \colon\ \mu(x, y) \leq \mu(x, z) + \mu(z, y)$ (三角不等式)

定義：距離空間

2 つ組 (X, μ) が**距離空間** (metric space) であるとは，
$\mu \colon X \times X \to \mathbb{R}$ が X 上の距離であること

擬距離空間：定義

X：集合

定義：擬距離

関数 $\mu \colon X \times X \to \mathbb{R}$ が X 上の擬距離 (pseudo-metric) であるとは，次の 3 つの条件を満たすこと

1. $\forall\, x, y \in X\colon\ \mu(x,y) = \mu(y,x)$ (対称性)
2. $\forall\, x, y \in X\colon\ \mu(x,y) = 0 \Leftarrow x = y$
3. $\forall\, x, y, z \in X\colon\ \mu(x,y) \leq \mu(x,z) + \mu(z,y)$ (三角不等式)

定義：擬距離空間

2 つ組 (X, μ) が擬距離空間 (pseudo-metric space) であるとは，$\mu \colon X \times X \to \mathbb{R}$ が X 上の擬距離であること

注意：距離空間は擬距離空間

有限距離空間

定義：有限距離空間

有限距離空間 (finite metric space) とは距離空間 (X, μ) で
X が有限集合であるもの

定義：有限擬距離空間

有限擬距離空間 (finite pseudo-metric space) とは擬距離空間 (X, μ) で
X が有限集合であるもの

注：「離散距離空間」は違うものを指す

有限距離空間の例

$X = \{a, b, c, d\}$

$$
\begin{array}{llll}
\mu(a,a) = 0 & \mu(a,b) = 2 & \mu(a,c) = 1 & \mu(a,d) = 2 \\
\mu(b,a) = 2 & \mu(b,b) = 0 & \mu(b,c) = 1 & \mu(b,d) = 2 \\
\mu(c,a) = 1 & \mu(c,b) = 1 & \mu(c,c) = 0 & \mu(c,d) = 3 \\
\mu(d,a) = 2 & \mu(d,b) = 2 & \mu(d,c) = 3 & \mu(d,d) = 0
\end{array}
$$

定義：距離

関数 $\mu \colon X \times X \to \mathbb{R}$ が X 上の**距離** (metric) であるとは，
次の 3 つの条件を満たすこと

1. $\forall\, x, y \in X\colon\ \mu(x,y) = \mu(y,x)$ (対称性)
2. $\forall\, x, y \in X\colon\ \mu(x,y) = 0 \Leftrightarrow x = y$
3. $\forall\, x, y, z \in X\colon\ \mu(x,y) \leq \mu(x,z) + \mu(z,y)$ (三角不等式)

有限擬距離空間の例

$X = \{a, b, c, d\}$

$$
\begin{array}{llll}
\mu(a,a) = 0 & \mu(a,b) = 1 & \mu(a,c) = 0 & \mu(a,d) = 2 \\
\mu(b,a) = 1 & \mu(b,b) = 0 & \mu(b,c) = 1 & \mu(b,d) = 2 \\
\mu(c,a) = 0 & \mu(c,b) = 1 & \mu(c,c) = 0 & \mu(c,d) = 2 \\
\mu(d,a) = 2 & \mu(d,b) = 2 & \mu(d,c) = 2 & \mu(d,d) = 0
\end{array}
$$

定義：擬距離

関数 $\mu\colon X \times X \to \mathbb{R}$ が X 上の**擬距離** (pseudo-metric) であるとは，次の 3 つの条件を満たすこと

1. $\forall\, x, y \in X\colon\ \mu(x,y) = \mu(y,x)$ (対称性)
2. $\forall\, x, y \in X\colon\ \mu(x,y) = 0 \Leftarrow x = y$
3. $\forall\, x, y, z \in X\colon\ \mu(x,y) \leq \mu(x,z) + \mu(z,y)$ (三角不等式)

有限距離空間の表現 (1)：行列

$$
\begin{array}{c|cccc|}
 & a & b & c & d \\
\hline
a & 0 & 2 & 1 & 2 \\
b & 2 & 0 & 1 & 2 \\
c & 1 & 1 & 0 & 3 \\
d & 2 & 2 & 3 & 0 \\
\hline
\end{array}
\in \mathbb{R}^{X \times X}
$$

距離 $\rightsquigarrow$ 距離行列

距離行列は

- 対称
- 対角成分がゼロ，非対角成分が非ゼロ
- 三角不等式を満たす

有限擬距離空間の表現 (1)：行列

$$\begin{array}{c|cccc|}
 & a & b & c & d \\
\hline
a & 0 & 1 & 0 & 2 \\
b & 1 & 0 & 1 & 2 \\
c & 0 & 1 & 0 & 2 \\
d & 2 & 2 & 2 & 0 \\
\hline
\end{array} \in \mathbb{R}^{X \times X}$$

