

最小包含球問題から得られる 4-cube グラフの向きづけ

西鳥羽 二郎* 森山園子† 中山裕貴‡

東京大学大学院 情報理工学系研究科 コンピュータ科学専攻

最小包含球問題 (SEB) とはアフィン独立な点集合が与えられた時, それらの点を全て境界又は内部に含む半径最小の球を求める問題である. SEB を解くアルゴリズムである Welzl のアルゴリズムを適用して得られる cube グラフの枝の向きづけを SEB 向きづけという. 本研究では 4 点における SEB 問題において, 与えられた点集合の 4 面体の facet の鈍角三角形の数に着目して場合分けをし, 4-cube における acyclic な SEB 向きづけの列挙を行い, その Holt-Klee 性を調べた.

Smallest Enclosing Ball Orientations of 4-Cube Graphs

Jiro Nishitoba* Sonoko Moriyama† Hiroki Nakayama‡

Department of Computer Science,

Graduate School of Information Science and Technology,

The University of Tokyo

Smallest Enclosing Ball(SEB) is the problem which is finding the closed ball of smallest radius that contains given n affinely independent points in $(n - 1)$ -space. The SEB orientations are orientations of cube graphs obtained by applying Welzl's algorithm to SEB. In this paper, we focus on the number of obtuse triangles in facets of a tetrahedron constructed by 4 given points, and list acyclic SEB orientations of 4-cube. Then we analyze Holt-Klee conditions of such orientations.

1 はじめに

最小包含球問題 (SEB) とは, 与えられたアフィン独立な点集合に対し, それらの点全てを境界又は内部に含む最小の球を求める問題であり, レイトレーシング, モーションプランニングや統計学などに広く用いられている [4]. 特に, 本研究では $(n - 1)$ 次元空間上にアフィン独立な n 点を配置する問題を考え, これを n 次元の SEB と呼ぶ. SEB を解く最初の線形時間アルゴリズムは 1982 年に与えられたが [6], 実装の煩雑さなどから, Seidel の randomized 線形計画アルゴリズム [9] を元にした Welzl のアルゴリズム [12] が提案された. Welzl のアルゴリズムは $n - 1$ 次元空間に $\{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ の n 個のアフィン独立な点集合 P が与えられた時, アルゴリズムは $Q = \{\phi\}$ から開始し P の要素 x を一つ選び, Q の要素を境界に持つ最小の球がその要素を内部に含まないときのみ x を Q に加える. 全ての要素に対して調べた後, Q の要素 y に対して y を除く点集合

* jnishi@is.s.u-tokyo.ac.jp

† moriso@is.s.u-tokyo.ac.jp

‡ nak-den@is.s.u-tokyo.ac.jp

$Q \setminus \{y\}$ を境界に含む球の中に含まれる要素があった場合は Q から y を取り除く. 以上のことを繰り返して Q が変化しなくなった時, その時の Q の要素を境界に含む最小の球が与えられた点集合の最小包含球である. この Welzl のアルゴリズムの挙動を cube グラフの向き付けとして表現することにより, sink を探索する問題に対応させることができる. 与えられた点集合の任意の部分集合に対して頂点を割り当て, 各頂点とその対応する集合に含まれていない要素を一つ追加することによって構成できる集合に対応する頂点との間に枝を構成することによって n -cube グラフを構成する. この時の各枝に対して Welzl のアルゴリズムの挙動において集合 Q に P の要素 x を加える時は $Q \rightarrow Q \oplus \{x\}$ の向きに, Q から要素 y を取り除くときは $Q \rightarrow Q - \{y\}$ の方向に向きづけを行う. こうして構成した向きづけにおいて sink に対応する集合の要素を境界に持つ球が与えられた n 点の最小包含球となっている. Welzl のアルゴリズムはこの向きづけにそって cube グラフ上を動き, sink を見つけることに対応している.

