最適化の数理——応用数理の視点

最適化の理論

室田 一雄
計数工学科 (工学部)
数理情報学専攻(情報理工学系)

http://www.misojiro.t.u-tokyo.ac.jp/~murota

1. 凸関数とは…

2. 凸の意義は…

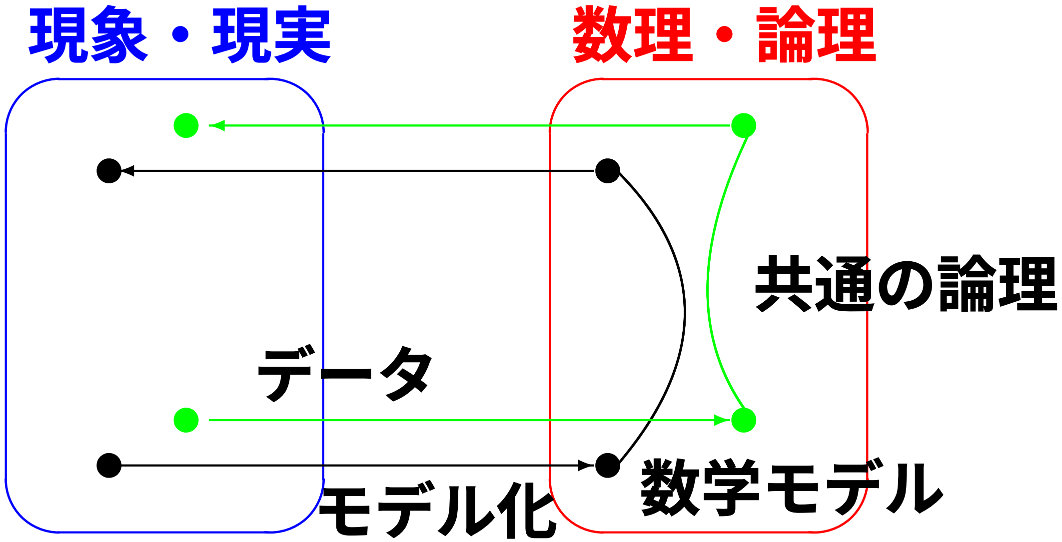
3. 離散凸とは…

最適化の世界

（復習）

連続／離散

線形／凸／非線形



モデリング ＋ 理論 ＋ アルゴリズム

最適化の発展　(連続変数)

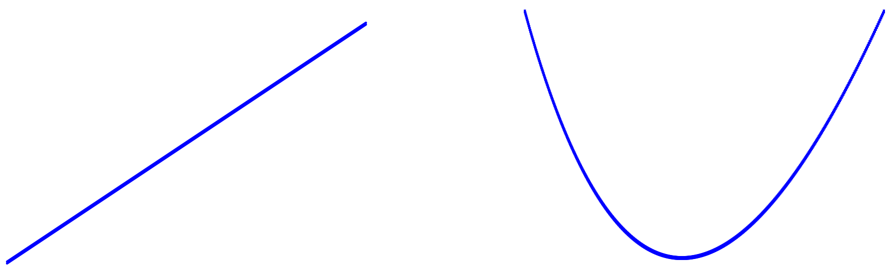
1947年	線形計画	Dantzig
1960年	非線形計画，ニュートン法	Powell, Fletcher
1970年	凸解析・双対理論	Rockafellar
1979年	楕円体法	Khachiyan
1984年	内点法	Karmarkar
1995年	半正定値計画	Alizadeh, Nesterov, Nemirovski

理論：線形／凸／非線形

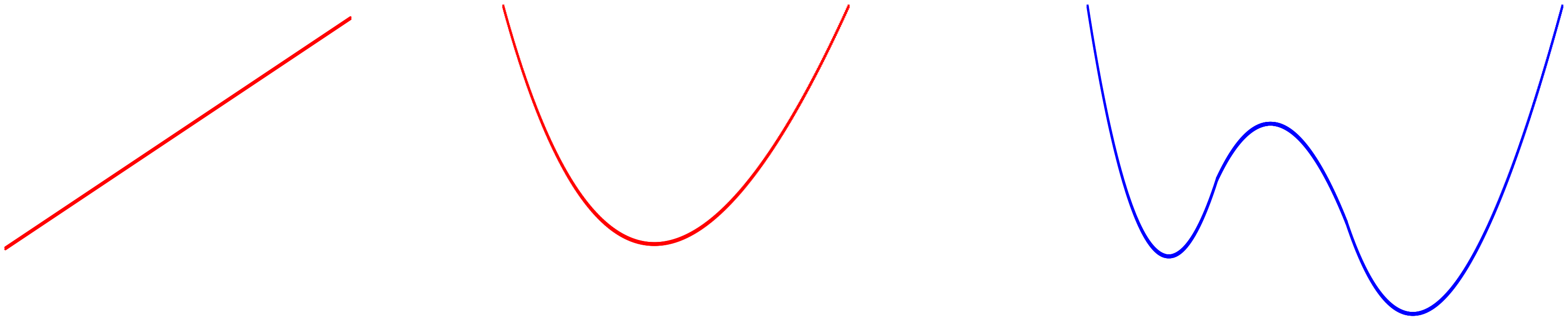
環境：計算パワーの増大

1．凸関数とは…

線形 から 凸 へ



凸 関 数　(理論の主役)



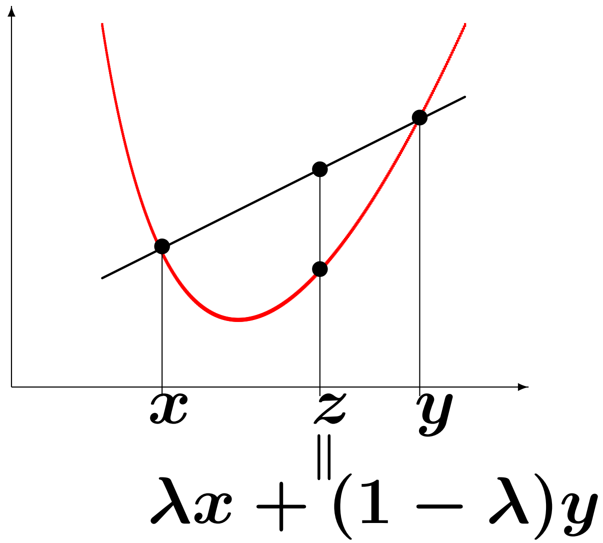
線形関数　　凸関数　　非凸関数

←　非線形関数　→

f が凸関数 $\Longleftrightarrow$

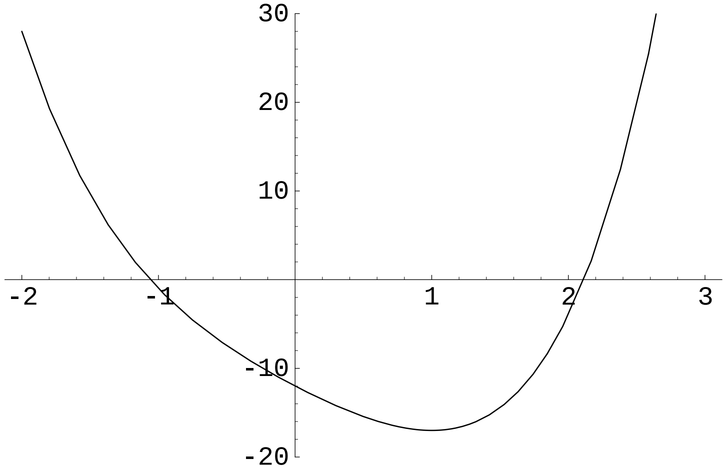
$$\lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) \geq f(\lambda x + (1-\lambda) y)$$

