離散凸関数のお話

藤重 悟

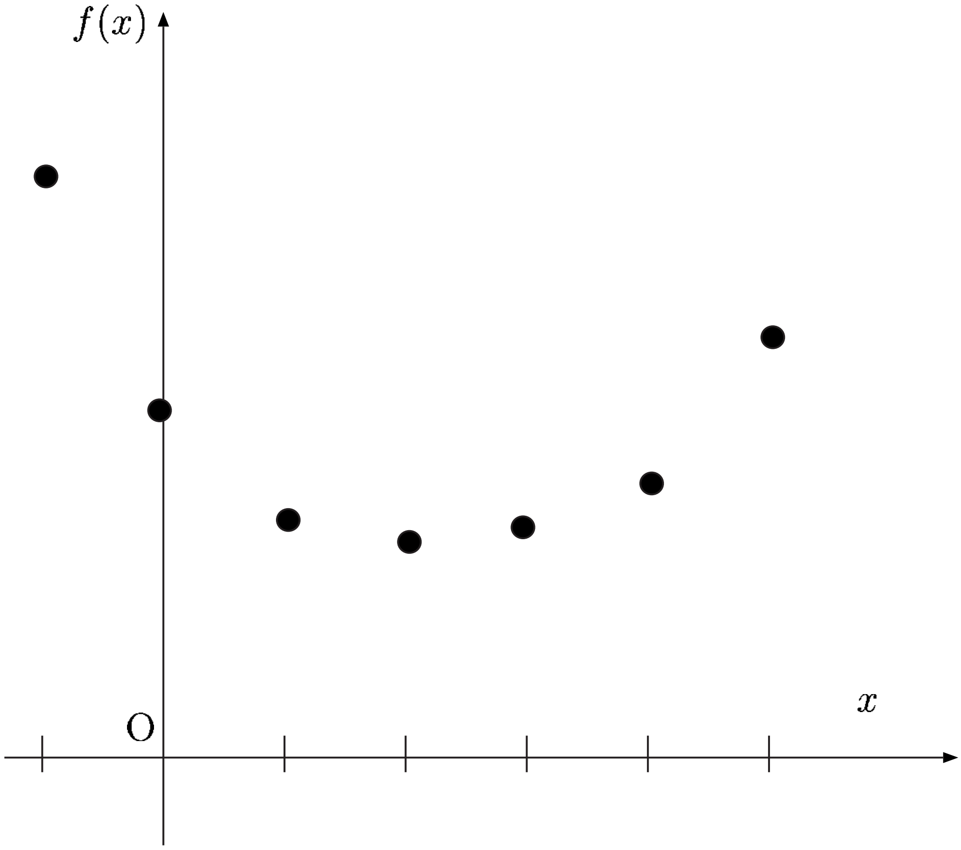
(京都大学数理解析研究所)

要旨：整数格子点上の関数が自然な意味で凸であるのは、どのような場合か。その微分に対応する劣勾配の持つべき性質、凸関数と凹関数の分離定理などを分かりやすく説明し、室田一雄氏の「離散凸解析」の‘はやわかり入門’のお話をする。