擬距離 $\rightsquigarrow$ 擬距離行列

距離行列は

- 対称
- 対角成分がゼロ (非対角成分はゼロでもよい)
- 三角不等式を満たす

有限距離空間の表現 (2)：ベクトル

$$\begin{array}{c|cccc|}
 & a & b & c & d \\
\hline
a & 0 & 2 & 1 & 2 \\
b & 2 & 0 & 1 & 2 \\
c & 1 & 1 & 0 & 3 \\
d & 2 & 2 & 3 & 0 \\
\hline
\end{array} \in \mathbb{R}^{X\times X} \quad \leftrightarrow \quad \begin{array}{c|c|}
\cline{2-2}
\{a,b\} & 2 \\
\{a,c\} & 1 \\
\{a,d\} & 2 \\
\{b,c\} & 1 \\
\{b,d\} & 2 \\
\{c,d\} & 3 \\
\cline{2-2}
\end{array} \in \mathbb{R}^{\binom{X}{2}}$$

補足 (記法)

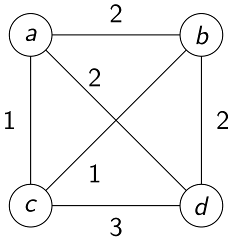
$$\binom{X}{2} = \{Y \subseteq X \mid |Y| = 2\}$$

有限擬距離空間の表現 (2)：ベクトル

$$
\begin{array}{c|cccc|}
 & a & b & c & d \\
\hline
a & 0 & 1 & 0 & 2 \\
b & 1 & 0 & 1 & 2 \\
c & 0 & 1 & 0 & 2 \\
d & 2 & 2 & 2 & 0 \\
\hline
\end{array} \in \mathbb{R}^{X \times X}
\qquad \leftrightarrow \qquad
\begin{array}{c|c|}
\hline
\{a,b\} & 1 \\
\{a,c\} & 0 \\
\{a,d\} & 2 \\
\{b,c\} & 1 \\
\{b,d\} & 2 \\
\{c,d\} & 2 \\
\hline
\end{array} \in \mathbb{R}^{\binom{X}{2}}
$$

有限距離空間の表現 (3)：グラフ

$$\begin{array}{c c} & \begin{array}{cccc} a & b & c & d \end{array} \\ \begin{array}{c} a \\ b \\ c \\ d \end{array} & \left|\begin{array}{cccc} 0 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 2 & 3 & 0 \end{array}\right| \end{array} \in \mathbb{R}^{X \times X} \qquad \leftrightarrow$$

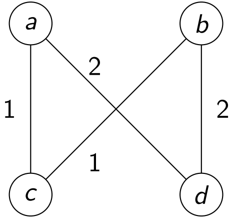


定義 (最短パス距離)

辺重み付きグラフにおける**最短パス距離** (shortest-path metric) とは，2 頂点間の最短パス長によって定義された距離

有限距離空間の表現 (3)：グラフ

$$
\begin{array}{c|cccc|}
 & a & b & c & d \\
\hline
a & 0 & 2 & 1 & 2 \\
b & 2 & 0 & 1 & 2 \\
c & 1 & 1 & 0 & 3 \\
d & 2 & 2 & 3 & 0 \\
\hline
\end{array}
\in \mathbb{R}^{X \times X}
\qquad \leftrightarrow
$$

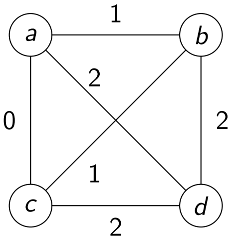


定義 (最短パス距離)

辺重み付きグラフにおける**最短パス距離** (shortest-path metric) とは，2 頂点間の最短パス長によって定義された距離

有限擬距離空間の表現 (3)：グラフ

$$\begin{array}{c|cccc|} & a & b & c & d \\ \hline a & 0 & 1 & 0 & 2 \\ b & 1 & 0 & 1 & 2 \\ c & 0 & 1 & 0 & 2 \\ d & 2 & 2 & 2 & 0 \\ \hline \end{array} \in \mathbb{R}^{X \times X} \qquad \leftrightarrow$$

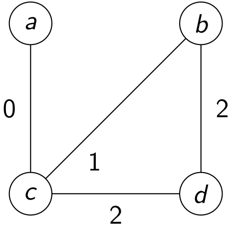


定義 (最短パス距離)

辺重み付きグラフにおける**最短パス距離** (shortest-path metric) とは，2 頂点間の最短パス長によって定義された距離

有限擬距離空間の表現 (3)：グラフ

$$\begin{array}{c|cccc|} & a & b & c & d \\ \hline a & 0 & 1 & 0 & 2 \\ b & 1 & 0 & 1 & 2 \\ c & 0 & 1 & 0 & 2 \\ d & 2 & 2 & 2 & 0 \\ \hline \end{array} \in \mathbb{R}^{X \times X} \qquad \leftrightarrow$$