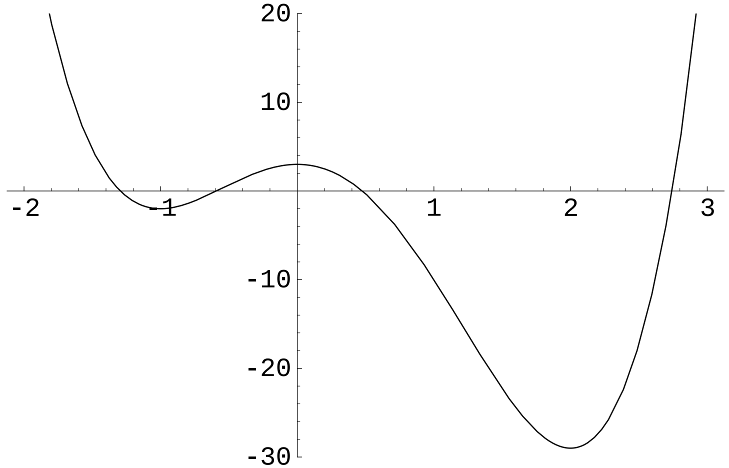
$$(0 < \forall\ \lambda < 1)$$



凸関数 と 凸でない関数

$$f(x) = x^4 + 2x^2 - 8x - 12 \qquad f(x) = 3x^4 - 4x^3 - 12x^2 + 3$$





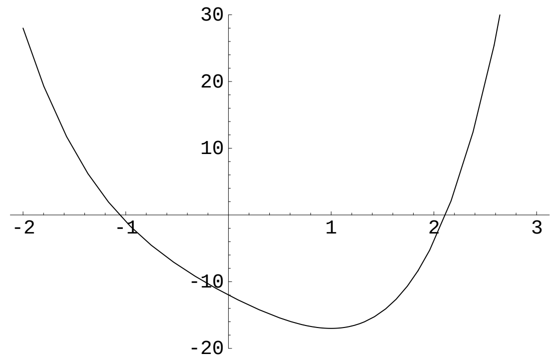
凸関数の判定法　(滑らかな関数に対して)

fが凸関数 $\iff$ すべての x に対して $f''(x) \geq 0$

$$f(x) = x^4 + 2x^2 - 8x - 12$$

$\Rightarrow$ $f'(x) = 4x^3 + 4x - 8$

$\Rightarrow$ $f''(x) = 12x^2 + 4 > 0$ $\Rightarrow$ 凸

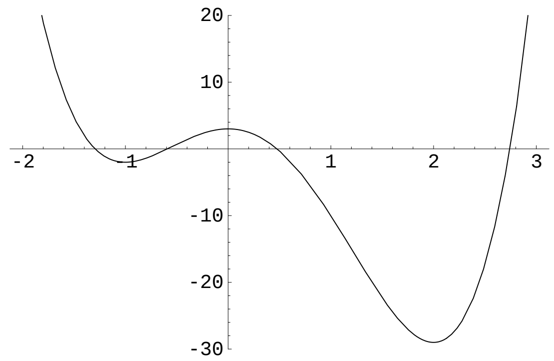


$$f(x) = 3x^4 - 4x^3 - 12x^2 + 3$$

$\Rightarrow$ $f'(x) = 12x^3 - 12x^2 - 24x$

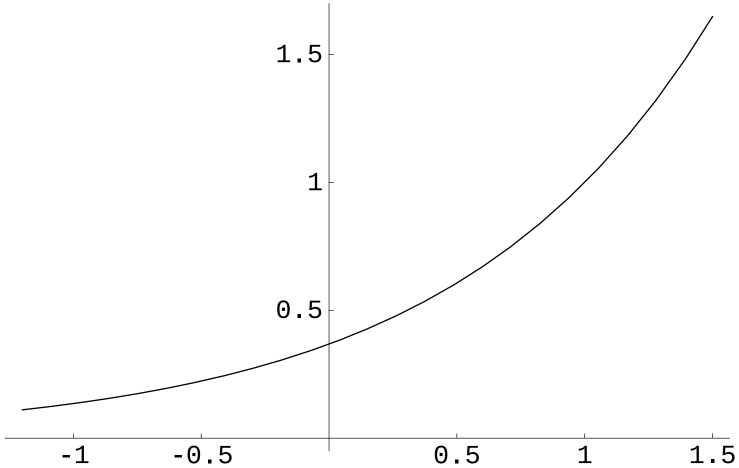
$\Rightarrow$ $f''(x) = 36x^2 - 24x - 24$

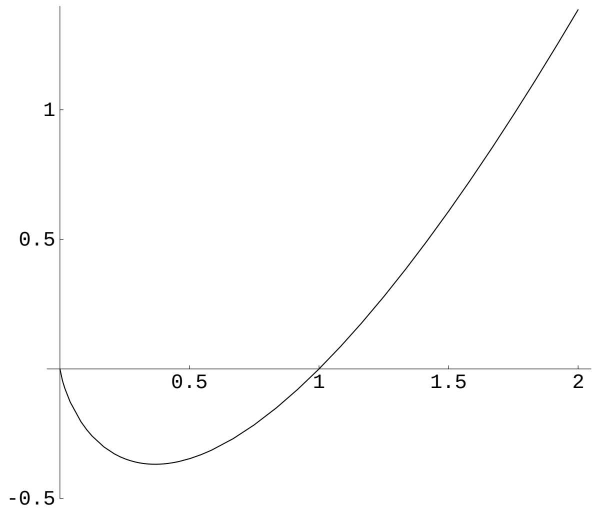
$\Rightarrow$ $f''(0) = -24 \quad < 0$ $\Rightarrow$ 凸でない



凸関数の例

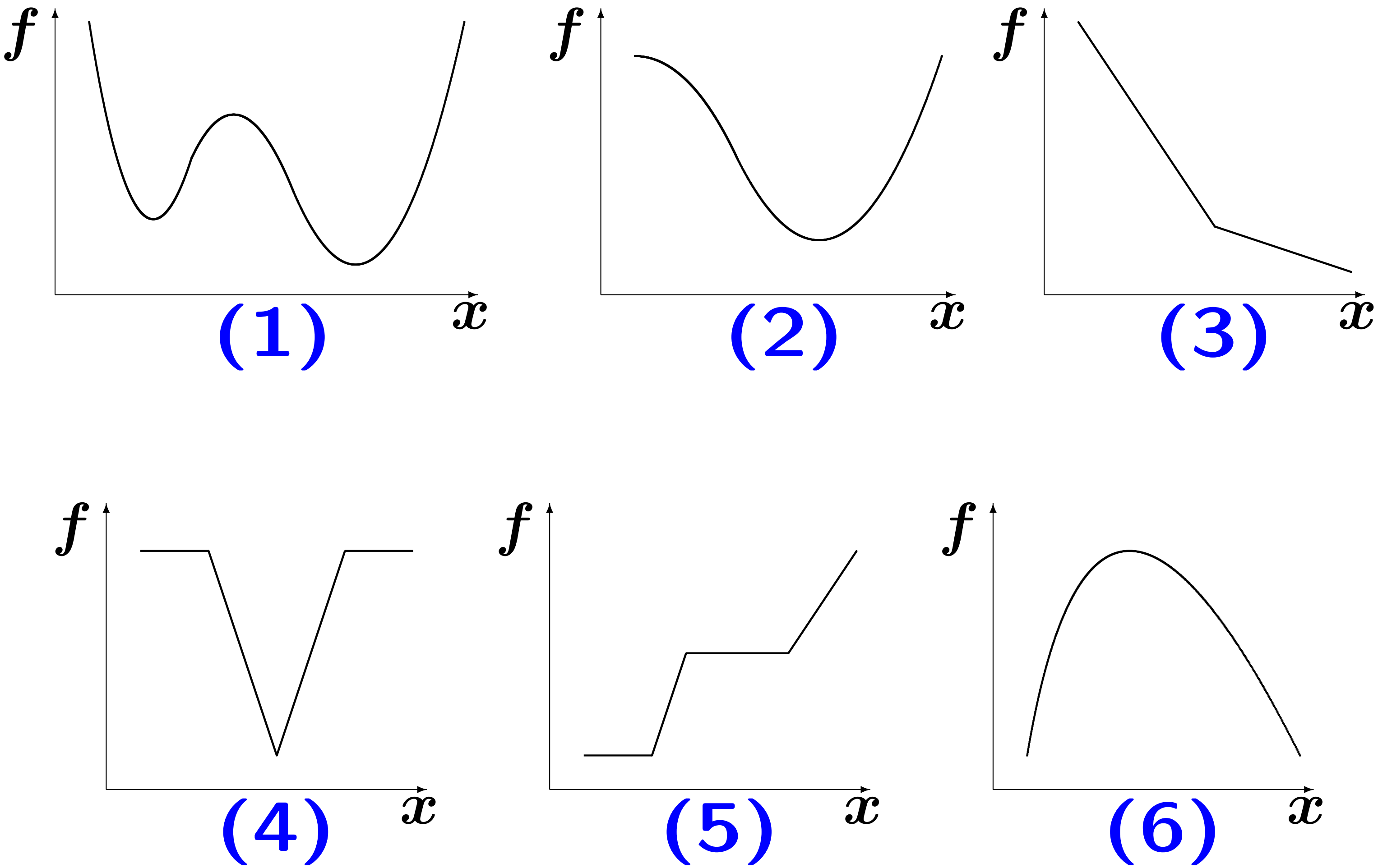
$$f(x) = \exp(x-1) \qquad\qquad f(x) = x\log x$$