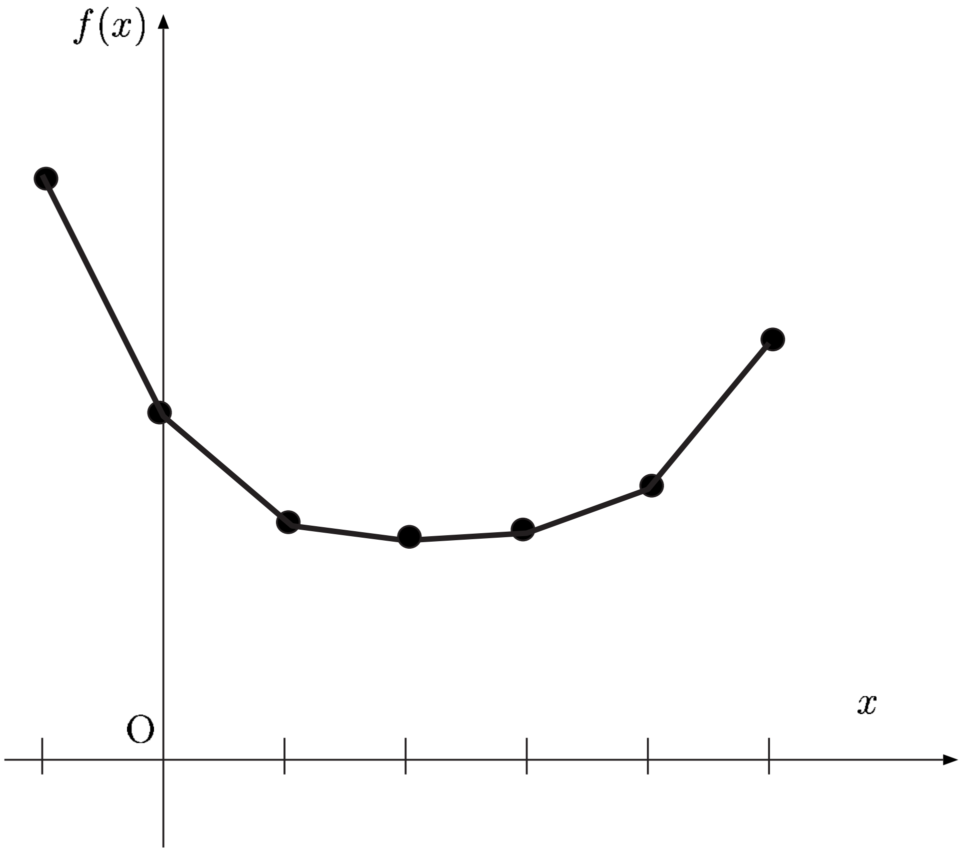
日本 OR 学会北海道支部講演会、2007 年 12 月 4 日

離散凸関数をどう定義するべきか？

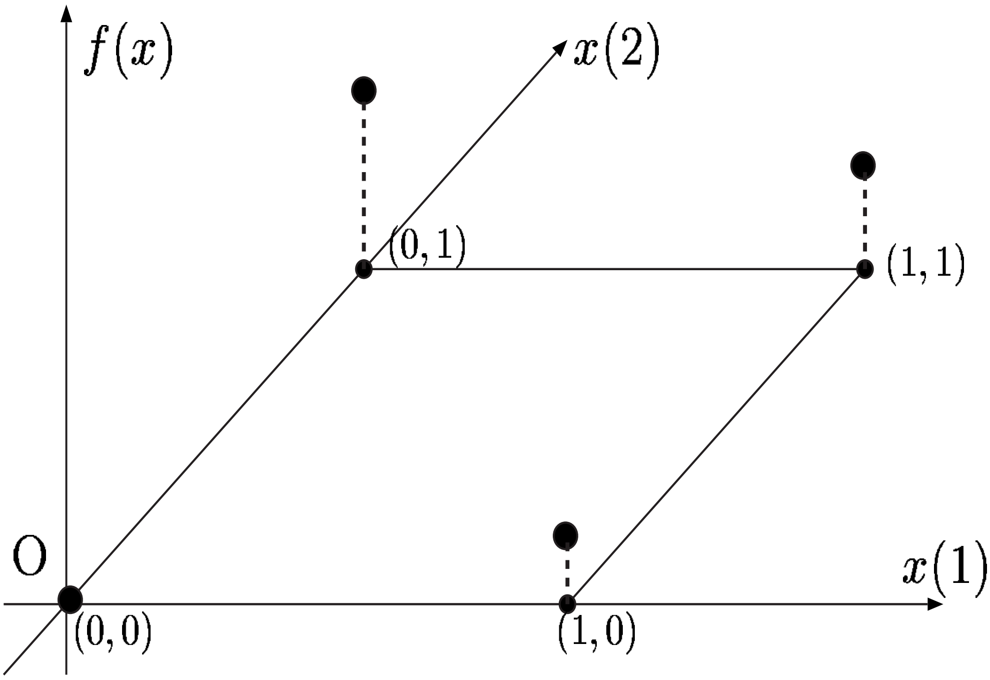
１次元の離散的な関数 $f(x)$



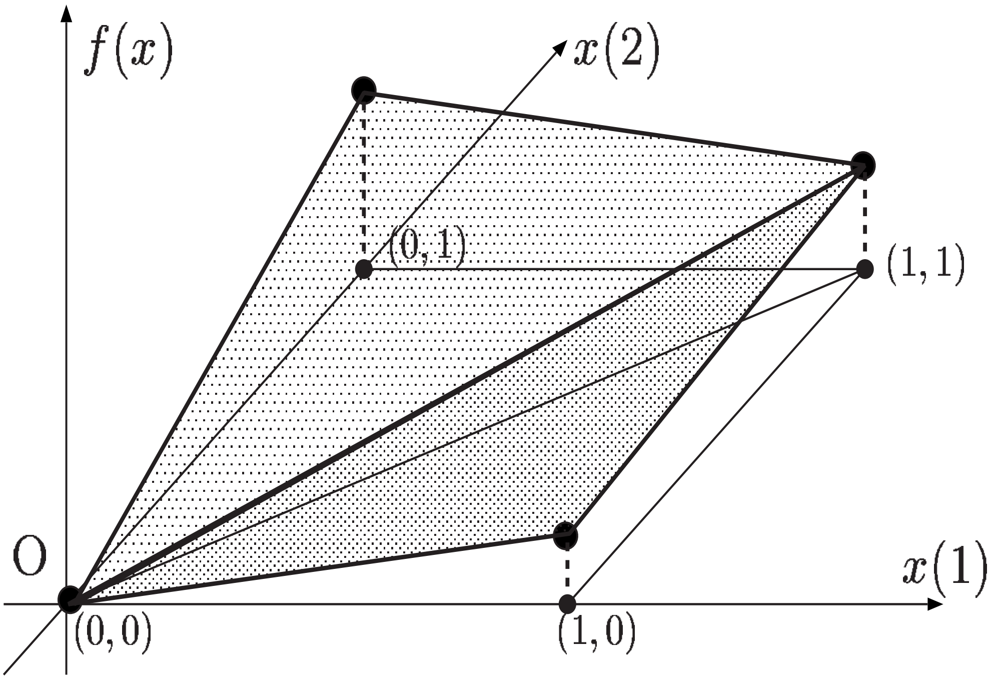
区分線形化で考えればよい（？） （凸関数（？））



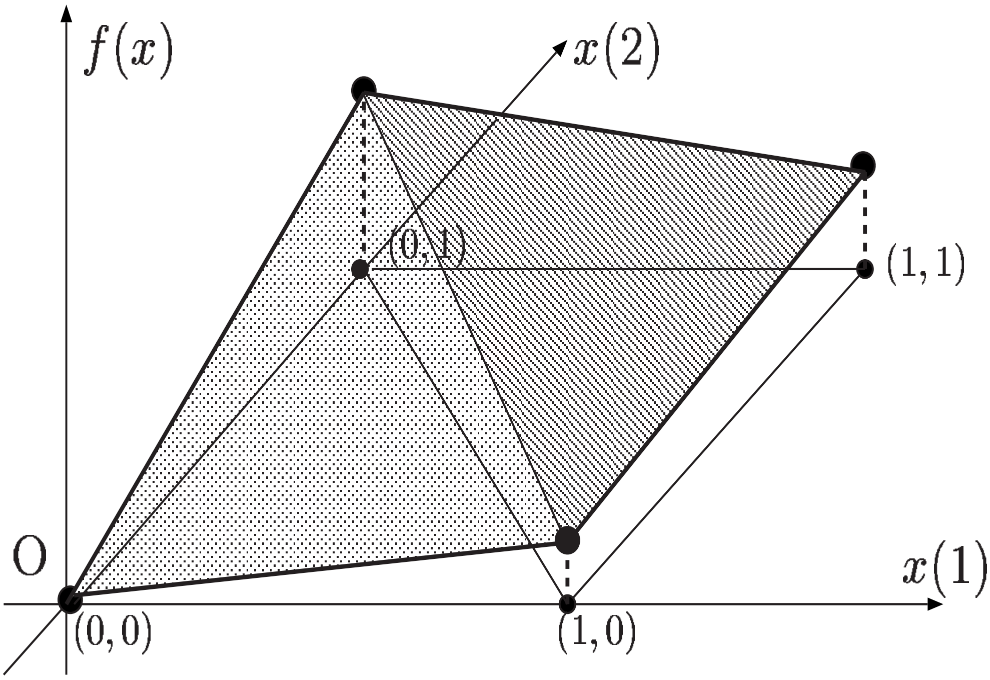
２次元の離散的な関数ではどうすればよいか？



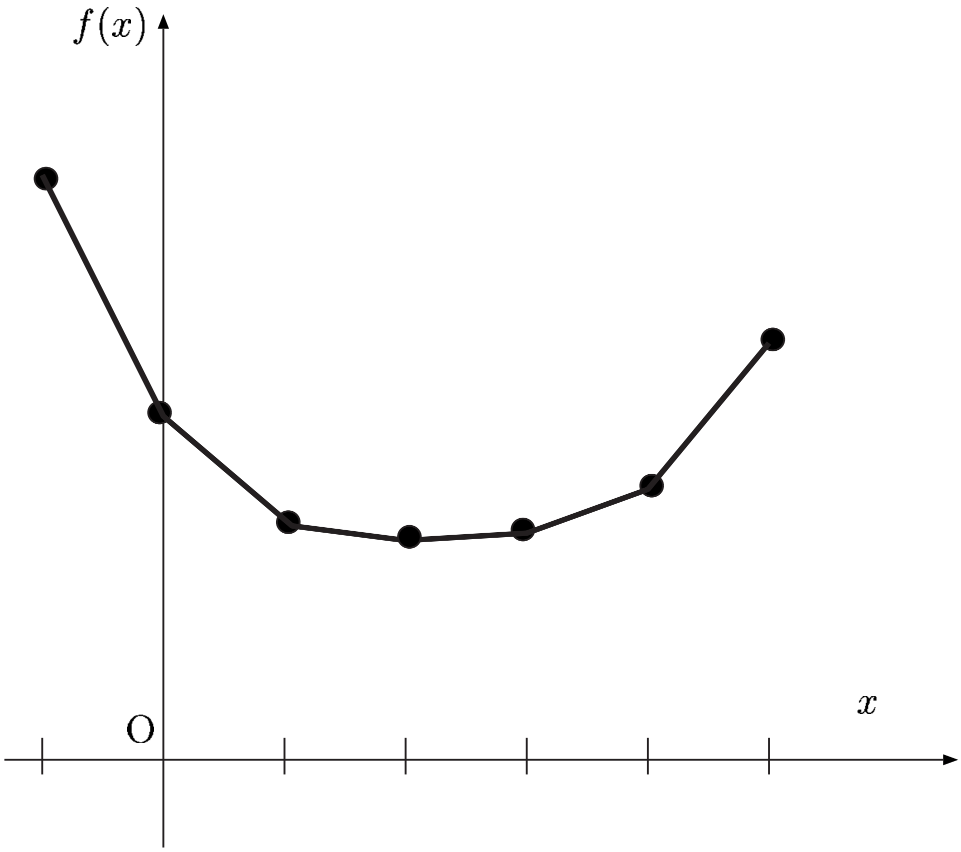
これで、凸関数？



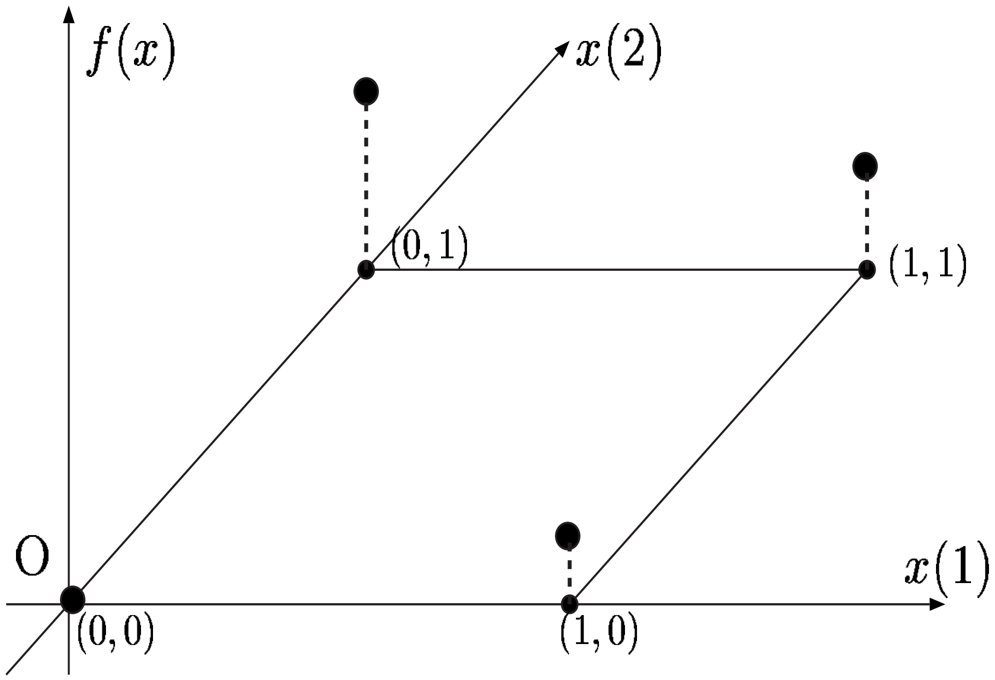
これだと、凹関数？



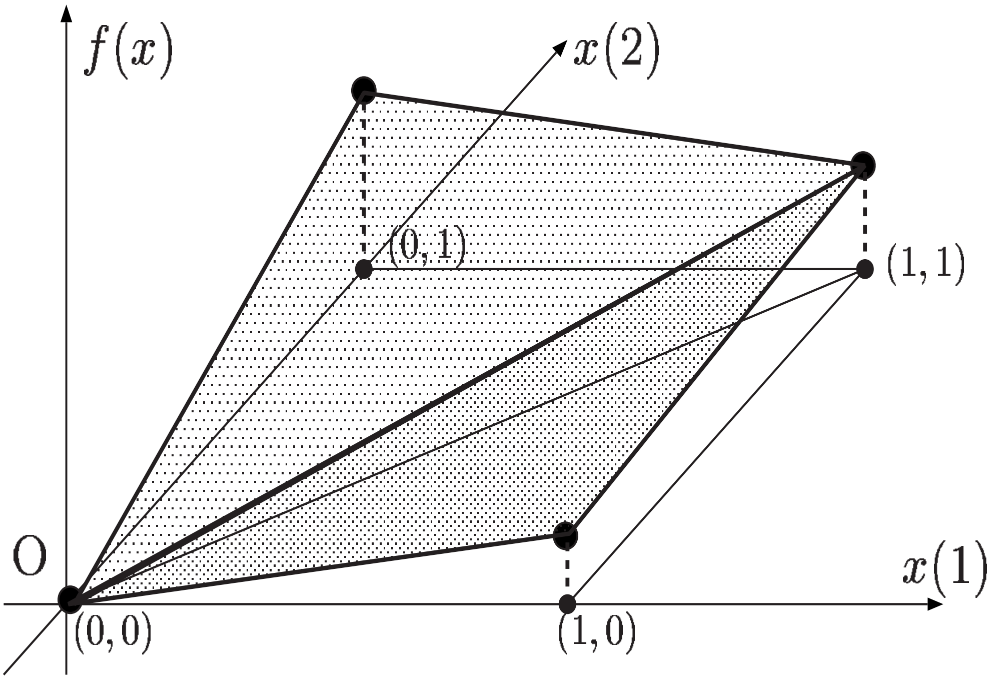
