ハイパーグラフの Ricci 曲率

大阪大学大学院 理学研究科 数学専攻
赤松朋哉 (Tomoya AKAMATSU) *

概要

リーマン多様体の Ricci 曲率の概念は Ollivier によって最適輸送理論を介してランダムウォーク付き距離空間上へ一般化された．Lin–Lu–Yau はグラフにおいてその定義を修正し，離散 Ricci 曲率（LLY 曲率）を導入した．グラフの LLY 曲率の観点によるグラフの幾何解析は近年盛んに研究されており，実問題への応用もなされている．講演では，LLY 曲率をハイパーグラフ上へ一般化する研究について説明する．

1 導入

Ricci 曲率はリーマン多様体の体積増大度と深く関わる幾何学的量である．近年では特に「Ricci 曲率が下に有界」という条件を測度距離空間や離散空間上に一般化した概念が盛んに研究されている．ここではまず，Ollivier [Ol] によって最適輸送理論を用いて導入された測度距離空間の粗 Ricci 曲率について簡単に説明しておく．

(X, d) を完備可分距離空間とする．X 上の確率測度 μ で，ある点 $o \in X$ に対して $\int_X d(o,x)\,\mathrm{d}\mu(x) < \infty$ が成り立つもの全体の集合を $\mathscr{P}(X)$ と記す．各点 $x \in X$ における遷移確率測度 $m_x \in \mathscr{P}(X)$ の族 $\{m_x\}_{x \in X}$ を X 上の**ランダムウォーク**という．以下，ランダムウォークが指定された完備距離空間を**ランダムウォーク付き距離空間**と呼ぶ．Ollivier のアイデアは，ランダムウォーク付き距離空間において，2 点 $x, y \in X$ 間の距離と x, y での遷移確率測度の輸送距離を比較することでそれらに沿う “Ricci 曲率” を表現するというものであった．ここでいう輸送距離とは次の L^1-Wasserstein 距離である．

Definition 1.1 (L^1-Wasserstein 距離)**.** $\mathscr{P}(X)$ 上の **L^1-Wasserstein 距離** W_1 を

$$W_1(\mu, \nu) \coloneqq \inf_{\pi \in \Pi(\mu,\nu)} \int_{(x,y) \in X \times X} d(x,y)\,\mathrm{d}\pi(x,y)$$

と定義する．ここで，$\Pi(\mu, \nu)$ は $\mu, \nu \in \mathscr{P}(X)$ の**カップリング**全体の集合である，すなわち $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$ は任意のボレル集合 $A \subset X$ に対して

$$\pi(A \times X) = \mu(A), \quad \pi(X \times A) = \nu(A)$$

を満たす．

* u149852g@ecs.osaka-u.ac.jp

Definition 1.2 (粗 Ricci 曲率 [Ol, Definition 3])**.** $(X, d, \{m_x\}_{x\in X})$ をランダムウォーク付き距離空間とする．異なる 2 点 $x, y \in X$ に対し，x, y に沿う**粗 Ricci 曲率** $\kappa(x, y)$ を

$$\kappa(x,y) \coloneqq 1 - \frac{W_1(m_x, m_y)}{d(x,y)}$$

と定義する．

この値を Ricci 曲率と呼ぶことの妥当性はここでは説明しない（[Ol, Proposition 6 and Example 7] などを参照）．リーマン多様体上での議論と同様に，粗 Ricci 曲率によって Bonnet–Myers 型評価 ([Ol, Proposition 23])，Lichnerowicz 型評価 ([Ol, Proposition 30])，Lipschitz 縮約 ([Ol, Proposition 29]) などの測度距離空間の幾何学的性質が導かれる．

Example 1.3 ([Ol, Example 5])**.** グラフ距離の入った n 次元整数格子 $\mathbb{Z}^n$ 上で単純ランダムウォークを考える．このとき，任意の 2 点 $x, y \in \mathbb{Z}^n$ に対して $\kappa(x, y) = 0$ が成り立つ．