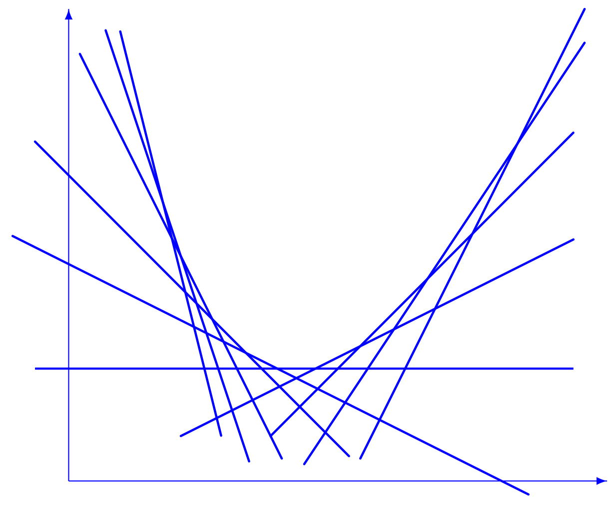
$$f''(x) = \exp(x-1) \; > 0 \qquad\qquad f''(x) = 1/x \; > 0$$

凸関数 と 凸でない関数



２．凸の意義は…

双対性へ



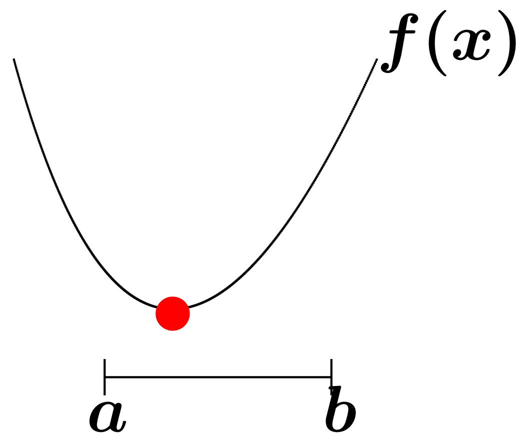
最小化問題

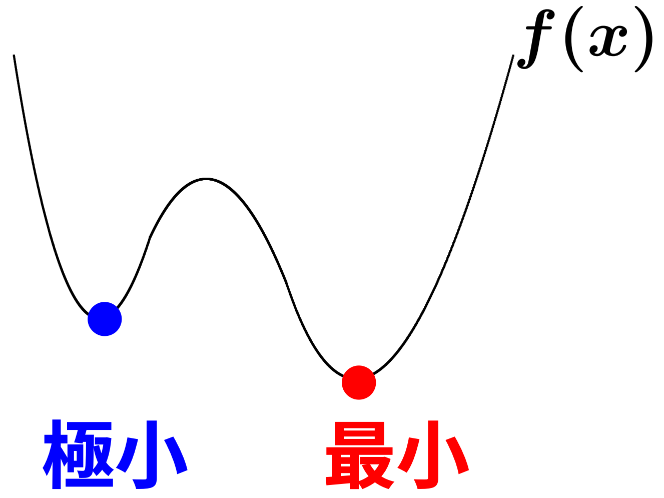
最小化　$f(x)$

制約条件　$a \leq x \leq b$

最小化　$f(x_1, x_2, \ldots)$

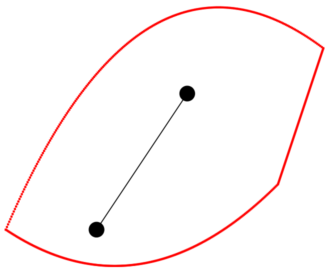
制約条件　$(x_1, x_2, \ldots) \in S$

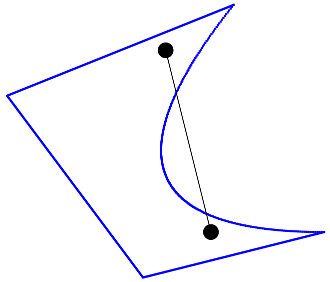




凸計画問題：凸集合 の上で 凸関数 を最小化

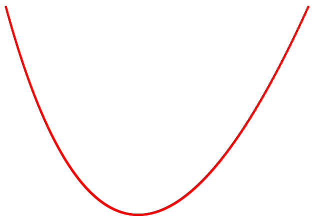
凸集合 と 凸関数

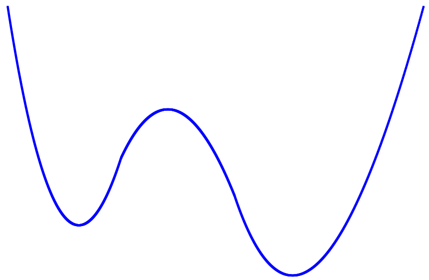




凸集合

凸でない集合





凸関数

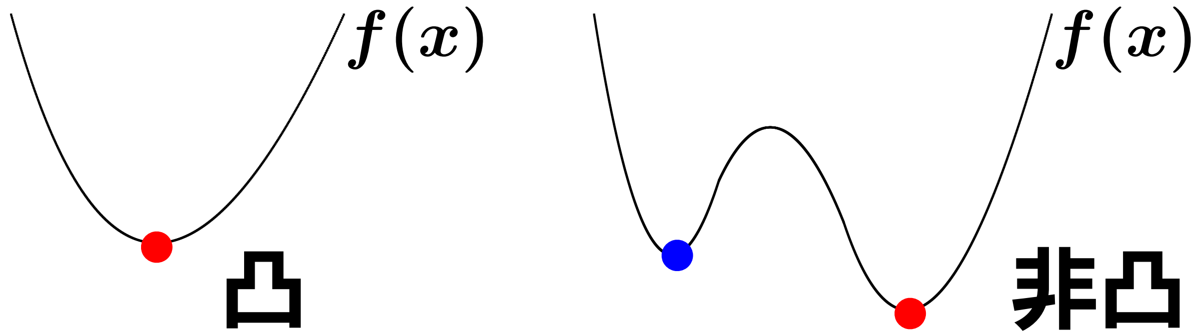
凸でない関数

$f : \mathrm{R}^n \to \mathrm{R}$ が凸関数 $\Longleftrightarrow$

$$\lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) \geq f(\lambda x + (1-\lambda) y) \qquad (0 < \forall\ \lambda < 1)$$

最適化 における 凸関数 の 意義

局所的最小　＝　大域的最小



種々の双対性

- ルジャンドル変換
- 最大最小定理

線形計画法の双対性

主 問 題

Min. $c^\top x$

s.t. $Ax = b$

$x \geq 0$

双 対 問 題

Max. $b^\top y$

s.t. $A^\top y \leq c$

$$
\begin{array}{ll}
\text{Min.} & 12\,x_1 + 4\,x_2 + 3\,x_3 \\
\text{s.t.} & \begin{array}{rcl} x_1 + x_2 + x_3 & = & 1 \\ 4\,x_1 + x_2 & = & 2 \\ x_1,\ x_2,\ x_3 & \geq & 0 \end{array}
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{ll}
\text{Max.} & y_1 + 2\,y_2 \\
\text{s.t.} & \begin{array}{rcl} y_1 + 4\,y_2 & \leq & 12 \\ y_1 + y_2 & \leq & 4 \\ y_1 & \leq & 3 \end{array}
\end{array}
$$

双対定理：主問題の最小値＝双対問題の最大値

双対定理の利用法 (精度保証)

$$\alpha = \text{Min. } c^\top x$$
$$\text{s.t. } Ax = b, \; x \geq 0$$

線形計画法の双対定理

$$\boxed{\min\{c^\top x \mid Ax = b, x \geq 0\} = \alpha = \max\{b^\top y \mid A^\top y \leq c\}}$$