もう一度、１次元の場合（再考）



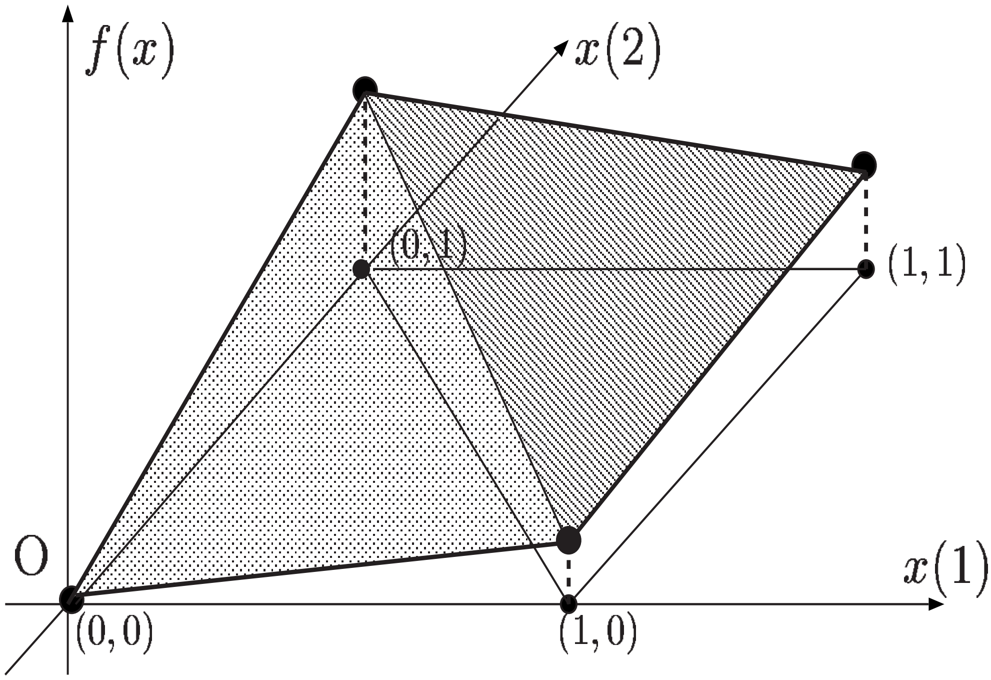
２次元の離散的な関数ではどうすればよいか？（再考）



これだと、凸関数



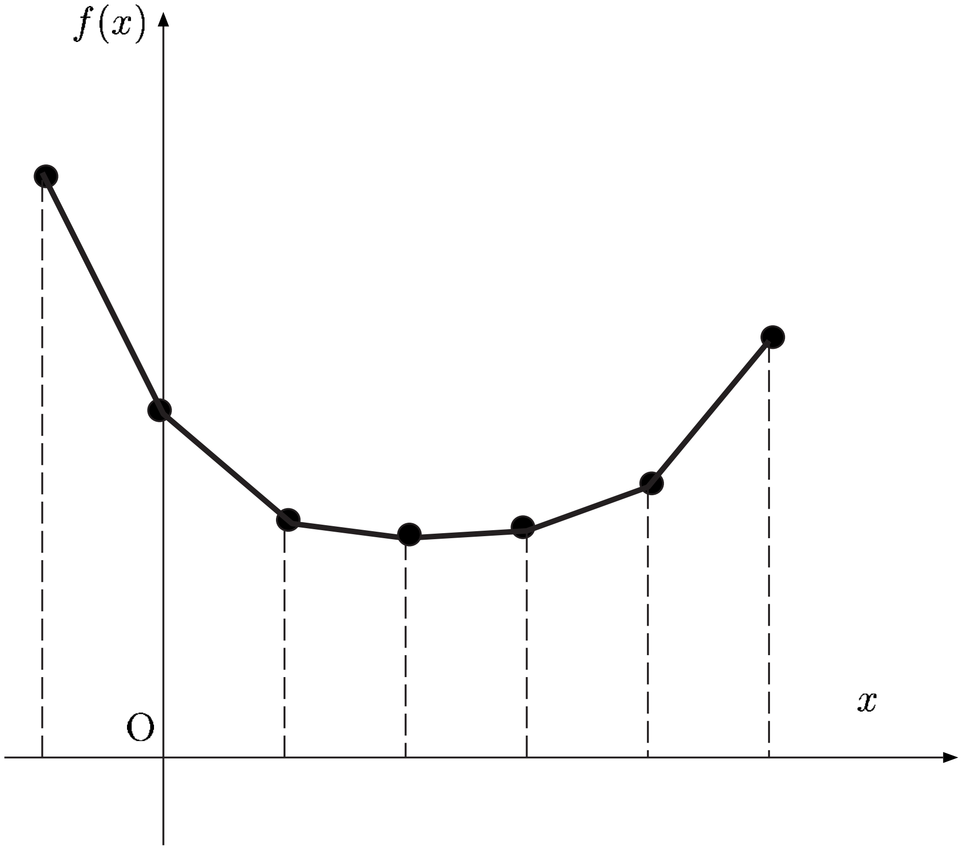
これだと、凹関数



離散的な凸関数の概念は（拡張される）定義域の**単体分割**に依存する！

定められた**単体分割に関する離散凸関数**

１次元では、定義域の単体分割が自然に決まる。



２次元整数格子点に関する**平面の単体分割（三角形分割）**

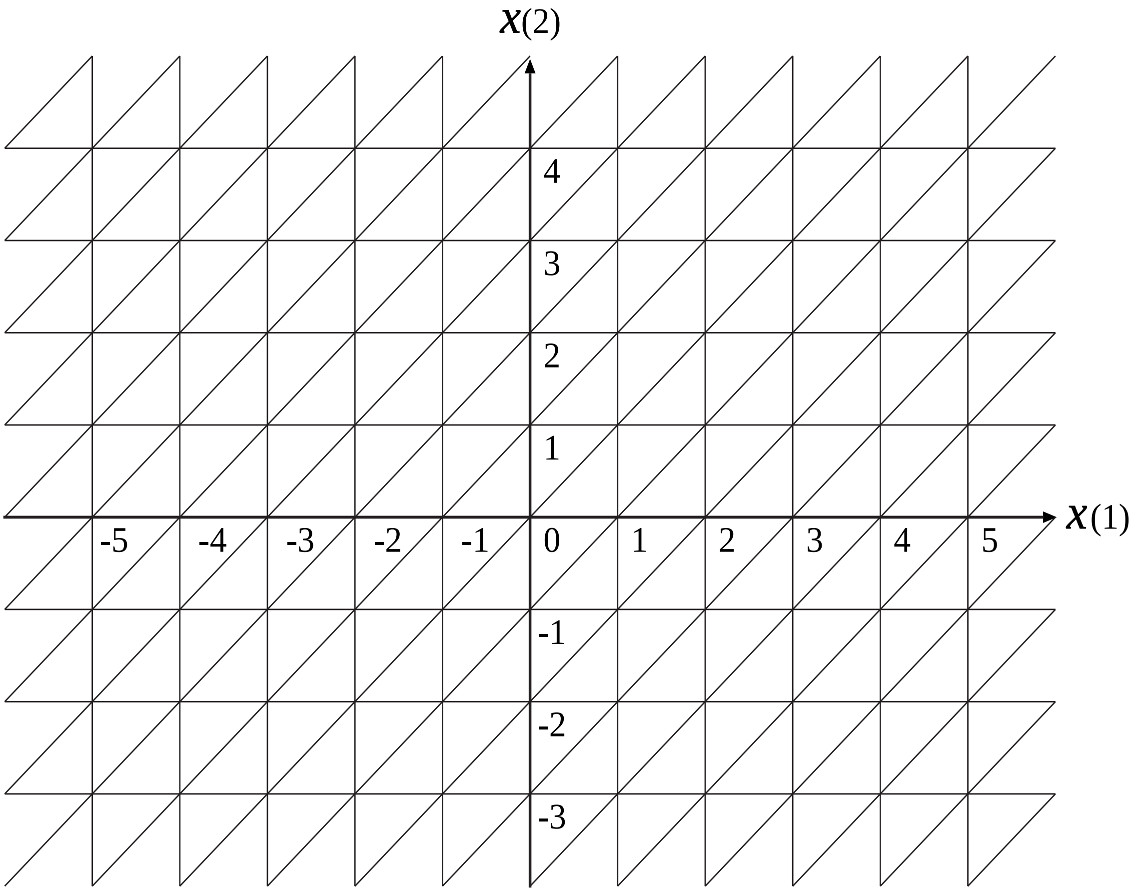


図 1: **Freudenthal 分割**

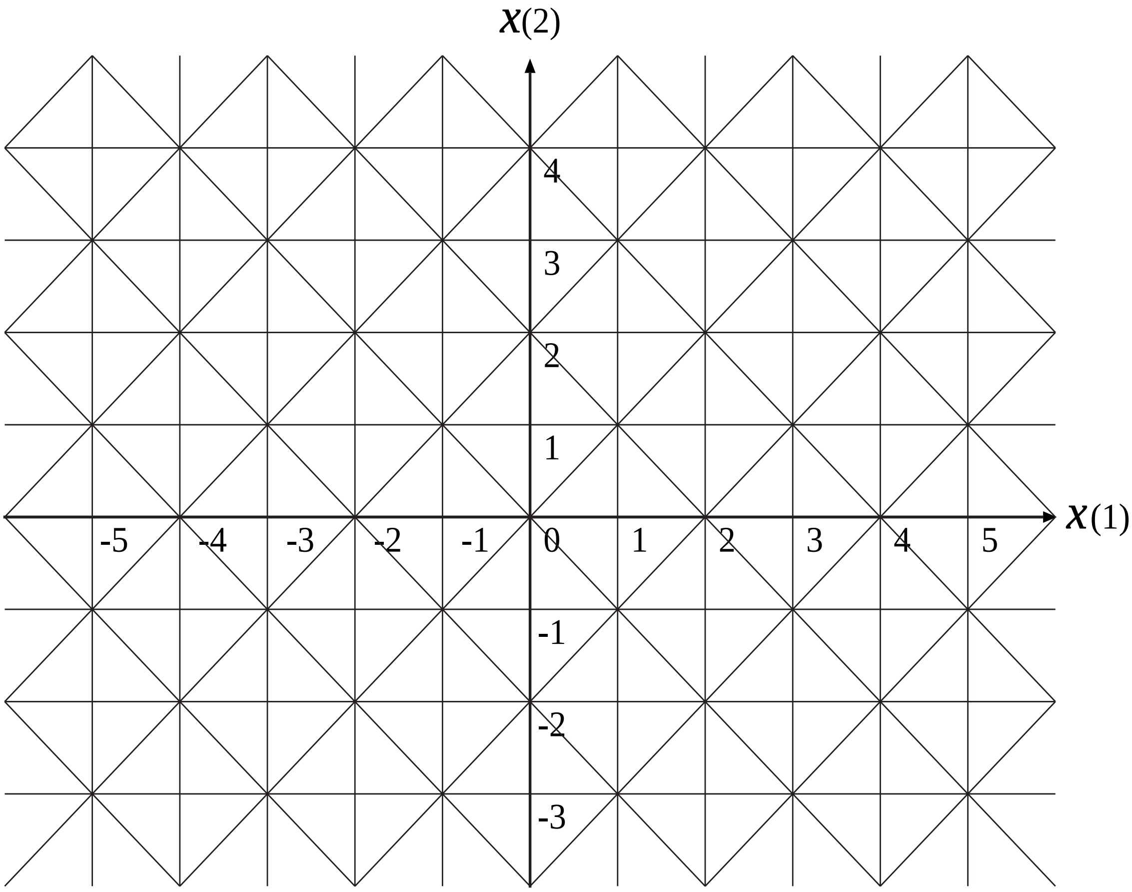


図 2: **ユニオンジャック分割**