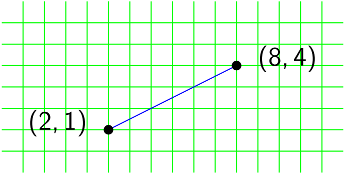
定義 (最短パス距離)

辺重み付きグラフにおける**最短パス距離** (shortest-path metric) とは，
2 頂点間の最短パス長によって定義された距離

距離空間の例：ユークリッド距離

2 点 $x, y \in \mathbb{R}^d$ のユークリッド距離 (Euclid distance) とは

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{d}(x_i - y_i)^2}$$



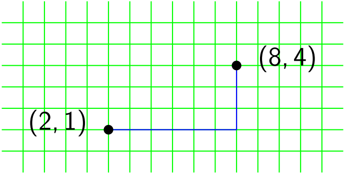
$(2, 1)$ と $(8, 4)$ のユークリッド距離は

$$\sqrt{(2-8)^2 + (1-4)^2} = \sqrt{(-6)^2 + (-3)^2} = 3\sqrt{5}$$

距離空間の例：マンハッタン距離

2 点 $x, y \in \mathbb{R}^d$ のマンハッタン距離 (Manhattan distance) とは

$$\sum_{i=1}^{d} |x_i - y_i|$$

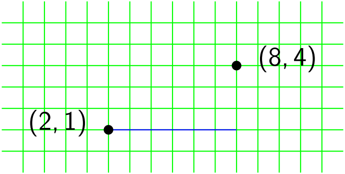


(2, 1) と (8, 4) のマンハッタン距離は $|2-8|+|1-4| = |-6|+|-3| = 9$

距離空間の例：最大距離

2 点 $x, y \in \mathbb{R}^d$ の最大距離 (maximum distance) とは

$$\max\{|x_i - y_i| \mid i \in \{1, \ldots, d\}\}$$



$(2, 1)$ と $(8, 4)$ のマンハッタン距離は $\max\{|2-8|, |1-4|\} = 6$

ノルムから距離空間を構成する

d：自然数

定義：ノルム

$\mathbb{R}^d$ 上のノルム (norm) とは関数 $\|\cdot\|\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ で次を満たすもののこと

1. $\forall\, x \in \mathbb{R}^d$: $\|x\| \geq 0$
2. $\forall\, x \in \mathbb{R}^d$: $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
3. $\forall\, x \in \mathbb{R}^d, \lambda \in \mathbb{R}$: $\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|$
4. $\forall\, x, y \in \mathbb{R}^d$: $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

性質 (演習問題)

$\mathbb{R}^d$ 上のノルム $\|\cdot\|$ に対して，$\mu\colon \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ を

$$\mu(x, y) = \|x - y\|$$

と定義すると，$(\mathbb{R}^d, \mu)$ は距離空間

よく登場するノルム

- ℓ_1 ノルム (マンハッタン・ノルム)

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{d} |x_i|$$

- ℓ_2 ノルム (ユークリッド・ノルム)

$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} x_i^2}$$

- ℓ_∞ ノルム (最大ノルム)

$$\|x\|_\infty = \max\{|x_i| \mid i \in \{1, \ldots, d\}\}$$

よく登場するノルム：ℓ_p ノルム

$1 \leq p < \infty$：実数

定義：ℓ_p ノルム

$\mathbb{R}^d$ 上の ℓ_p ノルム (ℓ_p-norm) とは

$$\|x\|_p = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{d} |x_i|^p}$$

のこと

注：ℓ_p ノルムは実際にノルムである

記法

距離空間 $(\mathbb{R}^d, \mu)$ の μ が ℓ_p ノルムに誘導されるとき，
この距離空間，および $\mathbb{R}^d$ そのものを ℓ_p^d と書くことがある

距離空間の例：ハミング距離

Σ：有限集合，d：自然数

定義：ハミング距離

Σ^d 上のハミング距離 (Hamming distance) とは，
関数 $\mu\colon \Sigma^d \times \Sigma^d \to \mathbb{R}$ で，

$$\mu(x, y) = |\{i \in \{1, \ldots, d\} \mid x_i \neq y_i\}|$$

と定義されるもののこと

(Σ^d, μ) は距離空間 (演習問題)

$$\begin{aligned} s_1 &= \text{ieyasu} \\ s_2 &= \text{ietuna} \\ s_3 &= \text{ienobu} \\ s_4 &= \text{ieharu} \end{aligned}$$