2 ハイパーグラフ

本章ではまず舞台となるハイパーグラフについて復習する．

ハイパーグラフ $H = (V, E, w)$ とは，**頂点**の集合 V，V の部分集合である**ハイパーエッジ** $e \in 2^V$ の集合 E，ハイパーエッジの**重み** $w : E \to \mathbb{R}_{>0}$ の三つ組みである．ハイパーエッジ e は，$\#e = 1$ のとき**ループ**，$\#e = 2$ のとき**辺**と呼ばれる．特に任意の $e \in E$ が $\#e \le 2$ であるとき，H を**グラフ**と呼ぶ．

Definition 2.1. 重み付きハイパーグラフ $H = (V, E, w)$ に対し，以下のように定義する：

- 頂点 $x, y \in V$ に対し，$x, y \in e$ なるハイパーエッジ $e \in E$ が存在するとき，x, y は**隣接している**といい，$x \sim y$ と記す．
- 関数 $d : V \times V \to \mathbb{R}_{\ge 0}$ を
$$d(x, y) \coloneqq \min\{n \in \mathbb{Z}_{\ge 0} \mid x = v_1 \sim \cdots \sim v_n = y\}$$
と定義する．d は頂点集合上の距離関数となり，これによってハイパーグラフ H は距離空間 (V, d) と見なせる．この距離 d を**グラフ距離**と呼ぶ．
- ハイパーグラフが**連結**であるとは，任意の 2 頂点 $x, y \in V$ に対し，$d(x, y) < \infty$ が成り立つことをいう．
- 頂点 $v \in V$ に対し，**重み付き次数** d_v を $d_v \coloneqq \sum_{e\in E_v} w(e)$ と定義する．また，**重み付き次数行列** $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を $D \coloneqq \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ とおく．
- ハイパーグラフが**局所有限**であるとは，任意の頂点 $v \in V$ に対して $d_v < \infty$ であることをいう．
- ハイパーグラフ H の**直径** $\mathrm{diam}(H)$ を $\mathrm{diam}(H) \coloneqq \max_{x,y\in V} d(x, y)$ と定める．

Example 2.2. ハイパーグラフの例を図 2.1に記す．ハイパーエッジ e_2 は辺，ハイパーエッジ e_3 はループである．

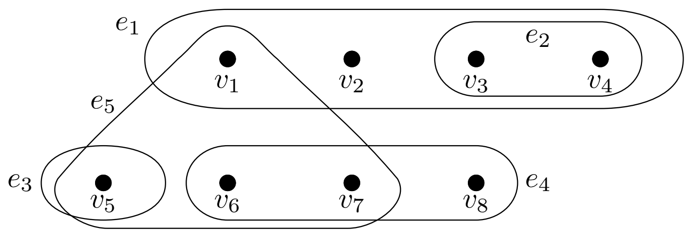

図 2.1　ハイパーグラフ $H_1 = (V, E)$.

3　グラフの Ricci 曲率

Lin–Lu–Yau [LLY] は Definition 1.2を以下のように修正し，グラフの離散曲率を定義した．

以下では断りの限り，多重辺を持たず局所有限な重み付きグラフを考える．まずグラフ距離を入れてグラフを距離空間とみる．次に遷移確率測度を次のように定める．

Definition 3.1. $\lambda \in [0,1]$ とする．各頂点 $x \in V$ に対し，確率測度 $m_x^\lambda \in \mathscr{P}(V)$ を

$$m_x^\lambda(y) := \begin{cases} 1-\lambda & (y = x), \\ \lambda \cdot \dfrac{w_{xy}}{d_x} & (y \sim x), \\ 0 & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

定義より $m_x^0 = \delta_x$ (頂点 x における **Dirac 測度**) である．また，$\{m_x^1\}_{x \in X}$ は単純ランダムウォークである．

次にまず λ 版の粗 Ricci 曲率を定義する．

Definition 3.2 (λ-粗 Ricci 曲率)**.** $\lambda \in [0,1]$ とする．異なる 2 頂点 x, y に対し，x, y に沿う **λ-粗 Ricci 曲率** $\kappa_\lambda(x,y)$ を

$$\kappa_\lambda(x,y) := 1 - \frac{W_1(m_x^\lambda, m_y^\lambda)}{d(x,y)}$$

と定義する．

$W_1(\delta_x, \delta_y) = d(x,y)$ が成り立つため $\kappa_0(x,y) = 0$ となる．Ollivier [Ol] では主に $\lambda = 1/2, 1$ の場合を考えていたが，Lin–Lu–Yau [LLY] は次の $\lambda \downarrow 0$ での極限値を考える．