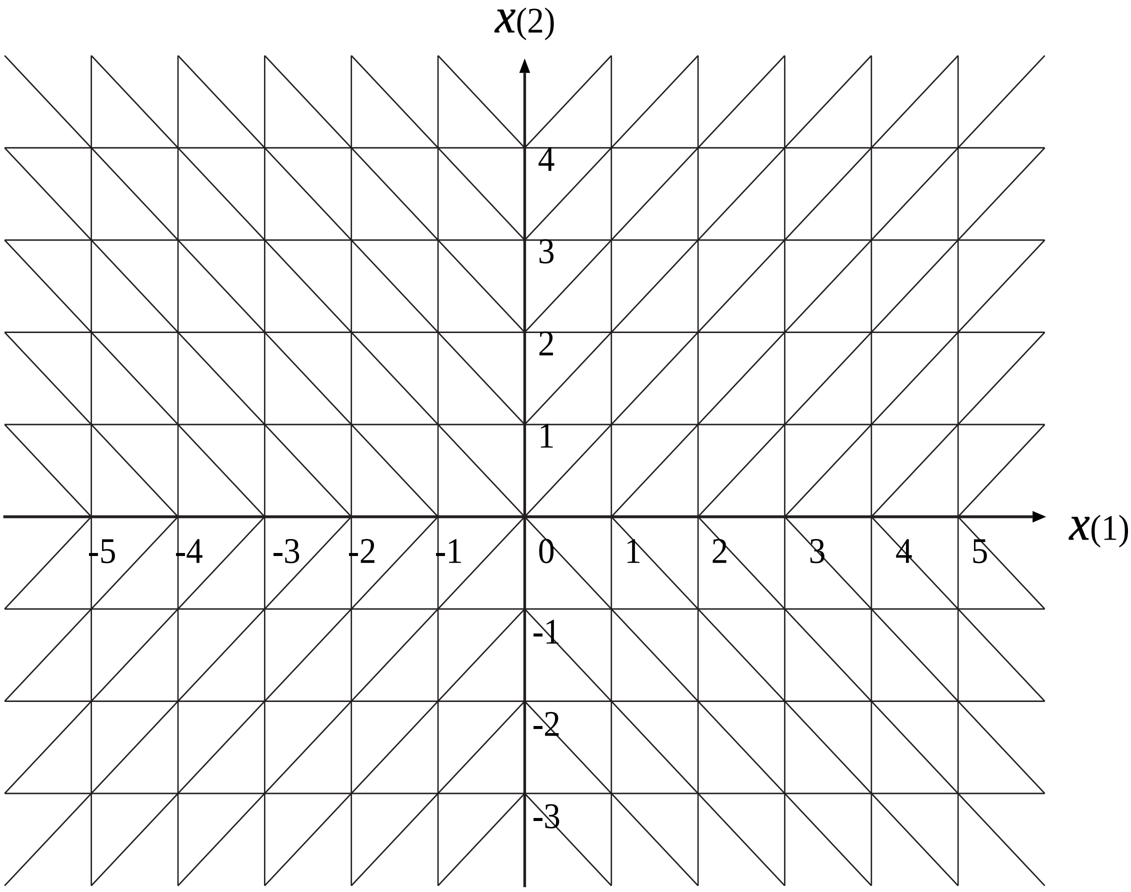


図 3: K_1' (M. Todd)

$\mathrm{L}^{\natural}$ 凸関数： Freudenthal 単体分割に関する離散凸関数

２次元整数格子点に関する**平面の単体分割（三角形分割）**

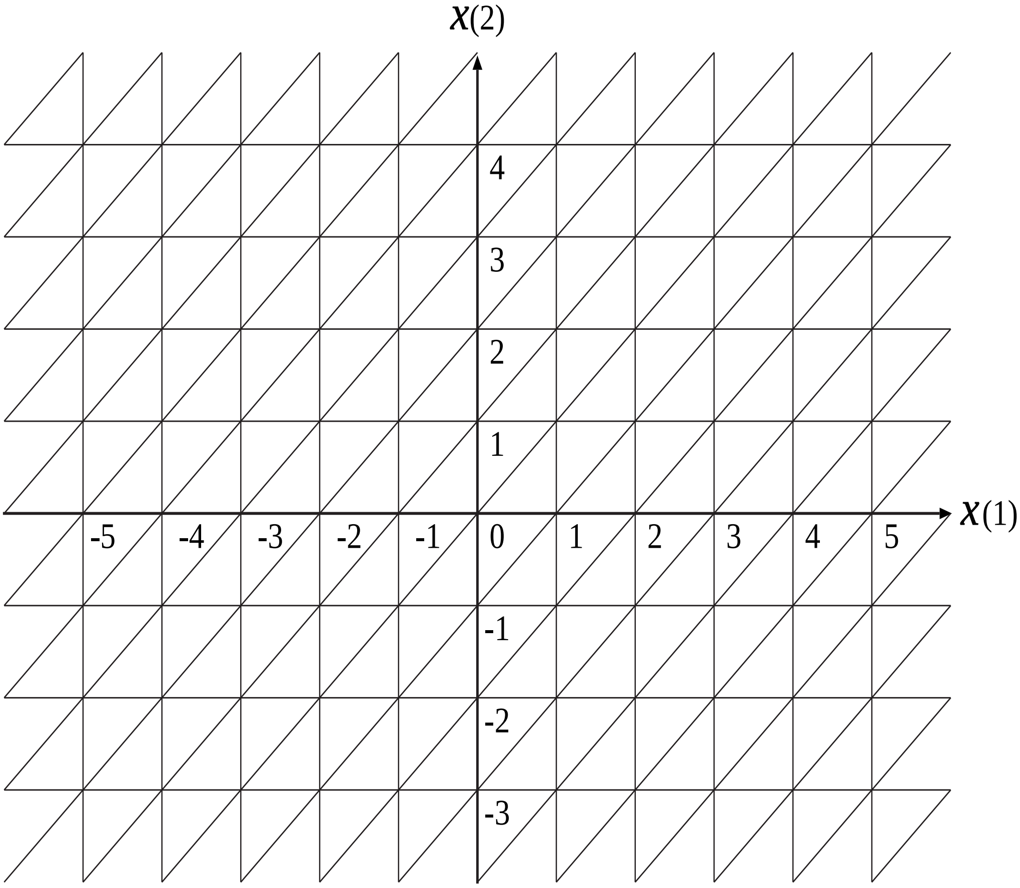
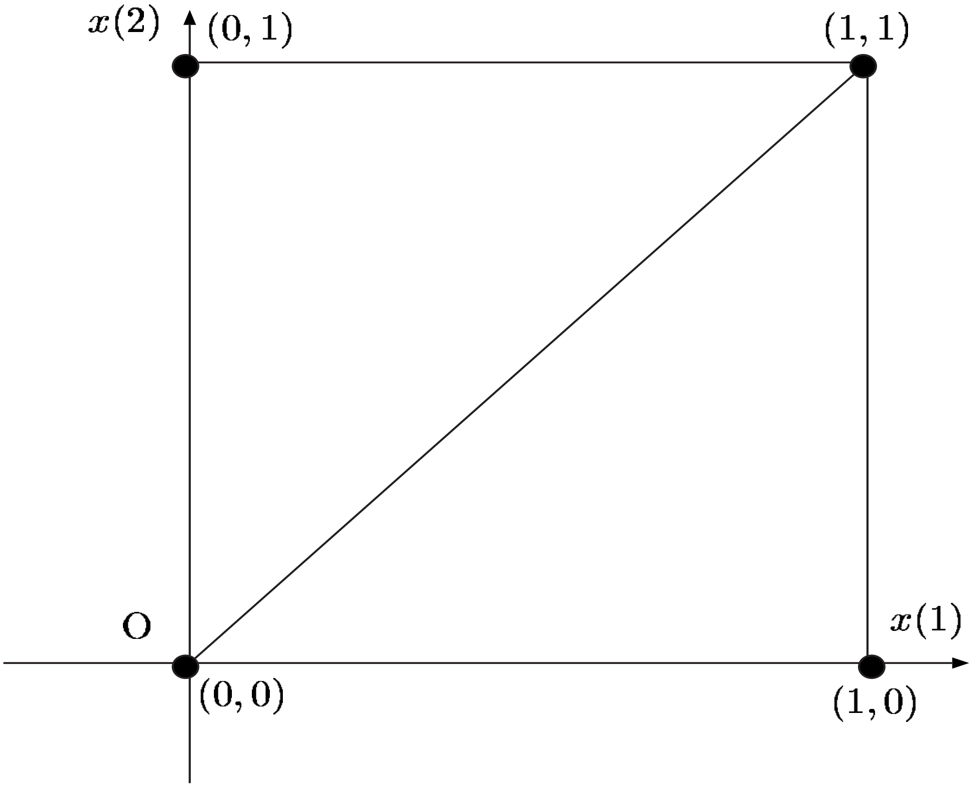


図 4: **Freudenthal 分割**

$n = 2$ の場合: 単位正方形 $[0,1]^2$ の **Freudenthal 単体分割**

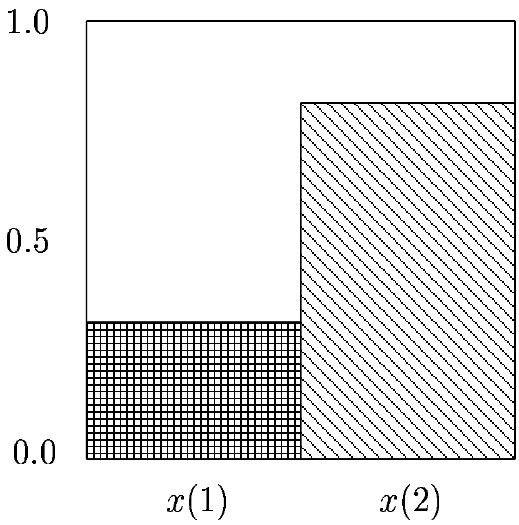


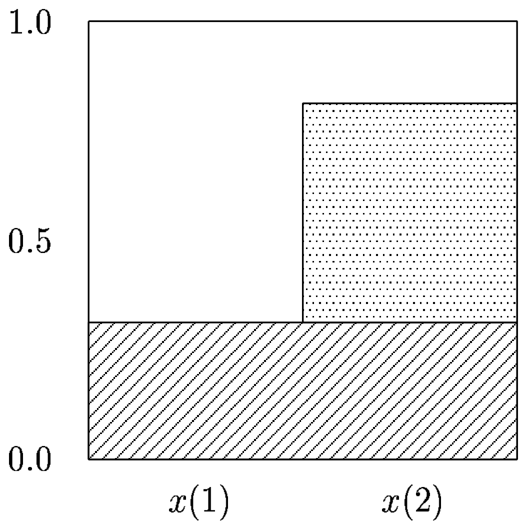
離散的関数 f の**区分線形拡張** $\hat{f}$ はどのように決まるのか？