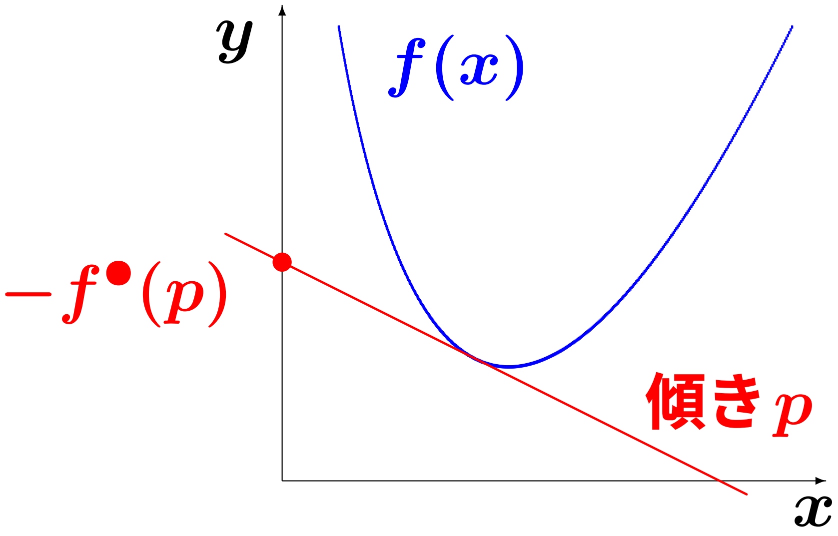
条件を満たす x に対して $0 \leq c^\top x - \alpha \leq \boxed{?}$

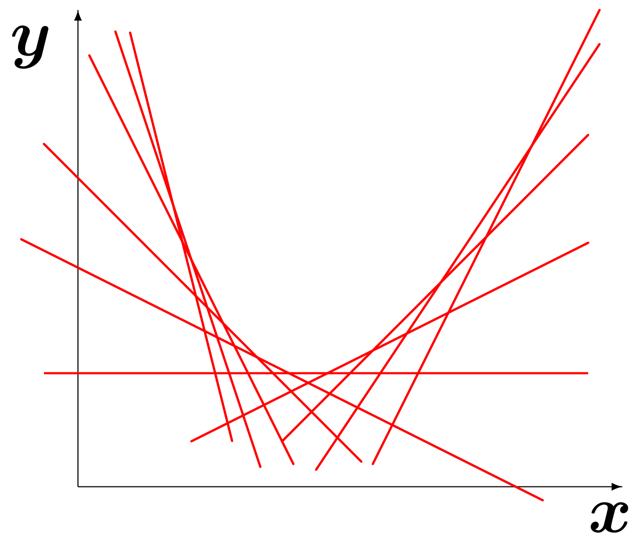
誤差限界

$\Longrightarrow$ 任意のy に対して $\boxed{?} = c^\top x - b^\top y$

ルジャンドル変換

凸関数　＝　接線の包絡線





ルジャンドル変換　$f^{\bullet}(p) = \max_{x} \{p \cdot x - f(x)\}$

$\boxed{\textbf{定理：}\quad \textbf{凸関数}\ f \mapsto f^{\bullet} \mapsto f^{\bullet\bullet} = f}$

ルジャンドル変換の計算法

$$f^{\bullet}(p) = \max_{x}\{\underline{p \cdot x - f(x)}\}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dx}(\underline{p \cdot x - f(x)}) = p - f'(x) = 0$$

$$\Rightarrow p = f'(x)$$

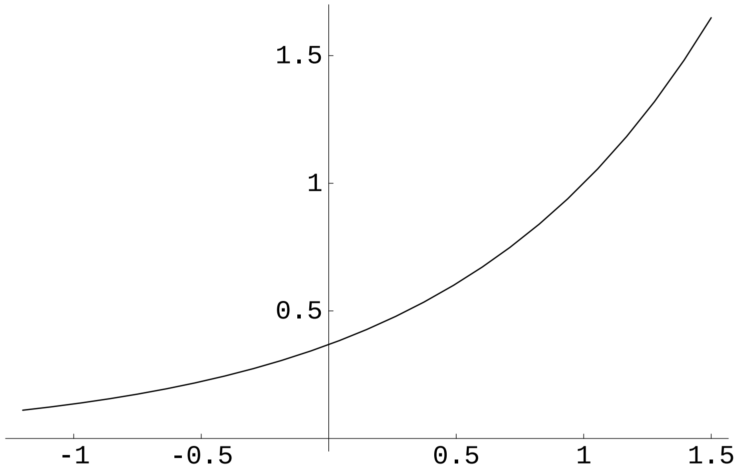
$$\Rightarrow x = x(p)$$

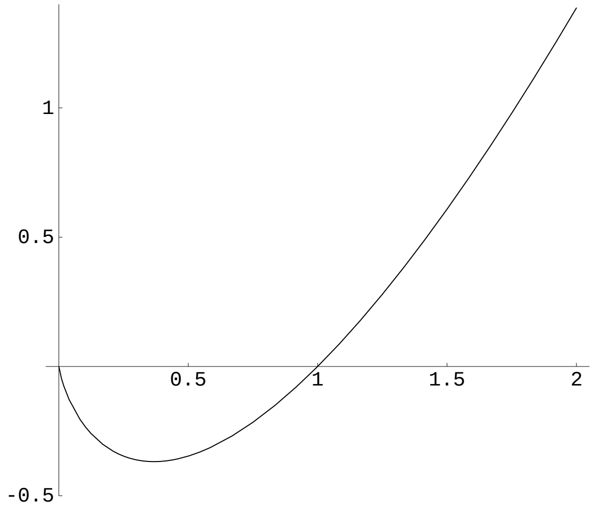
$$\Rightarrow f^{\bullet}(p) = p \cdot x(p) - f(x(p))$$

A.M.Legendre
(1752～1833)

画像引用：Wikipediaより

ルジャンドル変換の例（1）





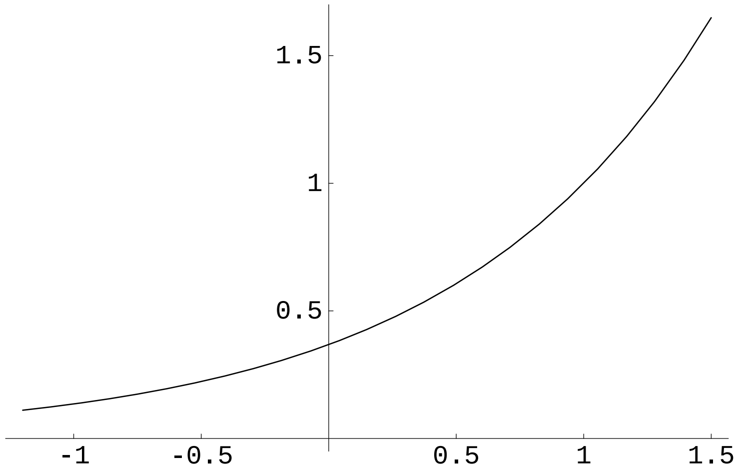
$$f(x) = \exp(x-1) \qquad \longrightarrow \qquad g(p) = p\log p$$

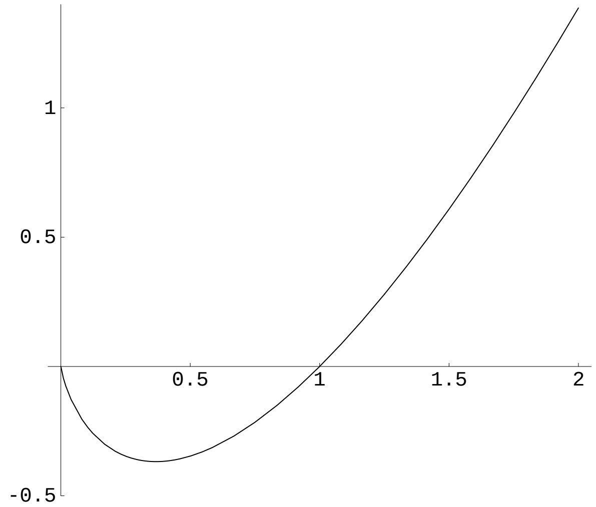
$$f^{\bullet}(p) = g(p)$$

$$p = f'(x) = \exp(x-1) \;\Rightarrow\; x = 1 + \log p$$

$$\Rightarrow\; f^{\bullet}(p) = p\cdot x - f(x) = p\cdot(1+\log p) - p = p\log p$$

ルジャンドル変換の例（2）





$$f(x) = \exp(x-1) \quad \longleftarrow \quad g(p) = p \log p$$

$$f(x) = g^{\bullet}(x)$$

$$x = g'(p) = 1 + \log p \;\Rightarrow\; p = e^{x-1}$$

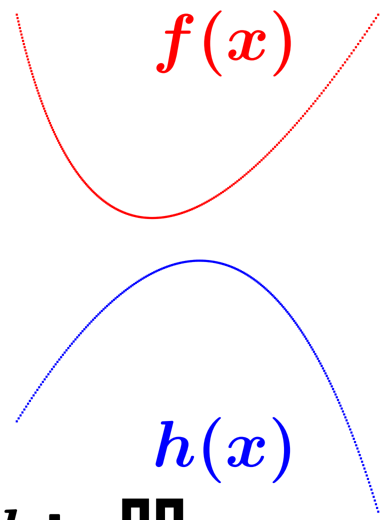
$$\Rightarrow\; g^{\bullet}(x) = p \cdot x - g(p) = xe^{x-1} - (x-1)e^{x-1} = e^{x-1}$$