Definition 3.3 (LLY 曲率)**.** 異なる 2 頂点 x, y に対し，x, y に沿う **LLY 曲率** $\kappa_{\mathrm{LLY}}(x,y)$ を

$$\kappa_{\mathrm{LLY}}(x,y) := \lim_{\lambda \downarrow 0} \frac{\kappa_\lambda(x,y)}{\lambda}$$

と定義する．

右辺の極限値は存在する ([LLY, Lemma 2.1 and Lemma 2.2]).

Definition 3.4. グラフ G の任意の辺 e に対して $\kappa_{\mathrm{LLY}}(e) = \kappa$ であるとき，$\kappa_{\mathrm{LLY}}(G) = \kappa$ と書く．

Example 3.5 (完全グラフ [LLY, Example 1]). 頂点数 n の完全グラフを K_n とおくと，$\kappa_{\mathrm{LLY}}(K_n) = n/(n-1)$ が成り立つ．

Example 3.6 (サイクルグラフ [LLY, Example 2]). 頂点数 n のサイクルグラフを $\mathcal{C}_n$ とおくと，

$$\kappa_{\mathrm{LLY}}(\mathcal{C}_n) = \begin{cases} 3 - \dfrac{n}{2} & (n = 2, 3, 4, 5), \\ 0 & (n \geq 6) \end{cases}$$

が成り立つ．

LLY 曲率によってリーマン多様性上の議論の類似がグラフ上でも行える．例として Bonnet–Myers 型評価と Lichnerowicz 型評価を紹介する．

Theorem 3.7 (Bonnet–Myers 型評価 [LLY, Theorem 4.1]). $\kappa > 0$ とする．グラフ G の任意の辺 $xy \in E$ に対して $\kappa_{\mathrm{LLY}}(x, y) \geq \kappa$ が成り立つとする．このとき

$$\mathsf{diam}(G) \leq \frac{2}{\kappa}$$

が成り立つ．

頂点集合 V 上の関数全体の集合を $\mathbb{R}^V$ と表す．

Definition 3.8 (グラフラプラシアン). グラフラプラシアン $\Delta : \mathbb{R}^V \to \mathbb{R}^V$ を

$$\Delta f(x) \coloneqq \sum_{y \in V} \frac{w(xy)}{d_x} \{ f(x) - f(y) \}$$

と定義する．ラプラシアン Δ の非零最小固有値を λ_1 と記す．

Theorem 3.9 (Lichnerowicz 型評価 [LLY, Theorem 4.2]). $\kappa > 0$ とする．頂点数有限のグラフ G の任意の辺 $xy \in E$ に対して $\kappa_{\mathrm{LLY}}(x, y) \geq \kappa$ が成り立つとする．このとき $\lambda_1 \geq \kappa$ が成り立つ．

また，グラフラプラシアンを用いて LLY 曲率を表すこともできる．

Theorem 3.10 (Curvature via the Laplacian [MW, Theorem 2.1]). 頂点集合 V 上の関数で（グラフ距離に関して）*1-Lipschitz* 連続なもの全体の集合を $\mathsf{Lip}^1(V)$ とおく．異なる *2* 頂点 x, y に対し

$$\kappa_{\mathrm{LLY}}(x, y) = \inf \left\{ \frac{\Delta f(x) - \Delta f(y)}{d(x, y)} \;\middle|\; f \in \mathsf{Lip}^1(V),\ f(x) - f(y) = d(x, y) \right\}$$

が成り立つ．

LLY 曲率はグラフ上の線型計画問題を解くことで求められることが [BCLMP, CK, CKLLS] などの研究で知られている．LLY 曲率は 2 頂点間の熱の伝わりやすさを表す量であり，それゆえネットワークのコミュニティ検出などと相性が良いと期待されている．例えば [NLLG] などで LLY 曲率に基づく Ricci flow を活用した応用研究がなされている．