例 1： 点 $x = (0.3, 0.8)$ における $\hat{f}$ の値の決定

$$\begin{aligned} x &= (0.3, 0.8) \\ &= (1-0.8)\times(0,0) + (0.8-0.3)\times(0,1) + 0.3\times(1,1) \\ &= 0.2\times(0,0) + 0.5\times(0,1) + 0.3\times(1,1) \end{aligned}$$

(単体（セル）の端点 $(0,0), (0,1), (1,1)$ の凸結合による点 x の表現)



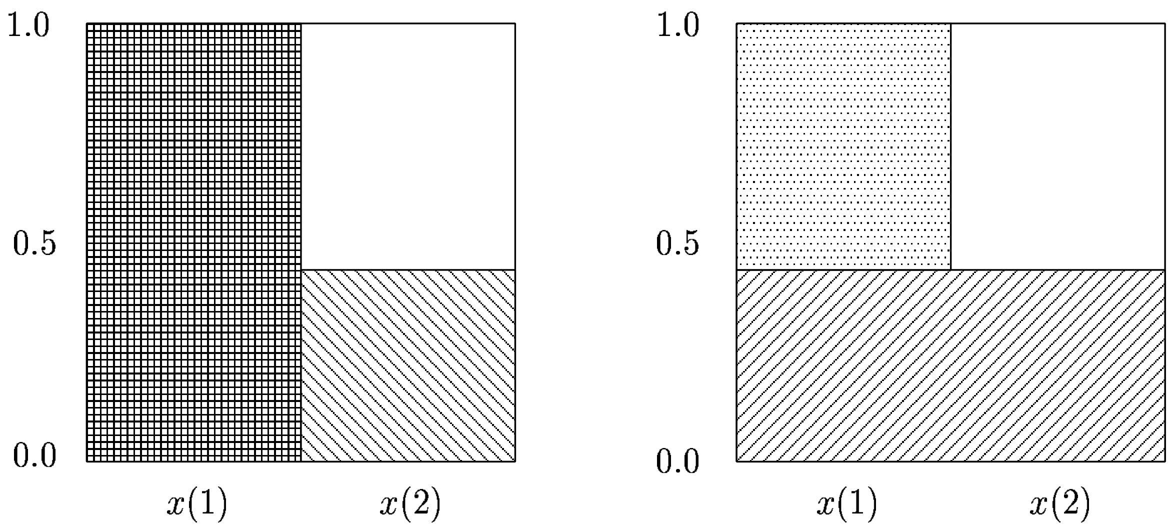


したがって、

$$\hat{f}(x) = 0.2\times f(0,0) + 0.5\times f(0,1) + 0.3\times f(1,1)$$

例 2：点 $x = (1, 0.4)$ では、

$$
\begin{aligned}
x &= (1, 0.4) \\
&= (1-1) \times (0,0) + (1-0.4) \times (1,0) + 0.4 \times (1,1) \\
&= 0.0 \times (0,0) + 0.6 \times (1,0) + 0.4 \times (1,1)
\end{aligned}
$$



したがって、

$$\hat{f}(x) = 0.0 \times f(0,0) + 0.6 \times f(1,0) + 0.4 \times f(1,1)$$

一般の n 次元 $[0,1]^n$ の場合: 集合関数 f の Lovász 拡張 $\hat{f}$

($\{1,2,\cdots,n\}$ 上の 0,1 ベクトルと $\{1,2,\cdots,n\}$ の部分集合の対応に注意)

$x=(x(i)\mid i=1,2,\cdots,n)$ の**成分の非増加順に並べて**、

$$x(i_1)\geq x(i_2)\geq\cdots\geq x(i_n)$$

であるとき、各 $k=1,2,\cdots,n$ に対して

$$y_k(j)=\begin{cases}1 & (j\in\{i_1,\cdots,i_k\}\text{ のとき})\\ 0 & (\text{その他のとき})\end{cases}\qquad (j=1,2,\cdots,n)$$

によって $y_k\in\{0,1\}^n$ を定義する。そのとき、

$$x=(x(i_1)-x(i_2))y_1+\cdots+(x(i_{n-1})-x(i_n))y_{n-1}+x(i_n)y_n$$

よって、

$$\lambda_0=1-x(i_1),\quad \lambda_1=x(i_1)-x(i_2),$$
$$\cdots,\quad \lambda_{n-1}=x(i_{n-1})-x(i_n),\quad \lambda_n=x(i_n),$$

$$\hat{f}(x)=\lambda_0 f(\mathbf{0})+\lambda_1 f(y_1)+\cdots+\lambda_n f(y_n)$$

$x \in [0,1]^n$ に対して、その成分の**非増加順**

$$x(i_1) \geq x(i_2) \geq \cdots \geq x(i_n)$$

によって $\{1, 2, \cdots, n\}$ の**順列** $(i_1, i_2, \cdots, i_n)$ が定まり、x の属する**単体（セル）**が求められる。

$\{1, 2, \cdots, n\}$ の順列 $(i_1, i_2, \cdots, i_n)$ に対応する単体（セル）は、

$$1 \geq x(i_1) \geq x(i_2) \geq \cdots \geq x(i_n) \geq 0$$

を満たす点 x の全体に一致する。

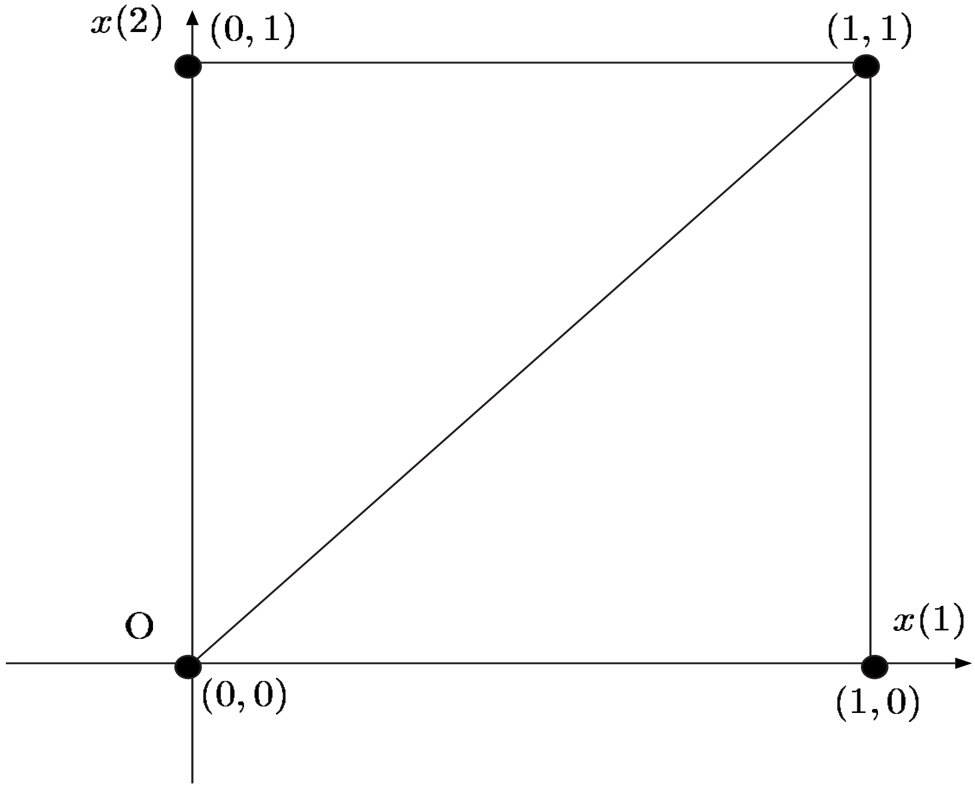
注意： x の成分を単調非増加順に並べたとき、$x(i_1) > x(i_2) > \cdots > x(i_n)$ であるとき、かつ、そのときに限り、x の属するセルは一意的に定まる。