以上のようにして構成した cube の向きづけを SEB 向きづけと呼ぶ. n 次元の SEB から得られる SEB 向きづけは, n -cube の多面体グラフの Unique Sink Orientation (USO) となっている [2, 11]. USO とは, 多面体グラフに定義される向きづけで, 全ての face に 1 つの sink を持つ向きづけのことである [11]. USO は多くの問題と関連する広い枠組みで, SEB 向き付け以外にも, cube グラフ上の LP 向きづけや, 正定値行列上の線形相補性問題 (LCP) から導かれる P-LCP 向きづけを含む概念である. LP 向きづけとは, 許容領域が n -cube に組合せ同値となる線形計画問題 (LP) を解く単体法の挙動を表す向きづけであり, P-LCP 向きづけとは正定値行列の線形相補性問題における Bard のアルゴリズム [1] の挙動を示した多面体グラフにおける向きづけである. LP 向き付けは acyclic である一方, P-LCP 向き付けは cyclic にもなり得る. LP 向きづけも P-LCP 向きづけも Holt-Klee 条件を満たし [5, 3], LP 向きづけは P-LCP 向きづけにもなっている [8]. SEB 向きづけは十分高い次元においては cycle が存在する [2].

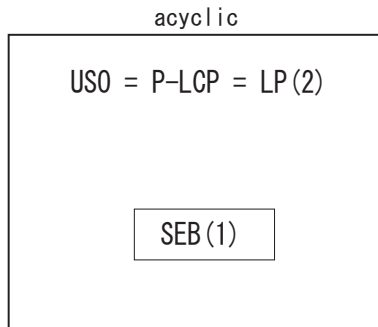


図 1 2-cube における向きづけの包含関係
(括弧内の数字は存在する向きづけの数)

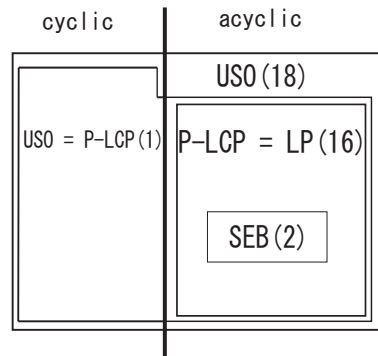


図 2 3-cube における向きづけの包含関係
(括弧内の数字は存在する向きづけの数)

2-cube グラフ上の USO と 3-cube グラフ上の USO については, LP 向きづけ, P-LCP 向きづけ, SEB 向きづけの包含関係が分かっている. 2-cube においては $SEB \subset LP = P-LCP = USO$ であり, SEB 向きづけは 1 種類, USO, LP, P-LCP 向きづけは 2 種類存在することが知られている. また 3-cube においては $SEB \subset LP \subset P-LCP \subset USO$ であり, USO が 19 種類, P-LCP 向きづけが 17 種類 [10], LP 向きづけは P-LCP 向きづけから cyclic なものを除いた 16 種類, SEB 向きづけが 2 種類 [11] 存在する. ここで, 2 次元の場合も 3 次元の場合も, SEB 向き付けは LP 向き付けや P-LCP 向き付けに比較して数は少ないが, 全ての SEB 向き付けが LP 向き付けかつ P-LCP 向き付けである点に注目したい. LP 向き付けも P-LCP 向き付けも幾つかの必要条件は与

えられているものの未だ特徴づけが与えられておらず、構成するのは難しい。実際、4次元以上のLP向き付けやP-LCP向き付けは自明なものしかわかっておらず、全体で何個存在するのかは全くわかっていない。もし2次元や3次元の包含関係から得られるように、4次元以上においてもSEB向き付けがLP向き付けやPLCP向き付けとなるならば、SEB向き付けを構成することで簡単にLP向き付けやPLCP向き付けが得られることになる。

そこで、SEB向き付けとLP向き付け・PLCP向き付けとの関係を解明すべく、本研究では4-cubeグラフにおけるacyclic USOの列挙 [7] を基にして、acyclicな4次元SEB向きづけを列挙し、その性質を調べた。4-cubeにおけるSEB向きづけは理論的に最大で24通りであり、そのうち少なくとも23通りは対応する4点の配置が存在することを計算機実験により確かめた。いずれもacyclicであり、かつLP向き付けやPLCP向き付けが満たすHolt-Klee条件をも満たしていることを示す。

本稿は次のような構成になっている。2章でSEB及びグラフの向きづけの定義を行い、3章で4-cubeのSEB向きづけについて述べ、最後に4章において結論と今後の展望を述べる。

2 準備

2.1 最小包含球問題 (SEB) と SEB 向きづけ

最小包含球問題 (SEB) は $n - 1$ 次元上の n 個の点の集合 $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ が与えられた時、 P の要素の点を全て境界又は内側に含む最小包含球を求める問題である。この球は一意に定まり、また、 P の最小包含球と S_0 の要素が全て境界上にある最小の球 $\beta(S_0)$ が一致する部分集合 $S_0 \in P$ が存在する。

