CAT(0) 空間上のアルゴリズムと最適化について

Algorithm and Optimization on CAT(0)-space

平井広志 [1]

Abstract: CAT(0) 空間と呼ばれるユークリッド空間や双曲空間を一般化した距離空間がある．CAT(0) とは,「曲率が非正」ということを意味している．この空間は，ユークリッド空間で成り立つ様々な良い性質を引き継いでいる．特に，任意の２点を結ぶ測地線（$\simeq$ 最短路）が一意に定まる．このことから凸関数なども自然に定義される．最近になって，CAT(0) 空間を利用したモデリングやその上でのアルゴリズム・最適化理論が展開され始めている．本稿では，そのような試みの一端を紹介する．

キーワード: CAT(0) 空間，測地線問題，系統樹空間，メディアングラフ，オーソスキーム複体

1　はじめに

CAT(0) 空間と呼ばれる距離空間がある．CAT は３人の数学者 Cartan, Alexandrov, Toponogov の頭文字であり，0 は曲率が 0 以下を意味している．この空間は，Gromov [1] によって導入され，幾何学的群論という分野において重要な役割を果たしている．最近になって，CAT(0) 空間を利用したモデリングやその上でのアルゴリズム・最適化理論が展開され始めている．本稿では，そのような試みの一端を紹介する．

2　CAT(0) 空間の定義

距離空間 (X, d) のパス $\gamma : [0, 1] \to X$ の長さ $d(\gamma)$ を

$$d(\gamma) := \sup \sum_{i=0}^{k-1} d(\gamma(t_i), \gamma(t_{i+1})) \tag{1}$$

と定義する．ここで sup は区間分割 $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_k = 1$ $(k > 0)$ についてとる．2 点 x, y を結ぶ測地線とは，一定のスピードで進むパス γ であって，$\gamma(0) = x$, $\gamma(0) = y$，そして，$d(\gamma) = d(x, y)$ となるものである．任意の 2 点に対し測地線が存在する距離空間を測地的距離空間という．

測地的距離空間 X の 3 点 x, y, z に対し，$d(x, y) = \|\bar{x}-\bar{y}\|_2$，$d(y, z) = \|\bar{y}-\bar{z}\|_2$，$d(z, x) = \|\bar{z}-\bar{x}\|_2$ を満たす $\mathbf{R}^2$ 上の 3 点 $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ を考える．y, z を結ぶ測地線 γ の中点 $p = \gamma(1/2) \in X$ と $\bar{y}, \bar{z}$ の中点 $\bar{p} = (\bar{y}+\bar{z})/2 \in \mathbf{R}^2$ に対し，不等式 $d(x, p) \leq \|\bar{x} - \bar{p}\|_2$ を考える．測地的距離空間 X が CAT(0) であるとは，この不等式が任意の 3 点 x, y, z と y, z を結ぶ測地線について成り立つことをいう．詳しくは [2] を参照されたい．直感的には，X 上の三角形がユークリッド空間のそれに比べて「痩せている」ということである．ユークリッド空間，双曲空間，ツリーなどは CAT(0) 空間である．CAT(0) 空間では，任意の２点を結ぶ測地線が一意に定まる：

定理 1. CAT(0) 空間は一意測地的である．

3　系統樹空間

生物学において生物種の進化の系統樹を推定することは基本的な問題であり，様々な推定法がある．異なる推定法から異なる系統樹が推定されたとき，それらを比較する尺度がほしい．ここで系統樹とは，生物種の集合 $[n] := \{1, 2, \ldots, n\}$ を (根でない) リーフとして持つ枝重みの付いた根付き木としてモデリングする．枝重みは進化距離を表している．系統樹を比較するには，枝重み (連続量) と木のトポロジー (離散量) を同時に考慮しなくてはいけない．

Billera–Holmes–Vogtmann [3] は，次のようにして系統樹間の距離を導入した．まず，ラミナー族の木表現を思い出す．ラミナー族とは，任意の $X, Y \in \mathcal{L}$ に対し，$X \cap Y = \emptyset$, $X \subseteq Y$, または $Y \subseteq X$ を満たす集合族 $\mathcal{L} \subseteq 2^{[n]}$ である．系統樹 T の各枝 e に対し，根からのパスが e を使うようなリーフの集合 X_e を対応させることでラミナー族 $\{X_e\}_{e \in E(T)} \subseteq 2^{[n]}$ が得られる．このようにして系統樹はラミナー族 $\mathcal{L} \subseteq 2^{[n]}$ とその上の重みのペアと一対一に対応する．すなわち，系統樹とは集合関数 $T : 2^{[n]} \to \mathbf{R}_+$ であって，(非ゼロ) サポート $\{X \subseteq [n] \mid T(X) > 0\}$ がラミナーとなるものである．そのような集合関数全体を $\mathcal{T}$ で表す．次に $\mathcal{T}$ に距