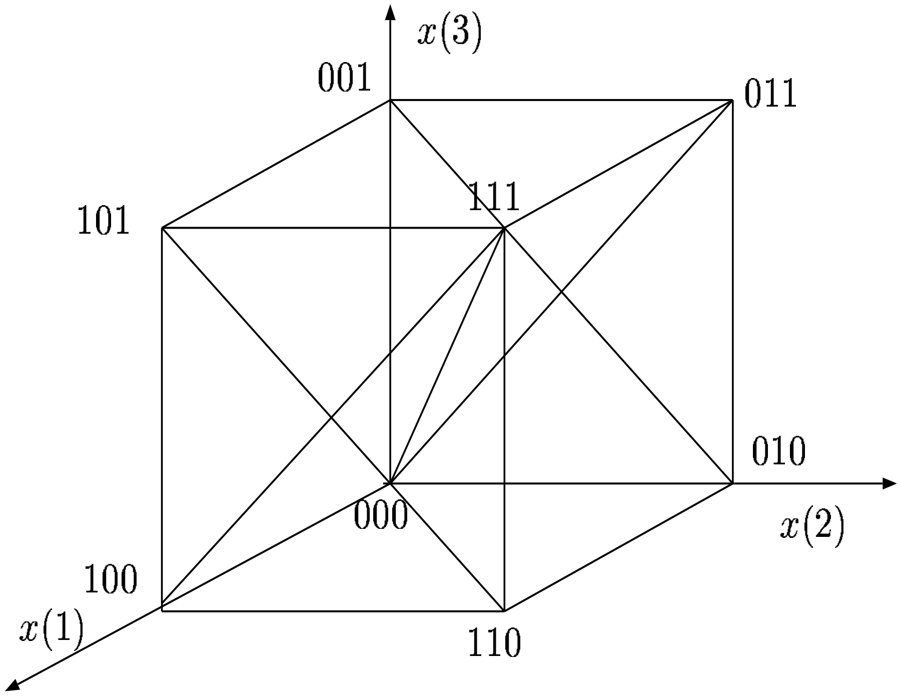
注意： 順列

$(i_1, \cdots, i_{k-1}, i_k, i_{k+1}, i_{k+2}, \cdots, i_n)$,

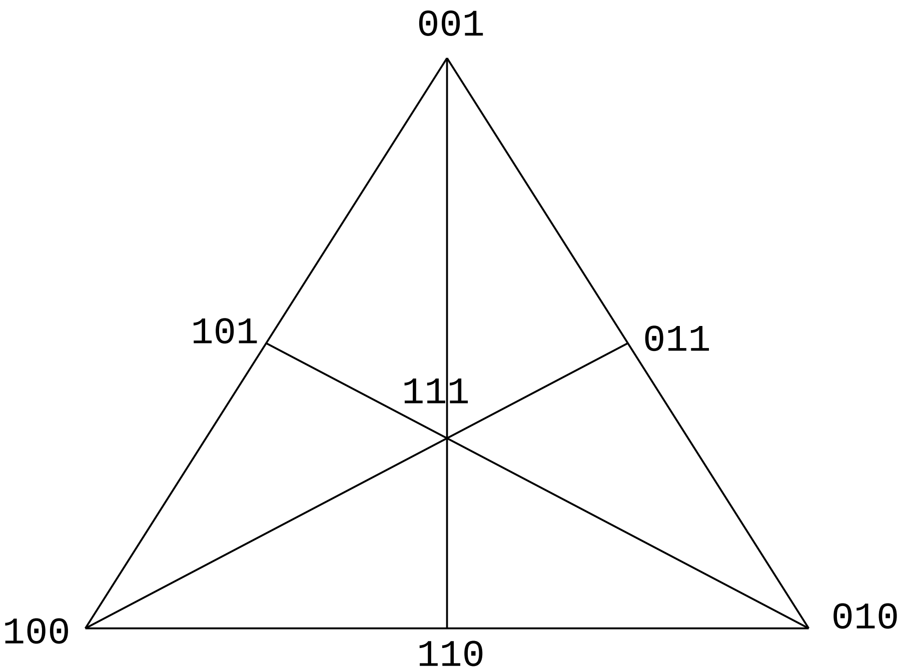
$(i_1, \cdots, i_{k-1}, i_{k+1}, i_k, i_{k+2}, \cdots, i_n)$

に対応するセルは**隣接**する。（逆も真。）隣接関係を決める共通の面（ファセット）は 超平面 $x(i_k) - x(i_{k+1}) = 0$ で決まる。


$x(2)$
$(0,1)$
$(1,1)$
O
$x(1)$
$(0,0)$
$(1,0)$



$x(3)$
001
011
101
111
010
000
$x(2)$
100
$x(1)$
110



001
101
011
111
100
010
110

定理 (Lovász): 集合関数 $f: 2^{\{1,\cdots,n\}} \to \mathbf{R}$ は、その Lovász 拡張 $\hat{f}$ が凸関数であるとき、かつ、そのときに限り、劣モジュラ関数である。すなわち、すべての $X, Y \subseteq \{1, \cdots, n\}$ に対して

$$f(X) + f(Y) \geq f(X \cup Y) + f(X \cap Y).$$

L$^\natural$ 凸関数

f：整数格子点上の関数

f の **Lovász-Freudenthal 拡張** $\hat{f}$：f から Freudenthal 単体分割によって区分線形に拡張された $\mathbf{R}^n$ 上の関数

$\hat{f}$ が $\mathbf{R}^n$ 上の凸関数となるとき、f を **L$^\natural$ 凸関数**という.

L$^\natural$ 凹関数を同様に定義する。

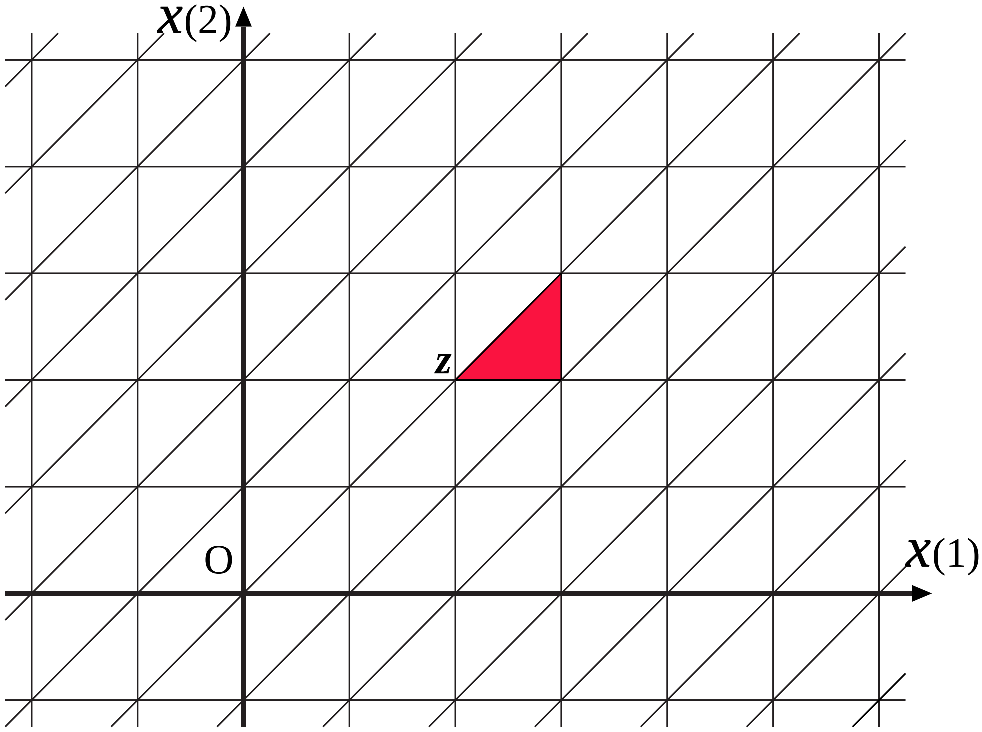


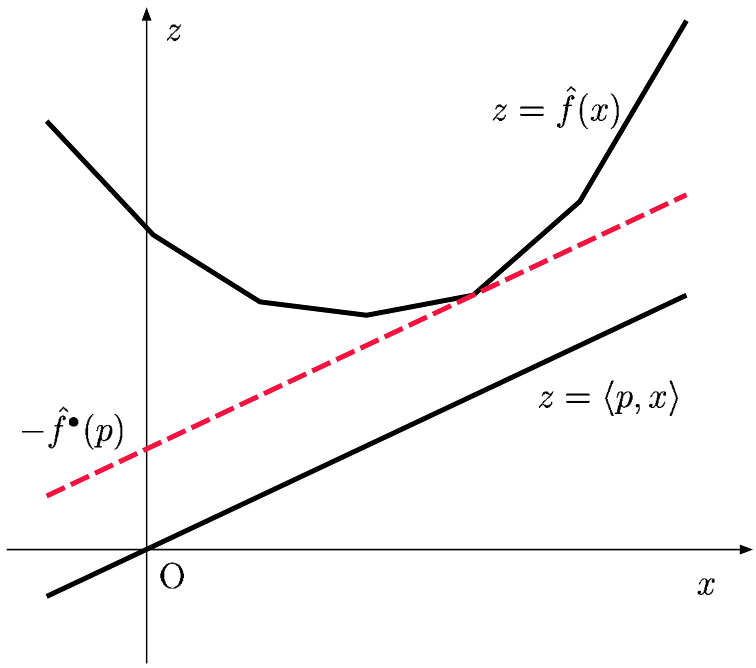
図 5: $\mathbf{R}^2$ の Freudenthal 単体分割.

整数格子点 $\mathbf{Z}^n$ 上に定義された $\mathrm{L}^\natural$ 凸関数 f

$\longleftrightarrow$ $\mathbf{R}^n$ 上への Lovász-Freudenthal 拡張 $\hat{f}$

$\hat{f}$ の共役凸関数 $\hat{f}^\bullet$ を **$\mathrm{M}^\natural$ 凸関数**という。

$$\begin{aligned}\hat{f}^\bullet(p) &= \sup\{\langle p, x\rangle - \hat{f}(x) \mid x \in \mathbf{R}^n\} \\ &= \sup\{\langle p, x\rangle - f(x) \mid x \in \mathbf{Z}^n\} \qquad (p \in (\mathbf{R}^n)^*)\end{aligned}$$



$\mathrm{L}^\natural$ 凹関数 $g : \mathbf{Z}^n \to \mathbf{R}$ の共役凹関数 g° は

$$g^\circ(p) = \inf\{\langle p, x\rangle - g(x) \mid x \in \mathbf{Z}^n\} \qquad (p \in (\mathbf{R}^n)^*).$$

$\mathrm{M}^\natural$ 凹関数

$[0,1]^2$ 上では、

$p = (p(1), p(2))$

$\hat{f}$ の共役凸関数である **$\mathrm{M}^\natural$ 凸関数** $\hat{f}^\bullet$ は、

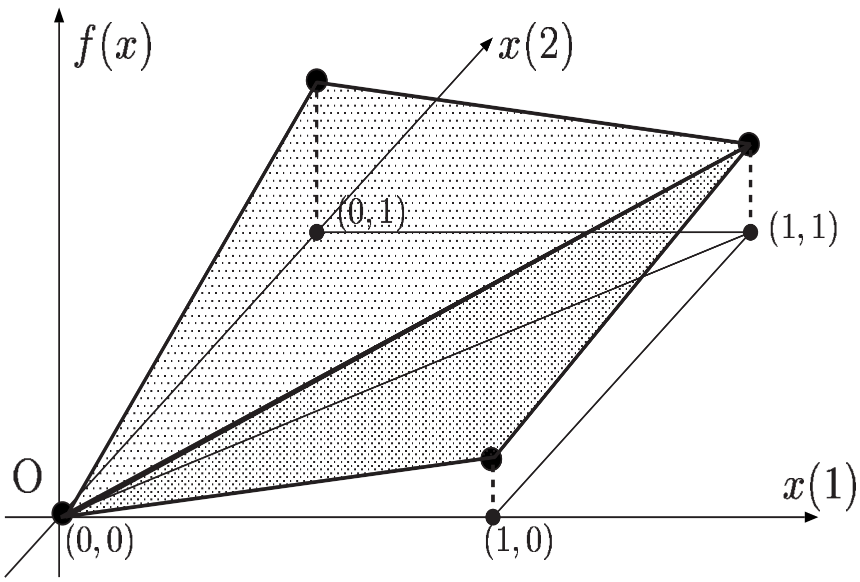
$$
\begin{aligned}
\hat{f}^\bullet(p) &= \max\{p(1)x(1) + p(2)x(2) - \hat{f}(x) \mid x \in [0,1]^2\} \\
&= \max\{p(1)x(1) + p(2)x(2) - f(x) \mid x \in \{0,1\}^2\}
\end{aligned}
$$