最小包含球問題を次のようにUSO向きづけのsinkを求める問題に変形する。集合 A, B に対して、 $[A, B] \equiv \{X | A \subseteq X \subseteq B\}$ とする。有限集合 $A \subseteq B$ が与えられた時、頂点集合 $[A, B]$ と次の枝集合を持つグラフ $C = C^{[A, B]}$ を考える。

$$\{\{u, u \oplus \{a\}\} \mid u \in [A, B], a \in B \setminus A\}. \quad (1)$$

ただし、 \oplus は二つの集合の対称差とする。この時 C は cube グラフとなっている。 $C^{[A, B]}$ において $[A, B]$ の要素数を C の次元とし、 $\dim C$ と表記する。ここで cube $C^{[0, P]}$ について、ある $x \in Q \subseteq P$ に対し、 Q と $Q \setminus \{x\}$ の間の枝に $Q \setminus \{x\}$ の要素を全てを境界に持つ最小の球が x を含むときに限り Q から $Q \setminus \{x\}$ の方向に向きづけをする。ここでもし S がこの向きづけのsinkであるとき、 $P \subseteq \beta(S)$ かつ任意の $x \in S$ に対して $x \notin \beta(S \setminus \{x\})$ であるので $\beta(S)$ は P の要素を全て含みかつ S の要素を全て境界に持つ球となっており、最小包含球となっている。

SEB向きづけにおいて次のような性質が知られている。

- SEB向きづけはcubeグラフ上のUnique Sink Orientations(USO)である [11].
 $C = C^{[A, B]}$ として $A \subseteq X \subseteq Y \subseteq B$ なる X, Y による集合 $[X, Y]$ により構成される部分グラフ $C^{[X, Y]}$ も cube グラフとなり C の face という。ここで i 次元の face を i -face といい、0-face は頂点、1-face は枝、 $(\dim C - 1)$ -face は facet となる。USO とは全ての face に sink が一つだけ存在する向きづけのことである。
- 3点におけるSEB向きづけは図3,4の2種類である [11].
- 十分大きな n に対して cyclic な SEB 向きづけが存在する。 [2]

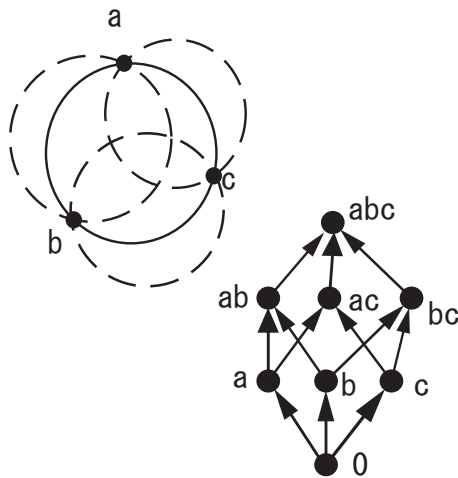


図3 鋭角三角形時のSEB向きづけ

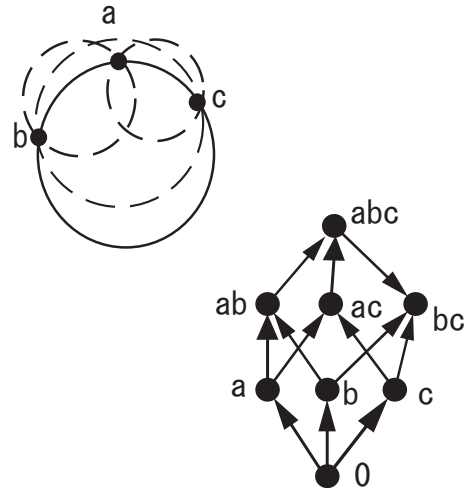


図4 鈍角三角形時のSEB向きづけ

2.2 グラフの向きづけ

2.2.1 LP 向きづけ

$f(x)$ を線形関数とし, $G(P)$ を多面体 P の多面体グラフとする. $G(P)$ の各枝 uv において $f(u) < f(v)$ であるとき u から v へ向きづけることによって得られる $G(P)$ の向きづけを $f(x)$ による向きづけという. P と組合せ同値な多面体に Q とある $f(x)$ によって実現可能な $G(P)$ の向きづけを LP 向きづけという. LP 向きづけには次の3つの必要条件が存在する.