4　ハイパーグラフの Ricci 曲率

ハイパーグラフは共著者ネットワークなどのグラフでは表しきれない非線型な関係をも表現できる．従って LLY 曲率をハイパーグラフに一般化することは応用の観点からも有意義だと考えられる．しかし，ハイパーグラフ上のランダムウォークや最適輸送問題をどのように考えるべきかという問題があり，Lin–Lu–Yau による手法は直接一般化できない．LLY 曲率のハイパーグラフへの一般化に関する研究としては，multi-marginal な最適輸送問題を扱ってハイパーエッジに対する曲率を定めた [AGE]，有向ハイパーグラフにおける最適輸送問題を定式化して有向ハイパーエッジに対する曲率を定めた [EJ]，ハイパーグラフに付随する非線型集合値ラプラシアンを導入して 2 頂点に対する曲率を定めた [IKTU]，（無向）ハイパーグラフにおける最適輸送問題を定式化して 2 頂点に対する曲率を定めた [Ak] などがある．講演では，幾何学的性質が豊富なラプラシアンが軸となる Ikeda–Kitabeppu–Takai–Uehara [IKTU] による曲率の導入・性質などについて説明する（[Yo, IMTY, TMIY, KM] なども参照）.

参考文献

[Ak] T. Akamatsu, *A new transport distance and its associated Ricci curvature of hypergraphs*, Anal. Geom. Metr. Spaces. **10**(1) (2022), 90–108.

[AGE] S. Asoodeh, T. Gao and J. Evans, *Curvature of hypergraphs via multi-marginal optimal transport*, In: IEEE Conference on Decision and Control. (2018), 1180–1185.

[BCLMP] D. P. Bourne, D. Cushing, S. Liu, F. Münch and N. Peyerimhoff, *Ollivier-Ricci idleness functions of graphs*, SIAM J. Discrete Math. **32**(2) (2018), 1408–1424.

[CK] D. Cushing and S. Kamtue, *Long-scale Ollivier Ricci curvature of graphs*, Anal. Geom. Metr. Spaces. **7**(1) (2019), 22–44.

[CKLLS] D. Cushing, R. Kangaslampi, V. Lipiäinen, S. Liu and G. W. Stagg, *The Graph Curvature Calculator and the curvatures of cubic graphs*, Exp. Math. (2019), 13pp.

[EJ] M. Eidi and J. Jost, *Ollivier Ricci Curvature of Directed Hypergraphs*, Sci Rep **10**, 12466 (2020), 14pp, https://doi.org/10.1038/s41598-020-68619-6.

[IKTU] M. Ikeda, Y. Kitabeppu, Y. Takai and T. Uehara, *Coarse Ricci curvature of hypergraphs and its generalization*, preprint (2021), available at https://arxiv.org/abs/2102.00698, 37pp.

[IMTY] M. Ikeda, A. Miyauchi, Y. Takai and Y. Yoshida, *Finding Cheeger cuts in hypergraphs via heat equation*, Theoret. Comput. Sci. **930** (2022), 123.

[KM] Y. Kitabeppu and E. Matsumoto, *Cheng maximal diameter theorem for hypergraphs*, Tohoku Math. J. (to appear), available at https://arxiv.org/abs/2102.09765, 10pp.

[LLY] Y. Lin, L. Lu and S.-T. Yau, *Ricci curvature of graphs*, Tohoku Math. J. (2) **63**(4) (2011), 605–627.

[MW] F. Münch and R. K. Wojciechowski, *Ollivier Ricci curvature for general graph Laplacians: heat equation, Laplacian comparison, non-explosion and diameter bounds*, Adv.

Math. 356 (2019), 106759, 45pp.

[NLLG] C.-C. Ni, Y.-Y. Lin, F. Luo and J. Gao, *Community Detection on Networks with Ricci Flow*, Sci Rep **9**, 9984 (2019), 12pp.

[Ol] Y. Ollivier, *Ricci curvature of Markov chains on metric spaces*, J. Funct. Anal. **256**(3) (2009), 810–864.

[TMIY] Y. Takai, A. Miyauchi, M. Ikeda and Y. Yoshida, *Hypergraph clustering based on Pagerank*, 26nd ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data mining (2020), 1970–1978.

[Yo] Y. Yoshida, *Cheeger inequalities for submodular transformations*, In: Proceedings of the Thirtieth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms. (2019), 2582–2601.