[1] 平井広志　非会員　東京大学情報理工学系研究科 E-mail hirai@mist.i.u-tokyo.ac.jp
Hiroshi HIRAI non-member (Graduate School of Information Science and Technology, The University of Tokyo, Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, JAPAN)

離を入れる．2 つの系統樹 T, T' のサポートが共通のラミナー族 $\mathcal{L}$ に含まれるなら

$$d(T,T') := \sqrt{\sum_{X\in\mathcal{L}} |T(X) - T'(X)|^2}$$

と定義する．一般の T, T' に対しては，その間のパス $\gamma : [0,1] \to \mathcal{T}$ の長さ $d(\gamma)$ を (1) のように定義する．ここで $\gamma(t_i), \gamma(t_{i+1})$ のサポートが共通のラミナー族に含まれるような十分細かい区間分割について sup をとる．そして，２点の距離 $d(T,T')$ を T, T' を結ぶパス γ の長さの下限として定義する．こうして得られる距離空間 $\mathcal{T}$ を系統樹空間と呼ぶ．$\mathcal{T}$ は測地的距離空間となるが，より強く以下が成り立つ：

定理 2 ([3])**.** 系統樹空間は CAT(0) である．

この定理は，次節に述べる Gromov の CAT(0) 立方体複体の組合せ的特徴付け (定理 4) より従う．測地線の唯一性より，２つの系統樹の「合意系統樹」とでも言うべき「中点」も自然に定義される．

では，2 つの系統樹が与えられたとき，それらを結ぶ唯一の測地線を計算できるだろうか？— これを測地線問題と呼ぶ．Owen [4]，Owen–Provan [5] はこの問題に対し多項式時間アルゴリズムを与えた．

定理 3 ([4, 5])**.** 系統樹空間上の測地線問題は多項式時間で解ける．

この結果は応用上の意義のみならずアルゴリズム・最適化理論の観点からも興味深い．測地線問題は意外にも 2 部グラフの重み付き最大安定集合問題に帰着され，最大流アルゴリズムによって解かれるのである．

系統樹空間は，ユークリッド距離を与えた非負象限 $\mathbf{R}^n_+$ の貼り合わせとして表せる．このような空間を象限空間 (orthant space) という．Miller–Owen–Provan [6] は CAT(0) 性を持つ象限空間に定理 3 を拡張している．

4 CAT(0) 立方体複体

いくつかの（次元の異なるかもしれない）立方体 $[0,1]^n$ を面で貼り合わせて得られる空間を立方体複体 (cubical complex) という．各立方体にユークリッド距離を与え，系統樹空間のときのように，パスの長さを十分細かい区間分割によって (1) で定め，2 点間の距離をそれらを結ぶパスの長さの下限として定義する．得られる距離空間は測地的になる．Gromov [1] は，CAT(0) 立方体複体の組合せ的特徴付けを与えている．

定理 4 ([1])**.** 立方体複体が CAT(0) であるためには，単連結であることと各頂点のリンクがフラッグであることが必要十分である．

「頂点 x のリンクがフラッグ (flag) である」とは，x の隣接頂点の任意の部分集合 $y_1, y_2, \ldots, y_k$ に対し，$x, y_1, y_2, \ldots, y_k$ が k 次元立方体に含まれることと x, y_i, y_j $(\forall i,j)$ が 2 次元立方体に含まれることが同値になる，という性質である．頂点 x を含む立方体の族 ($\simeq x$ のリンク) が隣接頂点集合上の 2 項関係から作られるグラフのクリークの族と同型になる，と言い換えられる．系統樹空間の場合，ラミナー族は $2^{[n]}$ 上の交わりと包含に関する 2 項関係のグラフのクリークの族であることから，CAT(0) 性が導かれる．測地線問題に安定集合問題 ($\simeq$ クリーク問題) が現れる理由もこの事実による．

CAT(0) 立方体複体は，メディアングラフ (median graph) というグラフによっても特徴付けられる．メディアングラフとは次の性質を持つグラフ G である：任意の 3 頂点 x_1, x_2, x_3 に対して，$d_G(x_i, x_j) = d_G(x_i, y) + d_G(y, x_j)$ $(1 \leq i < j \leq 3)$ となる頂点 y が唯一つ存在する．d_G は G のグラフ的距離である．グリッドグラフ，木やその直積グラフ，分配束のハッセ図などはメディアングラフであり，立方体グラフを貼り合わせたような形をしている．