双対定理　(線形から凸へ)

線形計画法の双対定理：

$$\min\{c^\top x \mid Ax = b, x \geq 0\} = \max\{b^\top y \mid A^\top y \leq c\}$$

ルジャンドル変換



$$f^\bullet(p) = \max_x\{p \cdot x - f(x)\}$$

$$h^\circ(p) = \min_x\{p \cdot x - h(x)\}$$

フェンシェル 双対定理　f: 凸　h: 凹

$$\min_x\{f(x) - h(x)\} = \max_p\{h^\circ(p) - f^\bullet(p)\}$$

フェンシェル双対定理の利用法（精度保証）

$$\alpha = \min_x \{f(x) - h(x)\}$$

フェンシェル双対定理

$$\boxed{\min_x \{f(x) - h(x)\} = \alpha = \max_p \{h^\circ(p) - f^\bullet(p)\}}$$

任意の x に対して　$0 \leq [f(x) - h(x)] - \alpha \leq \boxed{?}$

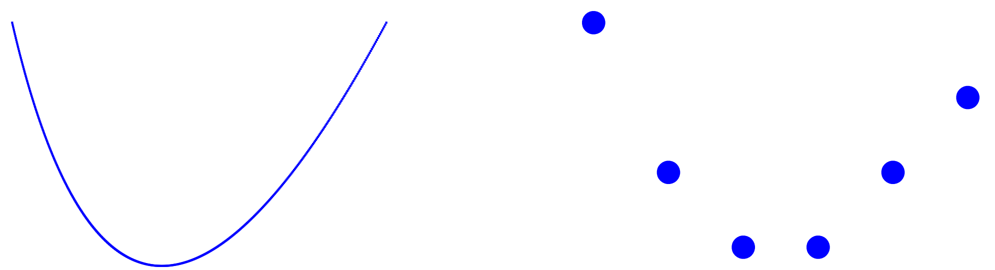
誤差限界

$\Longrightarrow$ 任意のp に対して

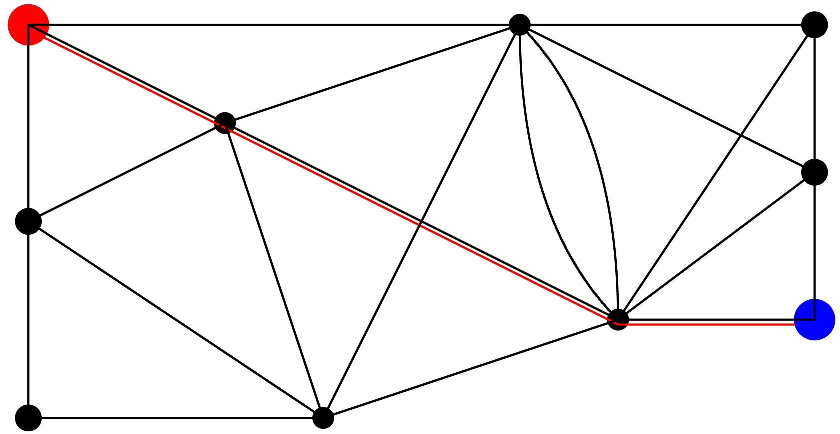
$$\boxed{?} = [f(x) - h(x)] - [h^\circ(p) - f^\bullet(p)]$$

３．離散凸とは…

連続 から 離散 へ



離散最適化



最短路問題		巡回セールスマン問題
簡単に解ける	(経験的事実)	なかなか解けない
Dijkstra法	(アルゴリズム理論)	NP困難

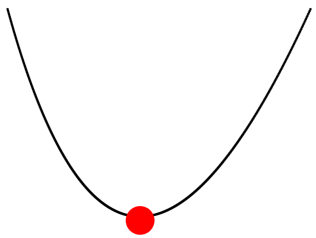
凸解析の視点

計算量の視点

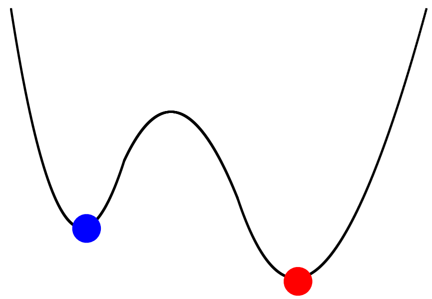
離散凸解析 の 視点

最 短 路 問 題		巡回セールスマン問題
簡単に解ける	(経験的事実)	なかなか解けない
多項式時間	(アルゴリズム理論)	ＮＰ困難

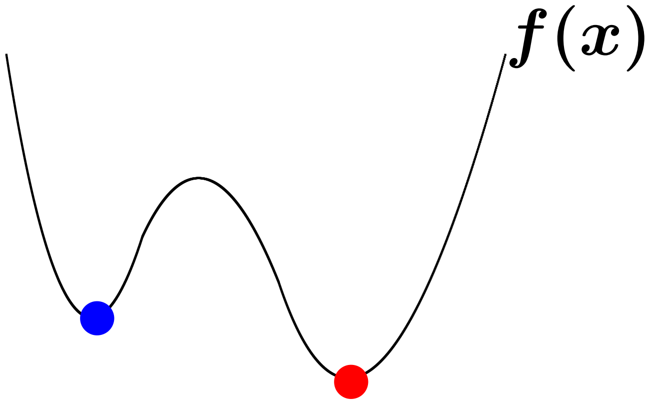
「凸」だから



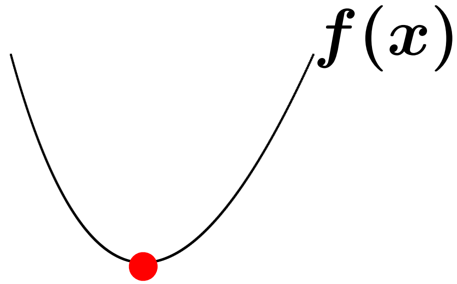
「凸」でないから



最適化

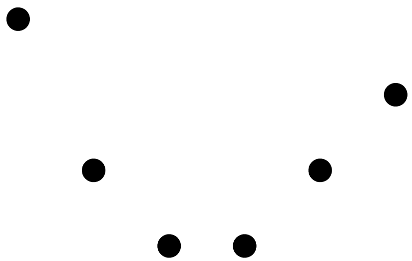


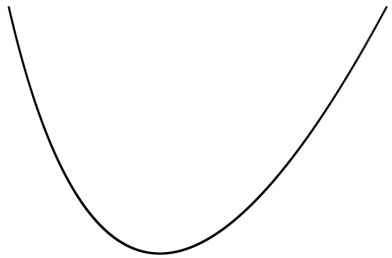
解き易い問題



凸関数

離散 $\Longleftrightarrow$ **連続**



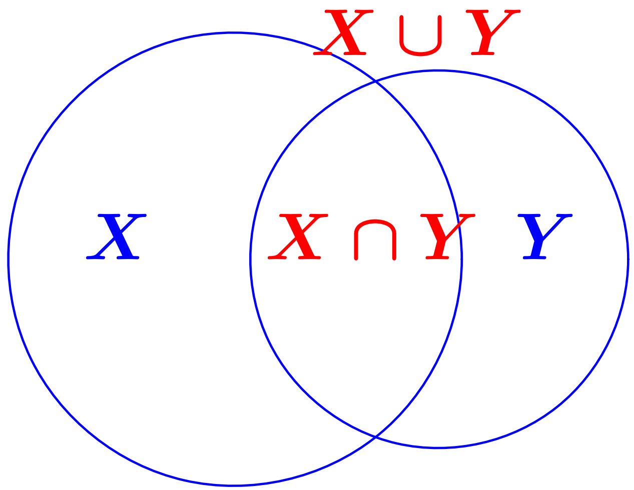


凸関数に似た離散構造　離散構造をもつ凸関数

離散凸解析 の歴史

1935	マトロイド	Whitney
1965	$\boxed{\text{劣モジュラ関数}}$	Edmonds
1975	マトロイドの応用	伊理，冨澤，Recski
1983	$\boxed{\text{劣モジュラ関数}}$と凸性	Lovász，Frank，藤重
1996	離散凸解析 の提唱	室田
2000	$\boxed{\text{劣モジュラ関数}}$ 最小化アルゴリズム	
		岩田，藤重，Fleischer，Schrijver