μ	s_1	s_2	s_3	s_4
s_1		4	3	2
s_2			4	4
s_3				3
s_4				

1. 導入
2. 有限距離空間：定義と例
3. 有限距離空間の性質
4. 等長埋め込み可能性：定義
5. 等長埋め込み可能性：ℓ_∞
6. 等長埋め込み可能性：ℓ_2
7. 等長埋め込み可能性：ℓ_1

数学的思考の一端

数学的思考の典型

- ある性質を満たすものの「全体」を見る
- その全体の性質・構造を探る

なぜ？

- よい性質を満たすもの/満たさないものの関連が分かる
- よい性質/悪い性質の区分が可能になる
- 特殊化/一般化の糸口がつかめる

どういう構造？

- 代数的構造
- 幾何的構造 $\leftarrow$ この講義ではこちら

距離の非負スカラー倍も距離

$\mathbb{R}_+ = \mathbb{R} \cap [0, +\infty)$

観察 1.1

$\mu\colon X \times X \to \mathbb{R}$, $\lambda \in \mathbb{R}_+$

- μ : 距離 $\Rightarrow$ $\lambda\mu$: 距離
- μ : 擬距離 $\Rightarrow$ $\lambda\mu$: 擬距離

証明：簡単なので省略

距離の和も距離

観察 1.2

$\mu_1 \colon X \times X \to \mathbb{R}$, $\mu_2 \colon X \times X \to \mathbb{R}$

- μ_1, μ_2 : 距離 $\Rightarrow \mu_1 + \mu_2$: 距離
- μ_1, μ_2 : 擬距離 $\Rightarrow \mu_1 + \mu_2$: 擬距離

証明：簡単なので省略

(擬) 距離全体は錐を成す

命題 1.3 (観察 1.1 と観察 1.2 の帰結)

有限集合 X に対して $\{\mu \mid \mu\colon X \times X \to \mathbb{R}$ は (擬) 距離 $\}$ は錐

定義：錐

集合 $C \subseteq \mathbb{R}^d$ が錐 (cone) であるとは，次の 2 つを満たすこと

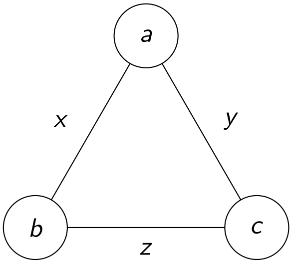
1. $x \in C,\ \lambda \in \mathbb{R}_+ \Rightarrow \lambda x \in C$
2. $x, y \in C \Rightarrow x + y \in C$

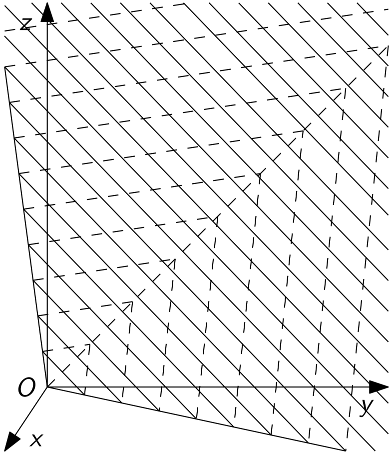
注：命題 1.3 では μ を $\mathbb{R}^{\binom{X}{2}}$ 中のベクトルと見なしている

定義：擬距離錐

X 上の擬距離全体の集合を X 上の擬距離錐 (pseudo-metric cone) と呼ぶ

例：$X = \{a, b, c\}$





擬距離全体は多面体を成す

命題 1.4 (擬距離の定義の帰結)

擬距離錐は多面体

定義：多面体

集合 $P \subseteq \mathbb{R}^d$ が多面体 (polyhedron) であるとは，それが (等号付き) 線形不等式系の解集合であること

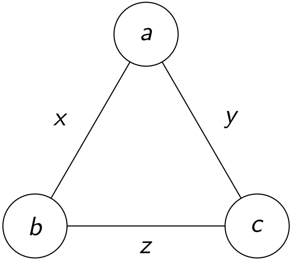
有限集合 X 上の擬距離錐は

$$\left\{ x \in \mathbb{R}^{\binom{X}{2}} \;\middle|\; \begin{array}{ll} x_{\{i,j\}} \geq 0 & \text{for all } i,j \in X, i \neq j, \\ x_{\{i,j\}} \leq x_{\{i,k\}} + x_{\{k,j\}} & \text{for all } i,j,k \in X, i \neq j, i \neq k, j \neq k \end{array} \right\}$$