- acyclic である
- Unique Sink Orientations である
- Holt-Klee 条件を満たす

Holt-Klee 条件を満たすとは多面体グラフ P 上で全ての i -face において少なくとも i 本の点素なパスが存在することである.

2.2.2 P-LCP 向きづけ

正定値行列による線形相補性問題において Bard のアルゴリズムにおける complementarity cone の遷移を有向グラフで表した向きづけのことである.

3 4-cube における SEB 向きづけ

3-cube の SEB 向きづけにおいて次の特徴が存在する. 与えられた3点 p_a, p_b, p_c により構成される三角形が鋭角三角形の時には図3のように全て集合の要素が増加する方向と一致するような方向の向きづけとなる. 一方で p_a, p_b, p_c による三角形が辺 $p_a p_b$ を最も長い辺とする鈍角三角形になるときは図4のように ab と abc 間を除いて集合の要素が増える方向に向きづけされ, ab と abc の間は abc から ab の方向へ向きづけされる.

3.1 向きづけの列挙

USO を満たす SEB を列挙した結果, 表 1 の 24 通りが得られた. 表では与えられた 4 点のうちの 3 点を選んで構成される三角形のうちの鈍角三角形の数で分類している. 4-cube の各枝において $x \notin Q, Q \rightarrow Q + \{x\}$ の

鈍角三角形の数	理論的解析による上限	計算機実験による結果
0	2	2
1	3	3
2	7	7
3	7	6
4	5	5

表 1 SEB 向きづけの数の上限

方向に向きづけされているとき上向きであると呼び, 反対の方向に向きづけされているときは下向きであると呼ぶとする. 4 点 p_a, p_b, p_c, p_d が与えられたとし, それに対応した 4-cube の頂点のラベルを a, b, c, d とし, 複数の点 $\{p_a, p_b, p_c\}$ を含む集合を表すときには abc のように書く. 空集合を境界に含む球, 及び一点を境界に持つ球はいずれの点も含まれないので空集合と $\{a, b, c, d\}$ 間の枝及び $\{a, b, c, d\}$ と $\{ab, ac, ad, bc, bd, cd\}$ 間の枝は全て上向きである. $\{ab, ac, ad, bc, bd, cd\}$ と $\{abc, abd, acd, bcd\}$ の間の枝に関しては $\{abc, abd, acd, bcd\}$ のそれぞれの三角形が鋭角三角形か鈍角三角形かによって向きづけが決定するのでこれらの枝に関しては 4 面体の facet の中の鈍角三角形の数によって場合分けをする. 鈍角三角形において最も長い辺を長辺と呼ぶことにする.

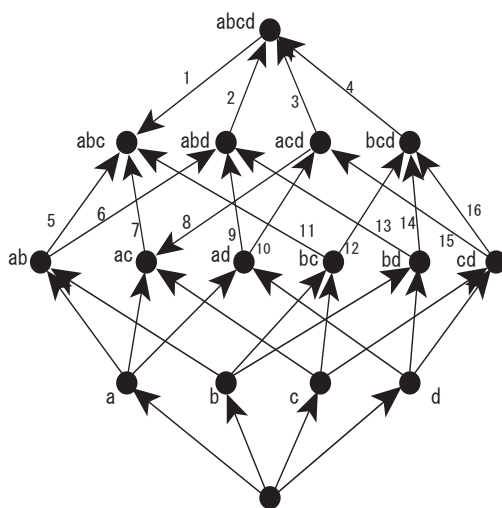


図 5 4-cube における向きづけ表記. 番号は表 2 において左から数えた位置を示している

次に $\{abc, abd, acd, bcd\}$ と $abcd$ の間の枝に関して上向きの枝の本数により場合分けをする. 表 2 は 4-cube における SEB 向きづけを示しており, 左から順に $\{abc, abcd\}$, $\{abd, abcd\}$, $\{acd, abcd\}$, $\{bcd, abcd\}$, $\{ab, abc\}$, $\{ab, abd\}$, $\{ac, abc\}$, $\{ac, acd\}$, $\{ad, abd\}$, $\{ad, acd\}$, $\{bc, abc\}$, $\{bc, bcd\}$, $\{bd, abd\}$, $\{bd, bcd\}$,

表 2 4-cube における SEB むきづけ

鈍角三角形の数	$abcd$ を端点に持つ下向きの枝数	向きづけ	
0	0	+++++	
	1	-++++	
1	0	++++-	
	1	+--++	
	2	--++-	
2	0	++++-+	
	1	+--+-	
	1	+--+-	
	1	-++++-	
	2	--++-	
	2	--++-	
	2	--++-	
3	1	+--+-	
	1	+--+-	
	1	+--+-	
	1	+--+-	*
	2	--++-	
	2	--++-	
	2	--++-	
4	1	+--+-	
	1	-+++-	
	2	--++-	
	2	--++-	
	2	--++-	

$\{cd, acd\}, \{bd, bcd\}$ の辺について + は上向きを, - は下向きを表している.