劣モジュラ集合関数



集合 X の要素数 $|X|$:

$$|X| + |Y| = |X \cup Y| + |X \cap Y|$$

集合関数 $\rho(X)$ が劣モジュラ:

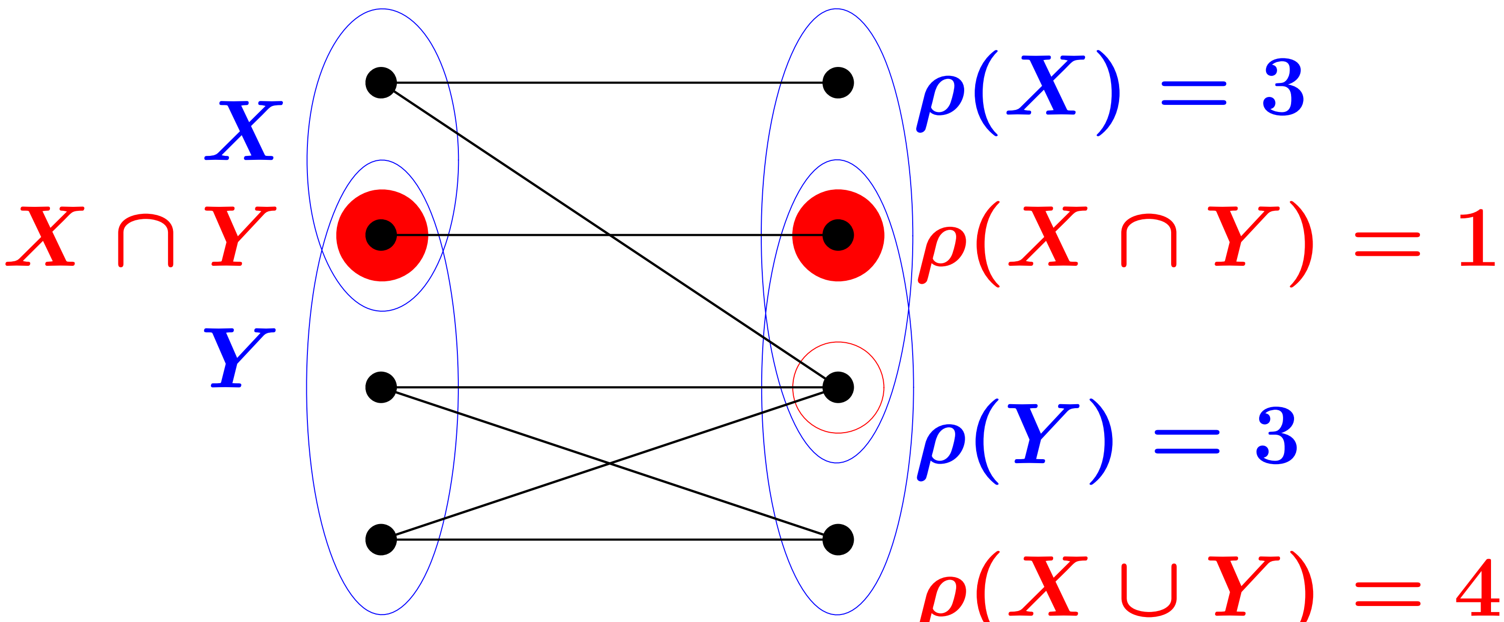
$$\rho(X) + \rho(Y) \geq \rho(X \cup Y) + \rho(X \cap Y)$$

例１　$\rho(X) = \log |X|$

例２　$\rho(X) = \sqrt{|X|}$

劣モジュラ関数の例

例３　$\rho(X) = X$ の友達の人数



$$\rho(X) + \rho(Y) \geq \rho(X \cup Y) + \rho(X \cap Y)$$

劣モジュラ関数 と 凸関数(1980年代)

$$\rho(X) + \rho(Y) \geq \rho(X \cup Y) + \rho(X \cap Y)$$

- 最小化/最大化アルゴリズム

  最小化 $\Rightarrow$ 多項式時間，　最大化 $\Rightarrow$ NP困難

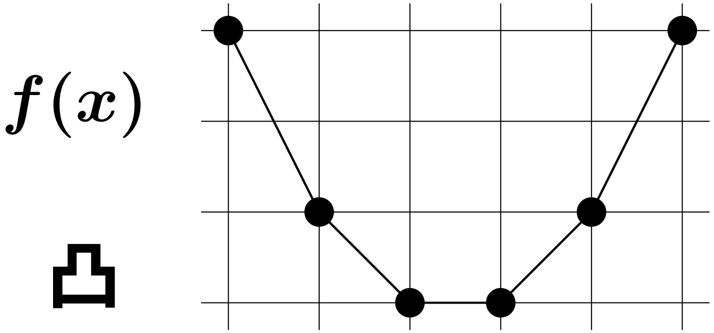
- 凸拡張　（Lovász）

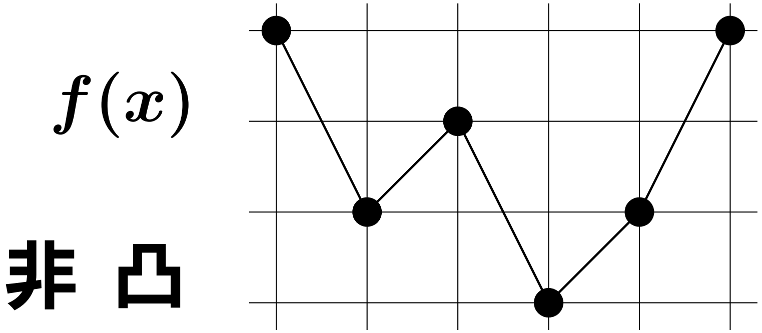
  集合関数が劣モジュラ $\Longleftrightarrow$ Lovász拡張が凸関数

- 双対定理　（Edmonds，Frank，藤重）

劣モジュラ関数 の 双対性
＝ 凸性 ＋ 離散性

離散最適化 における「凸構造」とは？





凸構造＝解ける問題

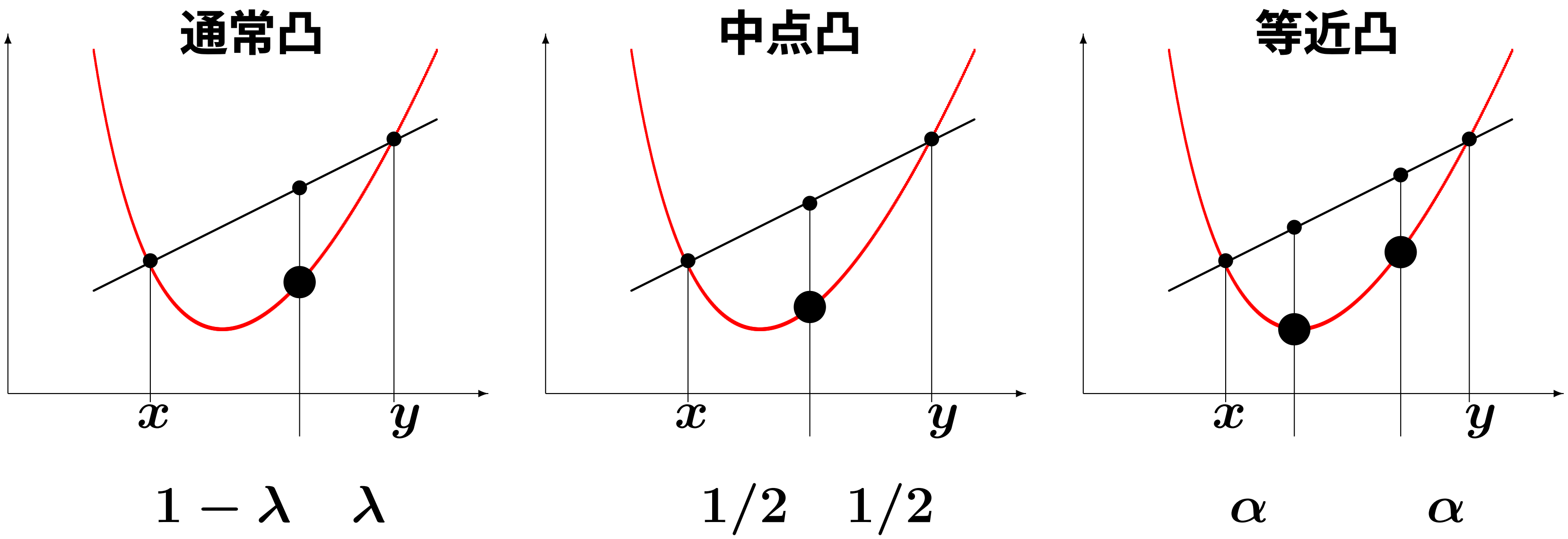
- 局所/大域最適性
- 双対性

凸関数の性質——離散化への準備

通常凸　$\lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) \geq f(\lambda x + (1-\lambda) y)$