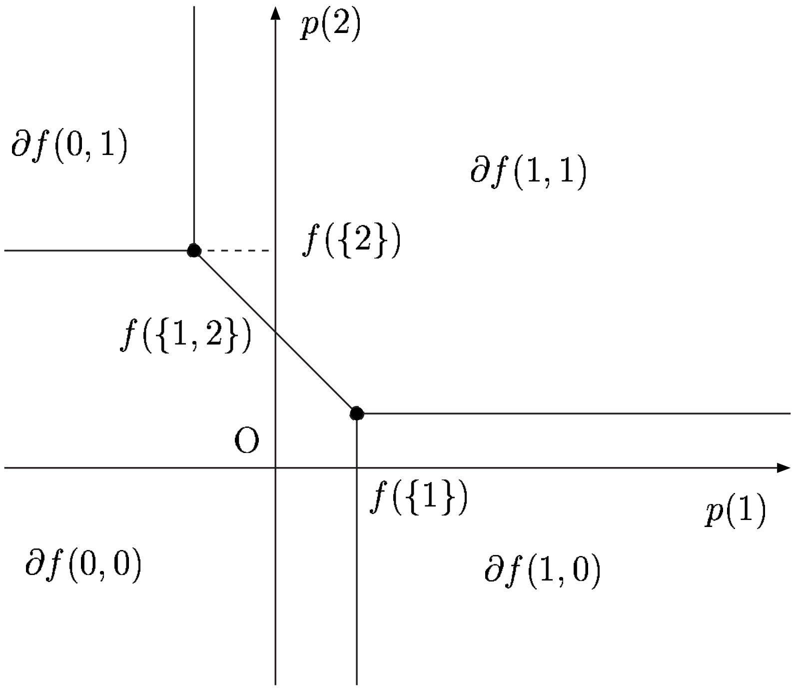
$x^* = (0,0)$: $\quad \hat{f}^\bullet(p) = -f(0,0), \quad p \in \partial f(0,0)$ (**劣微分**)

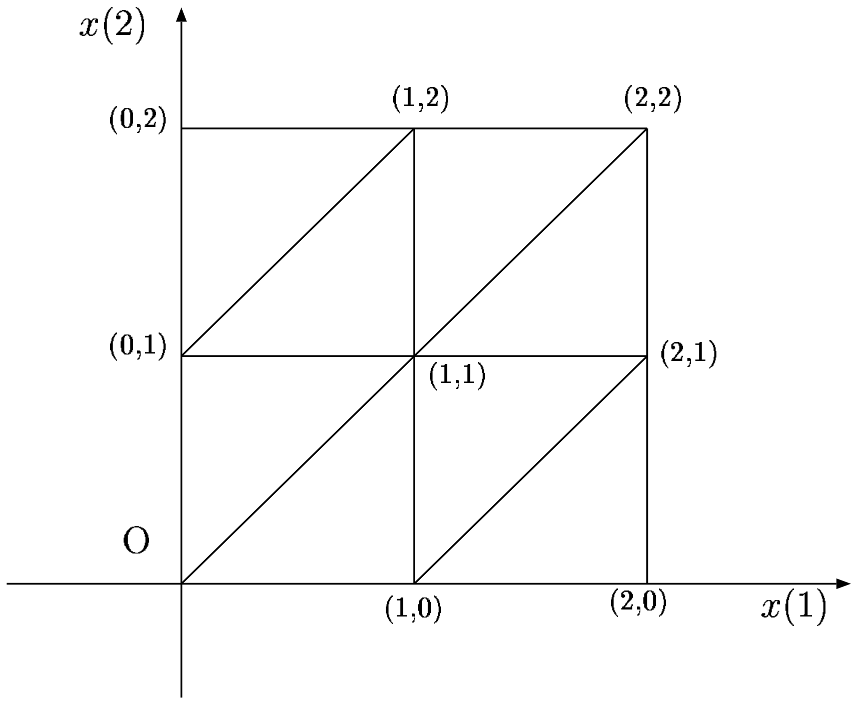
$x^* = (1,0)$: $\quad \hat{f}^\bullet(p) = p(1) - f(1,0), \quad p \in \partial f(1,0)$

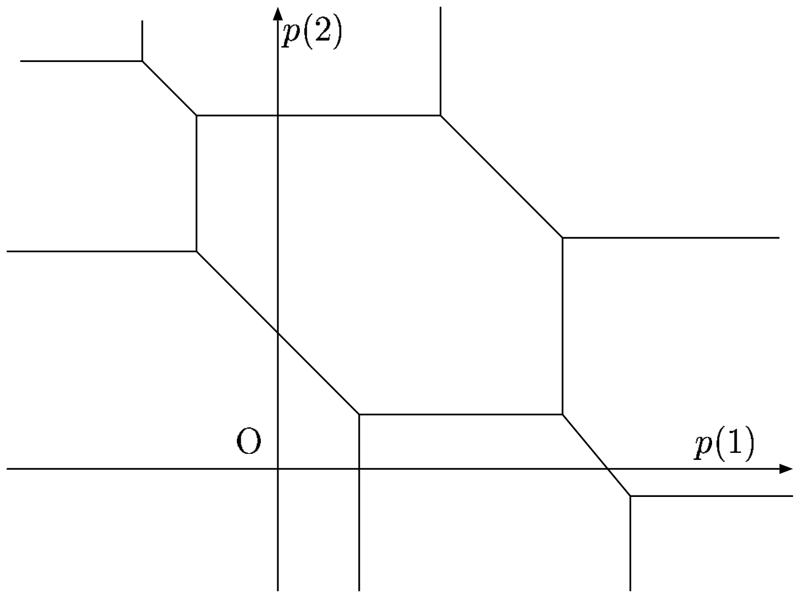
$x^* = (0,1)$: $\quad \hat{f}^\bullet(p) = p(2) - f(0,1), \quad p \in \partial f(0,1)$

$x^* = (1,1)$: $\quad \hat{f}^\bullet(p) = p(1) + p(2) - f(1,1), \quad p \in \partial f(1,1)$


$f(x)$
$x(2)$
$(0,1)$
$(1,1)$
O
$x(1)$
$(0,0)$
$(1,0)$


$p(2)$
$\partial f(0,1)$
$\partial f(1,1)$
$f(\{2\})$
$f(\{1,2\})$
O
$f(\{1\})$
$p(1)$
$\partial f(0,0)$
$\partial f(1,0)$


x(2)
(1,2)
(2,2)
(0,2)
(0,1)
(2,1)
(1,1)
O
(1,0)
(2,0)
x(1)


p(2)
O
p(1)

共役変換の基本的な性質 I

関数 $\hat{f}$ を

$$\hat{f}_0(x) = \hat{f}(x - z) + \langle q, x\rangle + \beta \qquad (x \in \mathbf{R}^n)$$

と変換したとき、

$$\hat{f}_0^\bullet(p) = \hat{f}^\bullet(p - q) + \langle p, z\rangle - \langle q, z\rangle - \beta \qquad (p \in (\mathbf{R}^n)^*).$$

$$\begin{aligned}
\hat{f}_0^\bullet(p) &= \sup\{\langle p, x\rangle - \hat{f}_0(x) \mid x \in \mathbf{R}^n\}) \\
&= \sup\{\langle p, x\rangle - (\hat{f}(x - z) + \langle q, x\rangle + \beta) \mid x \in \mathbf{R}^n\} \\
&= \sup\{\langle p - q, x\rangle - \hat{f}(x - z) - \beta \mid x \in \mathbf{R}^n\} \\
&= \sup\{\langle p - q, x + z\rangle - \hat{f}(x) - \beta \mid x \in \mathbf{R}^n\}
\end{aligned}$$

共役変換の基本的な性質 II

整数格子点 $z \in \mathbf{Z}^n$ に対して、関数 $\hat{f}$ を単位超立方体 $[z, z + \mathbf{1}]$ 上に制限して得られる関数を $\hat{f}_{[z,z+\mathbf{1}]}$ とおく。このとき、

$$\begin{aligned}
\hat{f}^\bullet(p) &= \sup\{\langle p, x\rangle - \hat{f}(x) \mid x \in \mathbf{R}^n\} \\
&= \sup\{\langle p, x\rangle - \hat{f}(x) \mid x \in [z, z + \mathbf{1}],\ z \in \mathbf{Z}^n\} \\
&= \sup\{(\hat{f}_{[z,z+\mathbf{1}]})^\bullet(p) \mid z \in \mathbf{Z}^n\}
\end{aligned}$$

$\mathrm{M}^\natural$ 凸関数 $\hat{f}^\bullet$ を理解するには、$\mathrm{M}^\natural$ 凸関数 $(\hat{f}_{[z,z+\mathbf{1}]})^\bullet$ を理解すればよい。

そこで、単位超立方体 $[0,1]^n$ 上の $\mathrm{L}^\natural$ 凸関数（= 劣モジュラ (集合) 関数) とその共役凸関数を考えよう。

順列 $\sigma = (1, 2, \cdots, n)$ に対応するセルを S^σ とおく。

$S_i = \{1, 2, \cdots, i\} \qquad (i = 0, 1, \cdots, n)$,

χ_{S_i} $(i = 0, 1, \cdots, n)$: セル S^σ の端点全体

χ_{S_i}: S_i の特性ベクトル,

セル S^σ 上で線形な関数となっている Lovász 拡張 $\hat{f}$ の
勾配は、つぎのように定まる。

セル S_σ 上で線形な関数を $y = \langle p, x\rangle + \beta$ とおいて、これが χ_{S_i} $(i = 0, 1, \cdots, n)$ 上で $f(S_i)$ の値を取る条件

$$f(S_i) = \langle p, \chi_{S_i}\rangle + \beta \qquad (i = 0, 1, \cdots, n)$$

より、

$$\begin{aligned} &\beta = f(S_0) = f(\emptyset), \\ &p(i) = f(S_i) - f(S_{i-1}) \qquad (i = 1, 2, \cdots, n) \end{aligned}$$

を得る。このベクトル p がセル S^σ の内点における Lovász 拡張 $\hat{f}$ の勾配である。

注意: 勾配 p を決める**連立１次方程式**は、

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(1) \\ p(2) \\ p(3) \\ \vdots \\ p(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(S_1) - f(\emptyset) \\ f(S_2) - f(\emptyset) \\ f(S_3) - f(\emptyset) \\ \vdots \\ f(S_n) - f(\emptyset) \end{pmatrix}$$