定理 5 ([9])**.** CAT(0) 立方体複体の 1-スケルトンは，メディアングラフであり，逆にメディアングラフの各立方体部分グラフを立方体に置き換えて得られる立方体複体は CAT(0) である．

立方体複体の 1-スケルトンとは，立方体複体を構成する 0 次元立方体を頂点とし、1 次元立方体を枝とするグラフのことである．

系統樹空間や CAT(0) 象限空間も CAT(0) 立方体複体と見なせることから，測地線問題を CAT(0) 立方体複体において考えることは自然であろう．Abram–Ghrist [7] は，ロボットの変形の状態空間を立方体複体を用いてモデリングし，多くのロボットから CAT(0) 立方体複体が得られることを示している．この状態空間上で測地線問題を解くことによりエネルギー消費量最小の動作計画が得られるのである．しかし，こうした問題を扱うには CAT(0) 立方体複体が計算機上でどのように実現されるか議論が必要である．Ardila–Owen–Sullivant [8] は，非整合対付き半順序集合 (poset with inconsistent pairs; PIP) という構造により，CAT(0) 立方体複体をコンパクトに表現する方法を提案している．これは分配

束を半順序集合のイデアル族として表現する Birkhoff の表現定理の一般化にあたるものである．彼らは，この表現のもとで測地線問題を考察し，2 次錐計画を繰り返し解いて測地線を求めるアルゴリズムを与えた．しかし，繰り返しの回数の上限はわかっていない．一般の CAT(0) 立方体複体上の測地線問題に対する多項式時間アルゴリズムの開発は重要な未解決問題であったが，本稿執筆中に，異なるアプローチで Hayashi [10] により解決された．

定理 6 ([10])．CAT(0) 立方複体上の測地線問題は多項式時間で解ける．

Hayashi のアルゴリズムは，CAT(0) 立方体複体が局所的には CAT(0) 象限空間とみなせることに着目し，Miller ら [6] のアルゴリズムを用いてパスを局所的に変形していくものである．このアルゴリズムは，局所的に測地線が計算できる任意の CAT(0) 空間に対して適用可能であり，さらなる応用が期待される．

5 束とオーソスキーム複体

ここでは束に対してオーソスキーム複体 (orthoscheme complex) という測地的距離空間を対応させる方法を述べる．束はランクが有限で任意の極大チェインが等しい長さを持つものを考える (チェイン条件)．いまランク n の束 $\mathcal{L}$ に対して，$K(\mathcal{L})$ を $\mathcal{L}$ のチェインの形式的凸結合の全体とする．すなわち，$K(\mathcal{L})$ は $x = \sum_{k=0}^{m} \lambda_k p_k$, $p_0 \prec p_1 \prec \cdots \prec p_m$, $\sum_{k=0}^{m} \lambda_k = 1$, $\lambda_k \geq 0$ $(\forall k)$ となる元 x たちからなる．一つのチェインの凸結合全体を単体と呼ぶことにする．次に $K(\mathcal{L})$ に距離構造を導入する．極大な単体 C から $\mathbf{R}^n$ への写像 φ_C を

$$\varphi_C(x) := \sum_{k=1}^{n} \lambda_k (e_1 + \cdots + e_k) \quad (x = \sum_{k=0}^{n} \lambda_k p_k).$$

と定める．ここで単体 C は，極大チェイン $p_0 \prec p_1 \prec \cdots \prec p_n$ の凸結合とし，e_i は $\mathbf{R}^n$ の単位ベクトルである．そして，C 内の 2 点 x, y の距離を $\|\varphi_C(x) - \varphi_C(y)\|_2$ で定める．さらに $K(\mathcal{L})$ 内のパスの長さを区間分割によって定め，$K(\mathcal{L})$ の 2 点の距離をパスの長さの下限として定義する．極大チェインの長さが等しいことからこの定義は well-defined であり，さらに $K(\mathcal{L})$ は測地的距離空間となる．直感的にいうと，各極大チェインに対して頂点 $0, e_1, e_1 + e_2, \ldots, e_1 + e_2 + \cdots + e_n$ を持つ $\mathbf{R}^n$ の単体を詰めて得られる空間が $K(\mathcal{L})$ である．