$\Leftrightarrow$ **中点凸**　$f(x) + f(y) \geq 2 f(\frac{x+y}{2})$

$\Leftrightarrow$ **等近凸**　$f(x) + f(y) \geq f(x - \alpha(x-y)) + f(y + \alpha(x-y))$



離散化 による 概念構成

通常凸 $\lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) \geq f(\lambda x + (1-\lambda) y)$

中点凸 $f(x) + f(y) \geq 2 f(\frac{x+y}{2})$

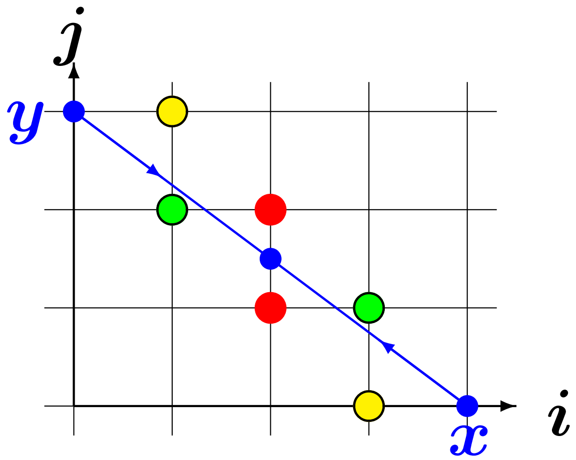
$\longrightarrow$ **離散中点凸** $\geq f\left(\left\lceil \frac{x+y}{2} \right\rceil\right) + f\left(\left\lfloor \frac{x+y}{2} \right\rfloor\right)$

等近凸 $f(x) + f(y) \geq f(x - \alpha(x-y)) + f(y + \alpha(x-y))$

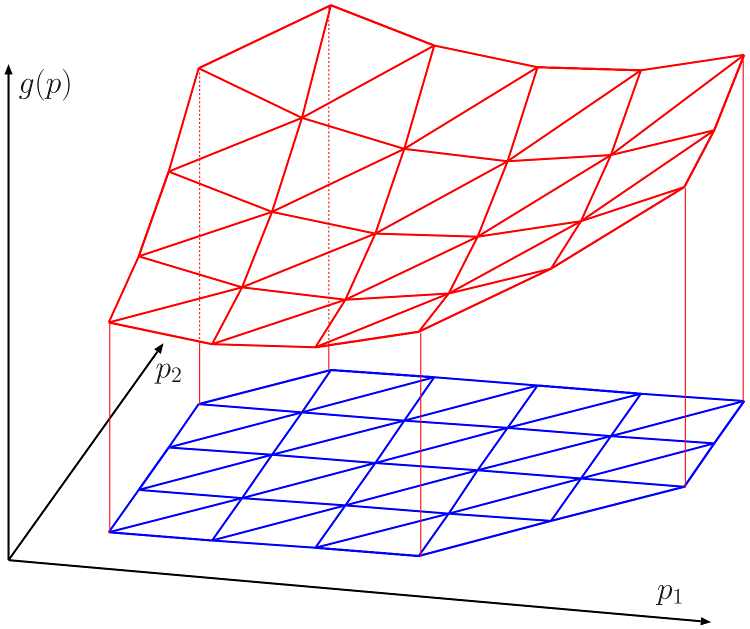
$\longrightarrow$ **交換公理** $\geq \min \left[f(x - e_i) + f(y + e_i), \right.$

$$\left. \min_{x_j < y_j} \{ f(x - e_i + e_j) + f(y + e_i - e_j) \} \right]$$

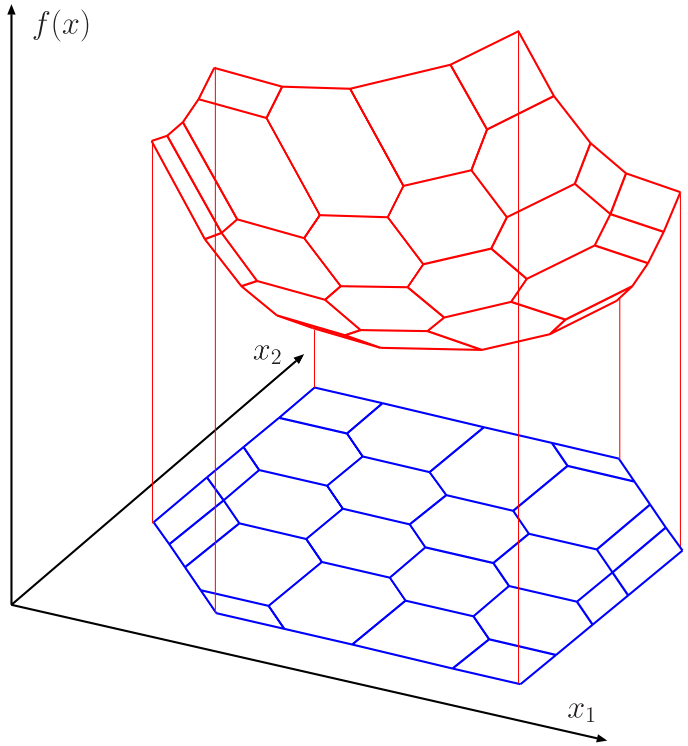
連続 $\mathrm{R}^n \to \mathrm{R}$		離散 $\mathrm{Z}^n \to \mathrm{R}$
中点凸性	$\longrightarrow$	離散中点凸性
$\Updownarrow$	離散化	$\mathrm{L}^\natural$凸関数
凸性		
$\Updownarrow$	離散化	$\mathrm{M}^\natural$凸関数
等近凸性	$\longrightarrow$	交換公理



離散凸関数のグラフ



L$^\natural$凸関数



M$^\natural$凸関数

離散世界でも　凸解析の視点　が有効

凸解析の視点 ―― 計算量の視点

離散凸解析　⇓

凸解析の視点 ―― 計算量の視点

離 散 凸 解 析　概 観

Ｌ 凸 関 数 $\longleftrightarrow$ Ｍ 凸 関 数

理論的
- 局所最適 $\Longleftrightarrow$ 大域最適

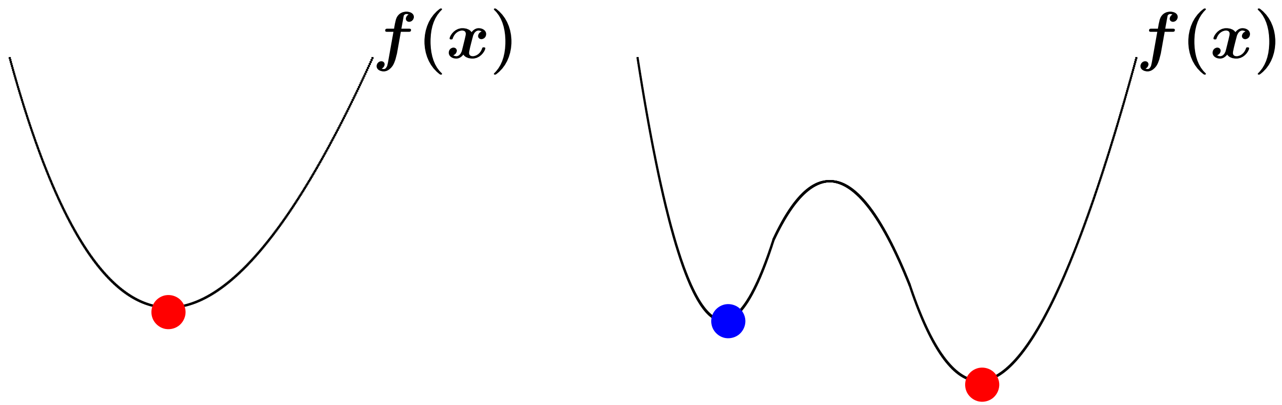
完備性
- 共役性：ルジャンドル 変換
- 双対定理（離散分離，フェンシェル双対）
- 最小化アルゴリズム