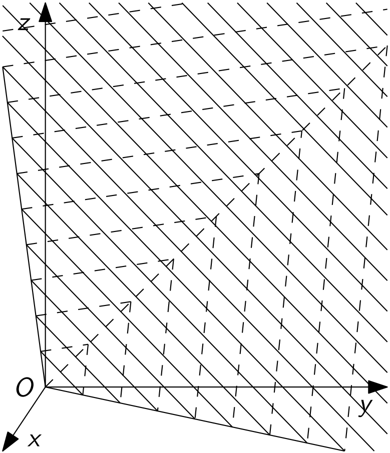
定義：多面的錐

錐であり，かつ多面体である集合は多面的錐 (polyhedral cone) と呼ばれる

例：$X = \{a, b, c\}$



$$\left\{ \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \middle| \begin{array}{l} x, y, z \geq 0, \\ x \leq y + z, \\ y \leq x + z, \\ z \leq x + y \end{array} \right\}$$



1. 導入
2. 有限距離空間：定義と例
3. 有限距離空間の性質
4. 等長埋め込み可能性：定義
5. 等長埋め込み可能性：ℓ_∞
6. 等長埋め込み可能性：ℓ_2
7. 等長埋め込み可能性：ℓ_1

有限距離空間の分類

今日の目標

- 有限距離空間の間の関係を調べる
- 同じ有限距離空間をまとめる
- 特に，ノルム空間から得られるものを考える

有限距離空間が「同じ」であることの定義...

距離を保存するような写像があれば，同じと見なせる

等長埋め込み可能性

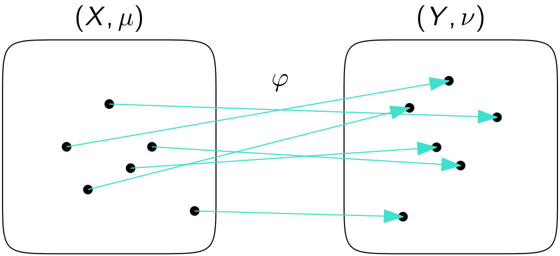
$(X, \mu), (Y, \nu)$：有限擬距離空間

定義：等長埋め込み可能性

(X, μ) が (Y, ν) に等長埋め込み可能 (isometrically embeddable) であるとは，ある写像 $\varphi \colon X \to Y$ が存在して

$$\mu(x, x') = \nu(\varphi(x), \varphi(x'))$$

が任意の $x, x' \in X$ に対して成立すること



ℓ_1 等長埋め込み可能性 (ℓ_2，ℓ_∞ も同様)

(X, μ)：有限擬距離空間，d：自然数

定義：ℓ_1^d 等長埋め込み可能性

(X, μ) が ℓ_1^d 等長埋め込み可能 (ℓ_1^d-isometrically embeddable) であるとは，ある写像 $\varphi\colon X \to \mathbb{R}^d$ が存在して

$$\mu(x, x') = \|\varphi(x) - \varphi(x')\|_1$$

が任意の $x, x' \in X$ に対して成立すること

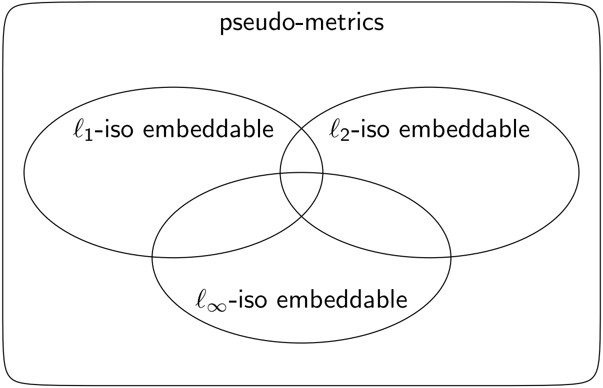
定義：ℓ_1 等長埋め込み可能性

(X, μ) が ℓ_1 等長埋め込み可能 (ℓ_1-isometrically embeddable) であるとは，ある自然数 d に対して (X, μ) が ℓ_1^d 等長埋め込み可能であること

ℓ_2，ℓ_∞ に対しても同様に定義

今から行うこと

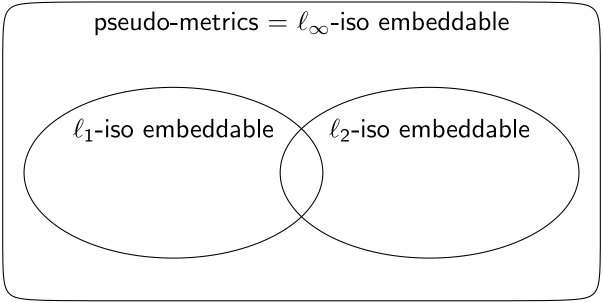
- ℓ_∞ 等長埋め込み可能な有限擬距離空間はどのようなものか？
- ℓ_2 等長埋め込み可能な有限擬距離空間はどのようなものか？
- ℓ_1 等長埋め込み可能な有限擬距離空間はどのようなものか？