Brady–McCammond [11] は，幾何学的群論の動機からオーソスキーム複体を導入し，いかなる束ならオーソスキーム複体が CAT(0) になるかを考察している．$\mathcal{L}$ がブール束のときは，$K(\mathcal{L})$ は，n 次元立方体 $[0,1]^n$ と等長であり，$K(\mathcal{L})$ は，$0, e_{\sigma(1)}, e_{\sigma(1)} + e_{\sigma(2)}, \ldots, e_{\sigma(1)} + e_{\sigma(2)} + \cdots + e_{\sigma(n)}$ (σ は $[n]$ 上の置換) を頂点としてもつ単体による $[0,1]^n$ のよく知られた単体分割に等しい．$\mathcal{L}$ が分配束のときは，これが一般化されて，$K(\mathcal{L})$ は，$\mathcal{L}$ をイデアル族として表現する半順序集合の順序多面体と等長となる．特に，ユークリッド空間内の凸集合に等長であり，CAT(0) になる．$\mathcal{L}$ がモジュラ束の場合は，このようにユークリッド空間に埋め込むことはできない．しかし，CAT(0) 性は成立する．

定理 7 ([12])．モジュラ束のオーソスキーム複体は CAT(0) である．

オーソスキーム複体は，(チェイン条件を満たす) 半束や一般の半順序集合に対しても定義できる．[12] では，CAT(0) 立方体複体を含むさまざまな CAT(0) 空間がオーソスキーム複体として実現できることを示しており，いくつかの新しいクラスのオーソスキーム複体の CAT(0) 性も示している．これらの結果は，メディアングラフを一般化した弱モジュラグラフ (weakly modular graph) と呼ばれるグラフクラスと非正曲率性の接点の追求から得られた．

6 CAT(0) 空間上の凸最適化

CAT(0) 空間では，測地線が唯一に決まる (定理 1)．したがって凸性が自然に定義できる．(X, d) を CAT(0) 空間とする．$f : X \to \mathbf{R}$ が凸関数であるとは，任意の 2 点 $x, y \in X$ と $t \in [0,1]$ に対して，

$$(1-t)f(x) + tf(y) \geq f(\gamma(t))$$

を満たすこととする．γ は，x, y を結ぶ測地線である．例えば，距離 d から得られる関数 $x \mapsto d(x, y)$ や $x \mapsto d(x, y)^2$ などは凸関数である．

Bačák [13] は，近接点法を CAT(0) 空間上の凸関数に対して拡張している．特に，応用上有用な分割近接点法 (splitting proximal point method) に対して最適解への収束性を示している．分割近接点法とは，$f = \sum_{i=1}^{N} f_i$ のように凸関数 f_i たちの和でかける凸関数 f に対して，次の更新に基づいて点列 (x^k) を生成するアルゴリズムである：

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

ここで (λ_k) は，$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k = \infty$, $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 < \infty$ となる正数列である (例えば $\lambda_k = 1/k$). Bačák は自然な仮定のもとで，点列 (x^k) が f の最小解に収束することを示している．Ohta-Pálfia [14] は収束の速さの評価を得ている．このアルゴリズムは，系統樹空間 $\mathcal{T}$ において，いくつかの系統樹 $T_1, T_2, \ldots, T_m$ の「平均」T^* を求めるのに応用できる．ここで T^* は，$\sum_{i=1}^{m} d(T, T_i)$ を最小化する系統樹 T とする．$f_i(T) := d(T, T_i)$ として分割近接点法を適用すると，各反復の解 T^{k+1} は，T^k と T_i の測地線上に存在するので，Owen らのアルゴリズムを利用することで求めることが可能である．

最後に CAT(0) 空間を離散最適化問題の緩和問題に利用する試みを紹介する．$\mathcal{L}$ をチェイン条件を満たす束とする．その上の関数 $f : \mathcal{L} \to \mathbf{R}$ を以下のようにオーソスキーム複体上の関数 $\bar{f} : K(\mathcal{L}) \to \mathbf{R}$ に線形的に拡張する：

$$\bar{f}(x) := \sum_k \lambda_k f(p_k) \quad (x = \sum_k \lambda_k p_k \in K(\mathcal{L})).$$

もしも，$\mathcal{L}$ がブール束で，$K(\mathcal{L})$ を $[0,1]^n$ とみなすと $\bar{f} : K(\mathcal{L}) \to \mathbf{R}$ は，f の Lovász 拡張に他ならない．このとき $\bar{f}$ が凸であることと f が劣モジュラであること，すなわち，

$$f(p) + f(q) \geq f(p \wedge q) + f(p \vee q) \quad (p, q \in \mathcal{L}),$$

は同値である [15]．この事実は離散最適化理論の発展において重要な役割を果たしてきた．$\mathcal{L}$ が分配束の場合も同様である．実は $\mathcal{L}$ がモジュラ束の場合にも以下が成り立つ．ここで $K(\mathcal{L})$ は CAT(0) であった (定理 7).