分野的
- ネットワークフロー（電気回路）

横断性
- ＯＲ（待ち行列，資源配分）
- 多項式行列
- 効用関数，ゲーム理論

最適性規準

大域最適 と 局所最適



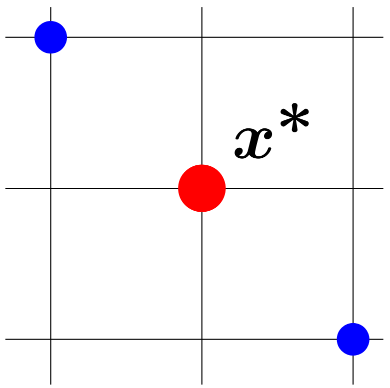
凸　　　　非凸

Ｍ凸関数 の 最適性規準 (離散変数)

定理：$f : \mathrm{Z}^n \to \mathrm{R}$ 　Ｍ凸関数

x^*: 大域最小

$\Longleftrightarrow$ 局所最小 $f(x^*) \leq f(x^* - e_i + e_j)$ 　$(\forall i, j)$

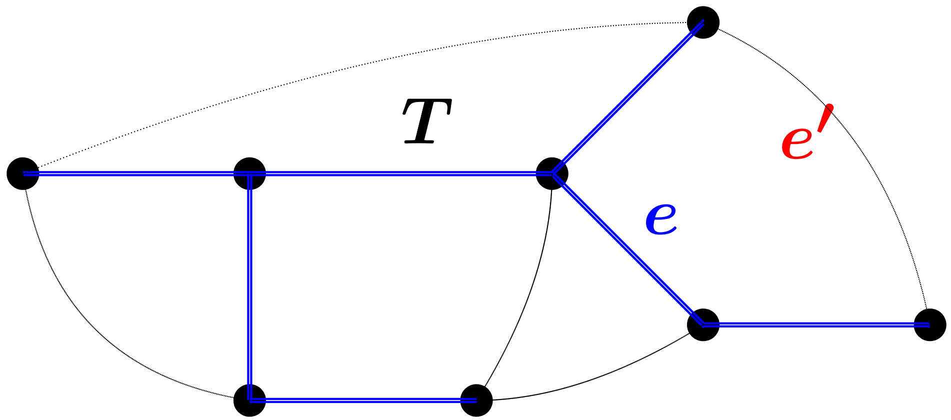


例：$x^* + (0, 1, 0, 0, -1, 0, 0, 0)$

n^2回の関数値評価でチェック可能

最小木問題 の 最適性規準

Ｍ凸関数の例



枝長関数 $d : E \to \mathrm{R}$

木 T の総長

$$\tilde{d}(T) = \sum_{e \in T} d(e)$$

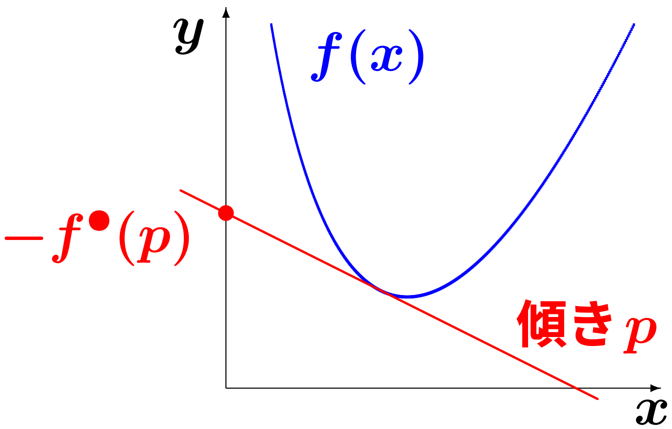
定理：

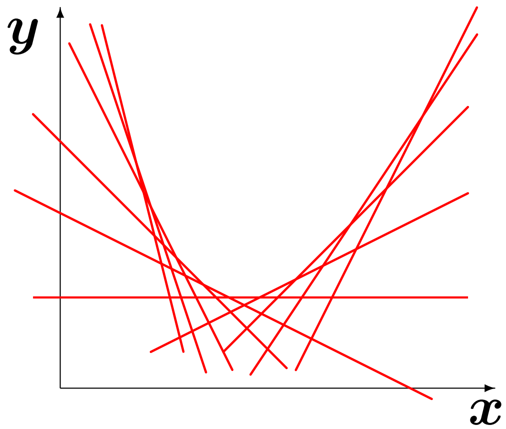
$$T\text{が最小木} \iff \tilde{d}(T) \leq \tilde{d}(T - e + e') \qquad (e' \in C(T \mid e))$$

$$\iff d(e) \leq d(e') \qquad (e' \in C(T \mid e))$$

離散ルジャンドル変換

凸関数　＝　接線の包絡線





離散ルジャンドル変換

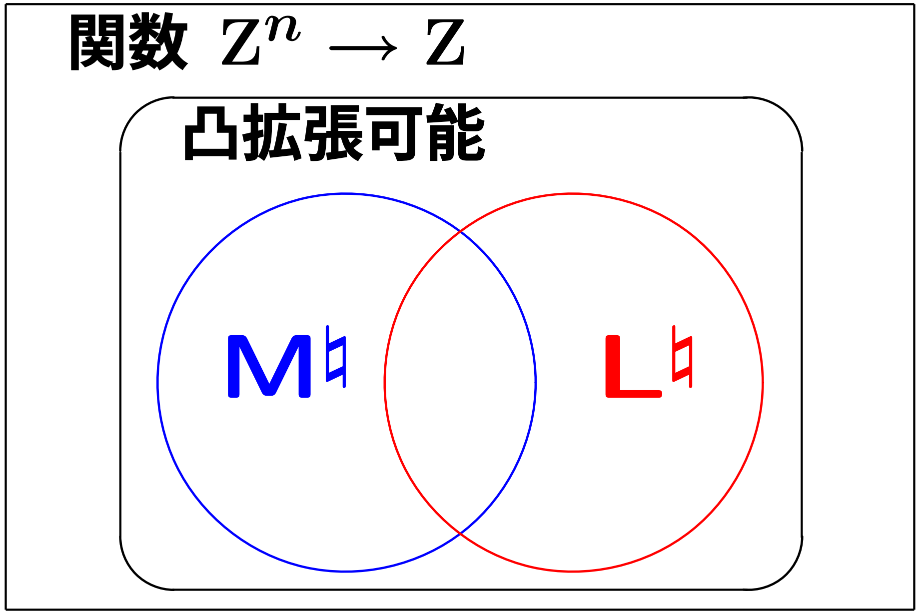
$$f^\bullet(p) = \max_{x \in \mathbf{Z}^n} \{p \cdot x - f(x)\}$$

$\Rightarrow$ $\quad f : \mathbf{Z}^n \to \mathbf{Z}$ **に対して** $f^\bullet : \mathbf{Z}^n \to \mathbf{Z}$

離散双対性（共役性定理）

定理： M凸関数 $f \mapsto$ L凸関数 $f^{\bullet} \mapsto f^{\bullet\bullet} = f$

L凸関数 $f \mapsto$ M凸関数 $f^{\bullet} \mapsto f^{\bullet\bullet} = f$



最 大 ・ 最 小 定 理

離散ルジャンドル変換 $f, h : \mathbb{Z}^n \to \mathbb{Z}$

$$f^\bullet(p) = \max\{p \cdot x - f(x) \mid x \in \mathbb{Z}^n\}$$

$$h^\circ(p) = \min\{p \cdot x - h(x) \mid x \in \mathbb{Z}^n\}$$

フェンシェル型 双対定理 f: M$^\natural$凸 h: M$^\natural$凹

$$\min_{x \in \mathbb{Z}^n} \{f(x) - h(x)\} = \max_{p \in \mathbb{Z}^n} \{h^\circ(p) - f^\bullet(p)\}$$

$\Uparrow$

自己共役形 （$f^\bullet$: L$^\natural$凸 h°: L$^\natural$凹）

	【連続】	【離散】
1947年	————線形計画————	
1970年	凸解析	多項式性，NP完全性
	双対理論	劣モジュラ関数
1980年	————楕円体法————	
1984年	内点法	
1995年	半正定値計画	近似アルゴリズム
2000年		離散凸解析

凸解析（双対理論）——構造(structure)

計算量理論（アルゴリズム）——構成(construction)

今回のまとめ　　　　　次回：　計算（アルゴリズム）

連続	離散

凸

局所最適性

双対定理