Kuratowski の埋め込み

定理

任意の有限擬距離空間 (X, μ) は ℓ_∞ 等長埋め込み可能



証明の流れ：

1. 等長埋め込み φ を具体的に構成
2. その φ が等長埋め込みであることを証明

Kuratowski の埋め込み (2)

$X = \{x_1, \ldots, x_n\}$ とする

構成法 (Kuratowski の埋め込み (簡易版))

埋め込み $\varphi \colon X \to \mathbb{R}^n$ を次で定義

$$\varphi(x) = (\mu(x, x_1), \mu(x, x_2), \ldots, \mu(x, x_n))$$

$$\begin{array}{c|cccc|} & a & b & c & d \\ \hline a & 0 & 2 & 1 & 2 \\ b & 2 & 0 & 1 & 2 \\ c & 1 & 1 & 0 & 3 \\ d & 2 & 2 & 3 & 0 \\ \hline \end{array} \in \mathbb{R}^{X \times X} \quad \rightsquigarrow \quad \begin{aligned} \varphi(a) &= (0, 2, 1, 2) \\ \varphi(b) &= (2, 0, 1, 2) \\ \varphi(c) &= (1, 1, 0, 3) \\ \varphi(d) &= (2, 2, 3, 0) \end{aligned}$$

Kuratowski の埋め込み (3)

主張

この φ は ℓ_∞^n 等長埋め込み

- 距離が小さくならないこと (non-contracting)
- 距離が大きくならないこと (non-expanding)

Kuratowski の埋め込み (3)

主張

この φ は ℓ_∞^n 等長埋め込み

- 距離が小さくならないこと (non-contracting)

$$\|\varphi(x_i) - \varphi(x_j)\|_\infty = \max\{|\varphi(x_i)_k - \varphi(x_j)_k| \mid k \in \{1, \ldots, n\}\}$$

- 距離が大きくならないこと (non-expanding)

Kuratowski の埋め込み (3)

主張

この φ は ℓ_∞^n 等長埋め込み

- 距離が小さくならないこと (non-contracting)

$$
\begin{aligned}
\|\varphi(x_i) - \varphi(x_j)\|_\infty &= \max\{|\varphi(x_i)_k - \varphi(x_j)_k| \mid k \in \{1, \ldots, n\}\} \\
&\geq |\varphi(x_i)_j - \varphi(x_j)_j|
\end{aligned}
$$

- 距離が大きくならないこと (non-expanding)

Kuratowski の埋め込み (3)

主張

この φ は ℓ_∞^n 等長埋め込み

- 距離が小さくならないこと (non-contracting)

$$\begin{aligned}\|\varphi(x_i)-\varphi(x_j)\|_\infty &= \max\{|\varphi(x_i)_k-\varphi(x_j)_k| \mid k\in\{1,\ldots,n\}\}\\ &\geq |\varphi(x_i)_j-\varphi(x_j)_j|\\ &= |\mu(x_i,x_j)-\mu(x_j,x_j)|\end{aligned}$$

- 距離が大きくならないこと (non-expanding)

Kuratowski の埋め込み (3)

主張

この φ は ℓ_∞^n 等長埋め込み

- 距離が小さくならないこと (non-contracting)

$$
\begin{aligned}
\|\varphi(x_i) - \varphi(x_j)\|_\infty &= \max\{|\varphi(x_i)_k - \varphi(x_j)_k| \mid k \in \{1, \ldots, n\}\} \\
&\geq |\varphi(x_i)_j - \varphi(x_j)_j| \\
&= |\mu(x_i, x_j) - \mu(x_j, x_j)| \\
&= \mu(x_i, x_j)
\end{aligned}
$$

- 距離が大きくならないこと (non-expanding)

Kuratowski の埋め込み (3)

主張

この φ は ℓ_∞^n 等長埋め込み

- 距離が小さくならないこと (non-contracting)

$$\begin{aligned}\|\varphi(x_i)-\varphi(x_j)\|_\infty &= \max\{|\varphi(x_i)_k-\varphi(x_j)_k| \mid k\in\{1,\ldots,n\}\}\\ &\geq |\varphi(x_i)_j-\varphi(x_j)_j|\\ &= |\mu(x_i,x_j)-\mu(x_j,x_j)|\\ &= \mu(x_i,x_j)\end{aligned}$$

- 距離が大きくならないこと (non-expanding)

$$\|\varphi(x_i)-\varphi(x_j)\|_\infty = |\varphi(x_i)_k-\varphi(x_j)_k| \qquad \text{(for some } k)$$

Kuratowski の埋め込み (3)