計算機実験の結果, 上記の 24 通りのうち*の鈍角三角形の長辺の位置関係が 1 辺を共有, 残る 1 辺が共有されている辺と 1 点を共有するときを除いた 23 通りの向きづけについて, それを実現する 4 点の配置を求められた. 以上にあげられた cyclic な SEB 向きづけは全て Holt-Klee 条件を満たしていた. したがって次の定理が成立する.

定理 1. 4-cube の acyclic な SEB 向きづけは Holt-Klee 条件を満たす.

定理 1 では acyclic という条件をつけているが, cyclic な SEB 向きづけが存在する場合というのは $abcd$ を表している頂点の出次数が 3 以上の時の場合である. もしこのような向きづけが存在しなければ次の予想が成立する.

予想 1. 4-cube の SEB 向きづけは Holt-Klee 条件を満たす.

また, 今回の結果から次のことも予想される.

予想 2. SEB 向きづけは Holt-Klee 条件を満たす.

4 結論と今後の展望

本稿では 4 点 3 次元における acyclic な SEB 向きづけの上限が 24 であることを理論的に求め, 計算機実験にて列挙を行うことによって 23 種類存在することを確認した. 理論的な上限である 24 種類に全てにおいて Holt-Klee 条件を満たしており, 4-cube における acyclic な SEB 向きづけは Holt-Klee 条件を満たすことを示した.

今後の課題として次のことがあげられる.

- 4-cube における SEB 向きづけが Holt-Klee 条件を満たすことを示す.
- 4-cube における SEB 向きづけと LP 向きづけや P-LCP 向きづけとの包含関係を調べる.
- 一般次元の cube における SEB 向きづけが Holt-Klee 条件を満たすことを示す.

参考文献

- [1] Yonathan Bard. Nonlinear parameter estimation. *Academic Press*, 1974.
- [2] Bernd Gärtner, Hiroyuki Miyazawa, and Emo Welzl. From geometric optimization problems to unique sink orientations of cubes. manuscript in preparation, 2001.
- [3] Bernd Gärtner, Walter D. Morris, and Leo Rüst. Unique sink orientations of grids. In *11th Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization*, pp. 210–224, 2005.
- [4] Bernd Gärtner and Sven Schönherr. Smallest enclosing ellipses - fast and exact. Technical report, Mathematics Department, Freie Universität Berlin, 1997.
- [5] Fred Holt and Victor Klee. A proof of the strict monotone 4-step conjecture. *Contemporary Mathematics*, Vol. 223, pp. 201–216, 1999.
- [6] Nimrod Megiddo. Linear programming in linear time when the dimension is fixed. *Journal of ACM*, Vol. 31, No. 1, pp. 114–127, 1984.
- [7] Sonoko Moriyama and Yoshio Okamoto. Plcp-orientations in dimension five and the even out-degree conjecture. In *Optimization days*, p. 72, 2005.
- [8] Walter D. Morris. Randomized principal pivot algorithms for p -matrix linear complementarity problems. *Mathematical Programmings*, pp. 285–296, 2002.
- [9] Raimund Seidel. Linear programming and convex hulls made easy. In *Symposium on Computational Geometry*, pp. 211–215, 1990.
- [10] Alan Stickney and Layne T. Watson. Digraph models of Bard-type algorithm for the linear complementarity problem. *Mathematics of Operations Research*, Vol. 3, pp. 322–333, 1978.
- [11] Tibor Szabó and Emo Welzl. Unique sink orientations of cubes. In *Proceedings of 42nd Annual*

Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS), pp. 547–555, 2001.

- [12] Emo Welzl. Smallest enclosing disks (balls and ellipsoids). In *New Results and New Trends in Computer Science (H. Maurer, Ed)*, No. 555 in Lecture Notes in Computer Science, pp. 359–370, 1991.