定理 8 ([16]). $\mathcal{L}$ をモジュラ束とする．$f : \mathcal{L} \to \mathbf{R}$ が劣モジュラであることと Lovász 拡張 $\bar{f} : K(\mathcal{L}) \to \mathbf{R}$ が凸であることは同値である．

[17] では，この定理と分割近接点法を利用して，最大消滅部分空間問題 (maximum vanishing subspace problem) という 2 部グラフの最大安定集合問題を線形代数的に一般化した問題に対して多項式時間アルゴリズムを与えている．この問題は，ベクトル部分空間のなす無限モジュラ束上の劣モジュラ最適化問題であり，変換が制限された行列の標準形の計算 [18] や最近大きな進展のあった非可換ランク (non-commutative rank) の計算 [19] に深く関わっている．

謝辞

執筆機会を与えて下さった来嶋秀治氏に感謝します．コメントを寄せて頂いた岩政勇仁氏，林興養氏に感謝します．本研究は，JSPS 科研費 JP17K00029 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] M. Gromov, Hyperbolic groups, In: *Essays in Group Theory* (G. M. Gersten, ed.), pp. 75–263, Math. Sci. Res. Inst. Publ., 8, Springer, New York, 1987.

[2] M. Bridson and A. Haefliger, *Metric Spaces of Non-Positive Curvature*, Springer, Berlin, 1999.

[3] L. J. Billera, S. P. Holmes and K. Vogtmann, Geometry of the space of phylogenetic trees, *Adv. in Appl. Math.* **27**(4), pp. 733–767, 2001.

[4] M. Owen, Computing geodesic distances in tree space, *SIAM J. Discrete Math.* **25**(4), pp. 1506–1529, 2011.

[5] M. Owen and J. S. Provan, A fast algorithm for computing geodesic distances in tree space, *IEEE/ACM Trans. Comput. Biology Bioinform.* **8**(1), pp. 2–13, 2011.

[6] E. Miller, M. Owen and J. S. Provan, Polyhedral computational geometry for averaging metric phylogenetic trees, *Adv. in Appl. Math.* **68**, pp. 51–91, 2015.

[7] A. Abrams and R. Ghrist, State complexes for metamorphic robots, *Int. J. Robotics Res.* **23**(7–8), pp. 811–826, 2004.

[8] F. Ardila, M. Owen and S. Sullivant, Geodesics in CAT(0) cubical complexes, *Adv. in Appl. Math.* **48**(1), pp. 142–163, 2012.

[9] V. Chepoi, Graphs of some CAT(0) complexes, *Adv. in Appl. Math.* **24**(2), pp. 125–179, 2000.

[10] K. Hayashi, A polynomial time algorithm to compute geodesics in CAT(0) cubical complexes, `arXiv:1710.09932`, 2017.

[11] T. Brady and J. McCammond, Braids, posets and orthoschemes, *Algebr. Geom. Topol.* **10**(4), pp. 2277–2314, 2010.

[12] J. Chalopin, V. Chepoi, H. Hirai, and D. Osajda, Weakly modular graphs and nonpositive curvature, *Memoirs of the AMS*, to appear.

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

[14] S. Ohta and M. Pálfia, Discrete-time gradient flows and law of large numbers in Alexandrov spaces, *Calc. Var. Partial Differential Equations* **54**(2), pp. 1591–1610, 2015.

[15] L. Lovász, Submodular functions and convexity, In: *Mathematical Programming—The State of the Art* (A. Bachem, M. Grötschel, and B. Korte eds.), pp. 235–257, Springer, Berlin, 1983.

[16] H. Hirai, L-convexity on graph structures. *J. Oper. Res. Soc. Japan*, to appear.

[17] M. Hamada and H. Hirai: Maximum vanishing subspace problem, CAT(0)-space relaxation, and block-triangularization of partitioned matrix. `arXiv:1705.02060`, 2017.

[18] H. Ito, S. Iwata, and K. Murota, Block-triangularizations of partitioned matrices under similarity/equivalence transformations. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* **15**(4), pp. 1226–1255, 1994.

[19] A. Garg, L. Gurvits, R. Oliveira, and A. Wigderson: Operator scaling: theory and applications. `arXiv:1511.03730`, 2015.

平井広志 (非正員) 平成 16 年東京大学大学院情報理工学系研究科修士課程修了．以来，離散最適化とアルゴリズムの研究に従事．現在，東京大学大学院情報理工学系研究科准教授．博士（理学）．平成２６年日本オペレーションズリサーチ学会研究賞受賞