主張

この φ は ℓ_∞^n 等長埋め込み

- 距離が小さくならないこと (non-contracting)

$$\begin{aligned}\|\varphi(x_i)-\varphi(x_j)\|_\infty &= \max\{|\varphi(x_i)_k-\varphi(x_j)_k| \mid k\in\{1,\ldots,n\}\}\\ &\geq |\varphi(x_i)_j-\varphi(x_j)_j|\\ &= |\mu(x_i,x_j)-\mu(x_j,x_j)|\\ &= \mu(x_i,x_j)\end{aligned}$$

- 距離が大きくならないこと (non-expanding)

$$\begin{aligned}\|\varphi(x_i)-\varphi(x_j)\|_\infty &= |\varphi(x_i)_k-\varphi(x_j)_k| \qquad (\text{for some } k)\\ &= |\mu(x_i,x_k)-\mu(x_j,x_k)|\end{aligned}$$

Kuratowski の埋め込み (3)

主張

この φ は ℓ_∞^n 等長埋め込み

- 距離が小さくならないこと (non-contracting)

$$\begin{aligned}
\|\varphi(x_i) - \varphi(x_j)\|_\infty &= \max\{|\varphi(x_i)_k - \varphi(x_j)_k| \mid k \in \{1, \dots, n\}\} \\
&\geq |\varphi(x_i)_j - \varphi(x_j)_j| \\
&= |\mu(x_i, x_j) - \mu(x_j, x_j)| \\
&= \mu(x_i, x_j)
\end{aligned}$$

- 距離が大きくならないこと (non-expanding)

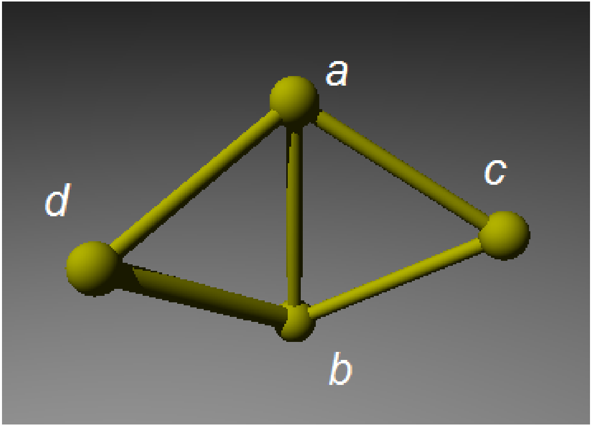
$$\begin{aligned}
\|\varphi(x_i) - \varphi(x_j)\|_\infty &= |\varphi(x_i)_k - \varphi(x_j)_k| \qquad (\text{for some } k) \\
&= |\mu(x_i, x_k) - \mu(x_j, x_k)| \\
&\leq \mu(x_i, x_j)
\end{aligned}$$

□

1. 導入
2. 有限距離空間：定義と例
3. 有限距離空間の性質
4. 等長埋め込み可能性：定義
5. 等長埋め込み可能性：ℓ_∞
6. 等長埋め込み可能性：ℓ_2
7. 等長埋め込み可能性：ℓ_1

ℓ_2 等長埋め込み可能ではない例

$$\begin{array}{c|cccc|} & a & b & c & d \\ \hline a & 0 & 1 & 1 & 1 \\ b & 1 & 0 & 1 & 1 \\ c & 1 & 1 & 0 & 2 \\ d & 1 & 1 & 2 & 0 \\ \hline \end{array}$$



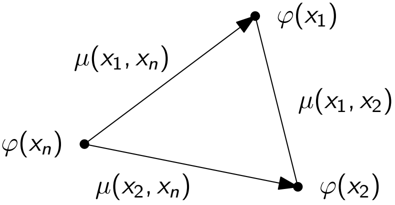
ℓ_2 等長埋め込み可能な擬距離空間の特徴 (1)

- $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$，(X, μ) : ℓ_2 等長埋め込み可能な擬距離空間
- $\varphi\colon X \to \mathbb{R}^d$: ℓ_2 等長埋め込み

観察

- $\varphi(x_1), \varphi(x_2), \varphi(x_n)$ は (ある平面上の) 三角形
- 余弦定理より

$$\langle \varphi(x_1) - \varphi(x_n), \varphi(x_2) - \varphi(x_n) \rangle = \frac{1}{2}(\mu(x_1, x_n)^2 + \mu(x_2, x_n)^2 - \mu(x_1, x_2)^2)$$



ℓ_2 等長埋め込み可能な擬距離空間の特徴 (2)

- 行列 $G \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$ を次で定義

$$\begin{aligned} g_{ij} &= \frac{1}{2}(\mu(x_i, x_n)^2 + \mu(x_j, x_n)^2 - \mu(x_i, x_j)^2) \\ &= \langle \varphi(x_i) - \varphi(x_n), \varphi(x_j) - \varphi(x_n) \rangle \end{aligned}$$

- これは対称半正定値行列

復習：半正定値行列

定義：半正定値行列

実行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が**半正定値** (positive semi-definite) であるとは
任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対して $x^\top Ax \geq 0$ が成り立つこと

復習：半正定値行列

定義：半正定値行列

実行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が半正定値 (positive semi-definite) であるとは
任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対して $x^\top A x \geq 0$ が成り立つこと

事実 (証明は省略)

実対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ に対して，次は同値

1. A は半正定値行列
2. $\exists$ 自然数 k，行列 $B \in \mathbb{R}^{n \times k}$: $A = BB^\top$
3. $\exists$ 自然数 k，ベクトル $v_1, \ldots, v_n \in \mathbb{R}^k$: $a_{i,j} = \langle v_i, v_j \rangle$
4. A のすべての固有値が非負実数

ℓ_2 等長埋め込み可能な擬距離行列の特徴付け

(X, μ)：有限擬距離空間，$X = \{x_1, \ldots, x_n\}$

定理 (Schoenberg '35)

次の 2 つは同値

1. (X, μ) は ℓ_2 等長埋め込み可能
2. 行列 $G \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$ を

$$g_{i,j} = \frac{1}{2}(\mu(x_i, x_n)^2 + \mu(x_j, x_n)^2 - \mu(x_i, x_j)^2)$$

と定義したとき，G は対称半正定値行列

特に，ベクトル $v_1, \ldots, v_{n-1} \in \mathbb{R}^k$ を用いて $g_{i,j} = \langle v_i, v_j \rangle$ と書けるとき，X は ℓ_2^k 等長埋め込み可能

証明：演習問題 (今までの議論を踏襲すれば難しくないはず)

ℓ_2 等長埋め込み可能な擬距離行列の特徴付け

(X, μ)：有限擬距離空間，$X = \{x_1, \dots, x_n\}$

定理 (Schoenberg '35)

次の 2 つは同値

1. (X, μ) は ℓ_2 等長埋め込み可能
2. 行列 $G \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$ を
$$g_{i,j} = \frac{1}{2}(\mu(x_i, x_n)^2 + \mu(x_j, x_n)^2 - \mu(x_i, x_j)^2)$$
と定義したとき，G は対称半正定値行列

特に，ベクトル $v_1, \dots, v_{n-1} \in \mathbb{R}^k$ を用いて $g_{i,j} = \langle v_i, v_j \rangle$ と書けるとき，X は ℓ_2^k 等長埋め込み可能

<u>証明</u>：演習問題 (今までの議論を踏襲すれば難しくないはず)
<u>系</u>：(X, μ) が ℓ_2 等長埋め込み可能 $\Rightarrow$ ℓ_2^{n-1} 等長埋め込み可能

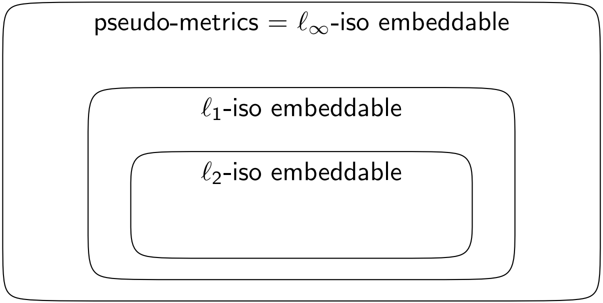
ℓ_2 等長埋め込み可能性と ℓ_1 等長埋め込み可能性

定理 (folklore?)

(X, μ)：有限擬距離空間

$$(X, \mu) \text{ が } \ell_2 \text{ 等長埋め込み可能} \Rightarrow (X, \mu) \text{ が } \ell_1 \text{ 等長埋め込み可能}$$

証明：略 (Deza & Laurent, Section 6.4 参照) $\square$



ℓ_1 等長埋め込み擬距離全体は錐を成す

X：有限集合

命題

X 上の ℓ_1 等長埋め込み可能擬距離全体は多面的錐

証明：

- 錐を成すこと：演習問題
- 多面体を成すこと：後の講義にて $\square$

判定問題：ℓ_2 等長埋め込み可能性，ℓ_1 等長埋め込み可能性

問題：ℓ_2 等長埋め込み可能性判定問題

入力：有限距離空間 (X, μ)

質問：(X, μ) は ℓ_2 等長埋め込み可能であるか？

命題

ℓ_2 等長埋め込み可能性判定問題は多項式時間 ($O(|X|^3)$ 時間) で解ける

($n \times n$ 行列の半正定値性が $O(n^3)$ 時間で判定可能だから)

問題：ℓ_1 等長埋め込み可能性判定問題

入力：有限距離空間 (X, μ)

質問：(X, μ) は ℓ_1 等長埋め込み可能であるか？

定理 (Avis, Deza '91)

ℓ_1 等長埋め込み可能性判定問題は NP 完全