係数行列：**ユニモジュラ**（単模）

（三角行列 $\longrightarrow$ 貪欲アルゴリズム）

f: **整数値** $\Longrightarrow$ p: **整数ベクトル**

$f : 2^E \to \mathbf{R}$: 劣モジュラ関数 $\qquad (E = \{1, 2, \cdots, n\})$

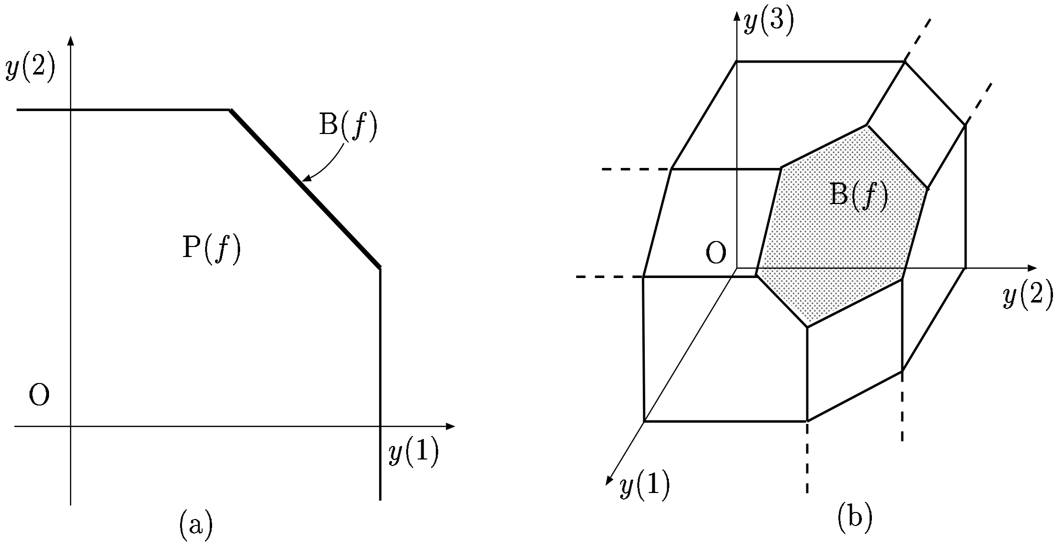
$f(\emptyset) = 0$ と仮定する。

劣モジュラ多面体 $\qquad y(X) = \sum_{e \in X} y(e)$

$$\mathrm{P}(f) = \{y \mid y \in \mathbf{R}^E,\ \forall X \subseteq E : y(X) \leq f(X)\}$$

基多面体

$$\mathrm{B}(f) = \{y \mid y \in \mathrm{P}(f),\ y(E) = f(E)\}$$



定理（Edmonds, Shapley): 任意の順列 $(i_1, i_2, \cdots, i_n)$ に対して、

$$S_k = \{i_1, \cdots, i_k\} \ \ (k = 1, \cdots, n), \quad S_0 = \emptyset,$$

$$y(i_k) = f(S_k) - f(S_{k-1}) \quad (k = 1, \cdots, n)$$

によって定まる y は、基多面体 $\mathrm{B}(f)$ の端点であり、かつ、すべての端点はこのようにして定まる。

注意：この y は、順列 $\sigma = (i_1, i_2, \cdots, i_n)$ で決まるセル S^σ 上の $\hat{f}$ の勾配に等しい。

$w : \{1, \cdots, n\} \to \mathbf{R}$

$$\text{(最大基問題)} \quad \text{Maximize} \quad \sum_{i=1}^{n} w(i)y(i)$$
$$\text{subject to} \quad y \in \mathrm{B}(f).$$

(貪欲アルゴリズム) (Edmonds)

1. $w(i_1) \geq w(i_2) \geq \cdots \geq w(i_n)$ とする。

2. $S_k = \{i_1, \cdots, i_k\} \ \ (k = 0, \cdots, n)$ とおいて、

   $y(i_k) = f(S_k) - f(S_{k-1}) \ \ (k = 1, \cdots, n)$.

(y が最適解である。)

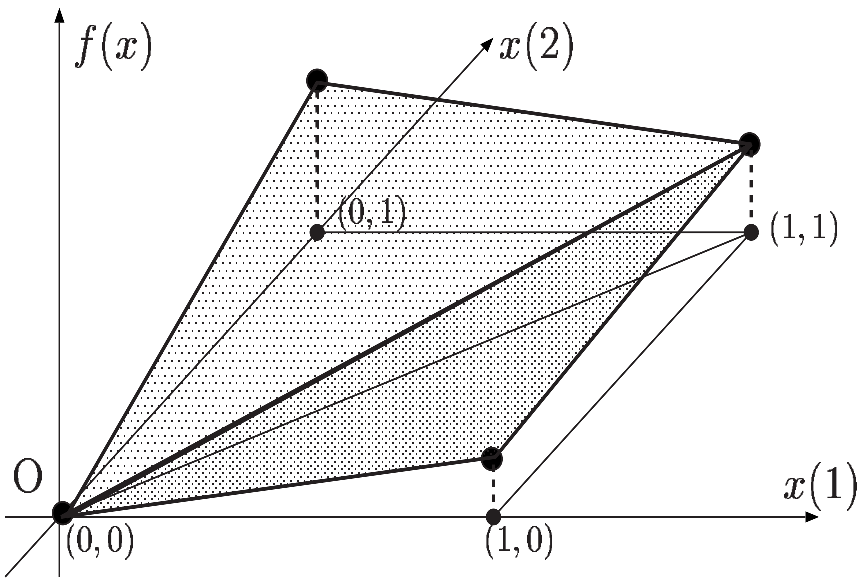
注意：$w \in [0,1]^n$ であるとき、**目的関数の最大値**は、

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n} w(k)y(k) &= \sum_{k=1}^{n} w(i_k)(f(S_k) - f(S_{k-1})) \\ &= \sum_{k=1}^{n-1}(w(i_k) - w(i_{k+1}))f(S_k) + w(i_n)f(S_n) \\ &= \hat{f}(w).\end{aligned}$$

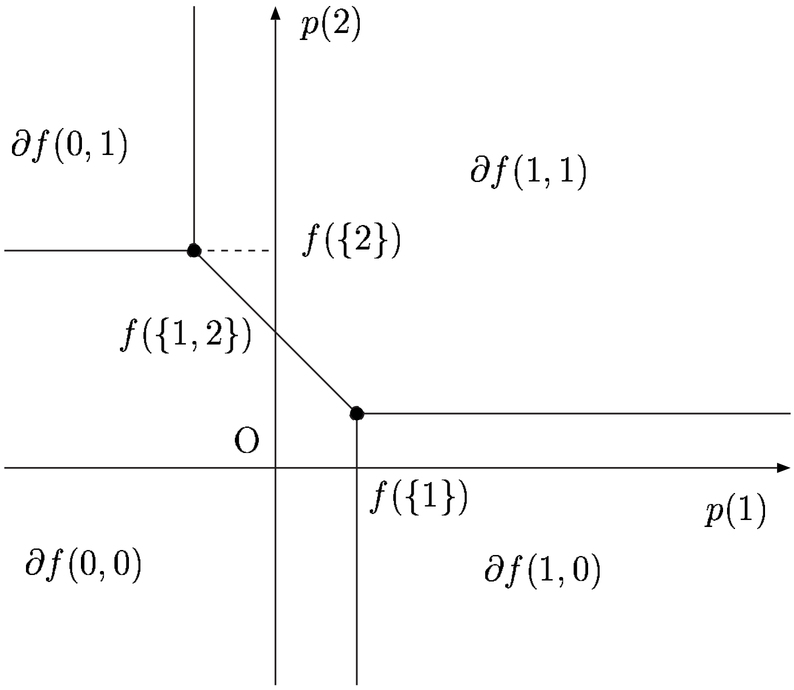
ここで、$w = \sum_{k=1}^{n-1}(w(i_k) - w(i_{k+1}))\chi_{S_k} + w(i_n)\chi_{S_n}$.

すなわち、**f の Lovász 拡張 $\hat{f}$ の w における値に等しい。**

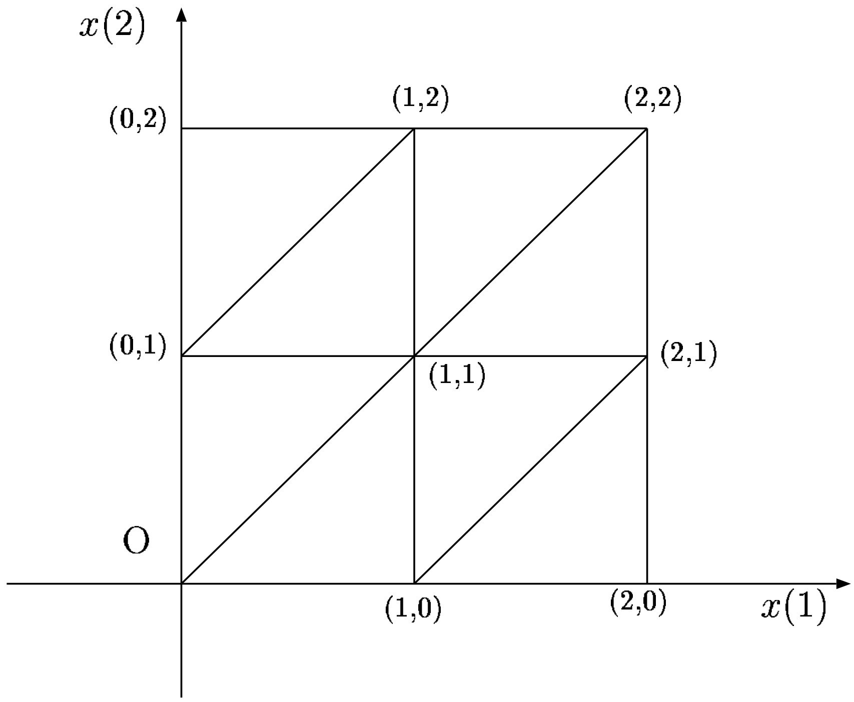
Lovász 拡張 $\hat{f}$ は基多面体 $\mathrm{B}(f)$ (あるいは劣モジュラ多面体 $\mathrm{P}(f)$) の**支持関数** (support function) (を $[0,1]^n$ 上に制限したもの) である。



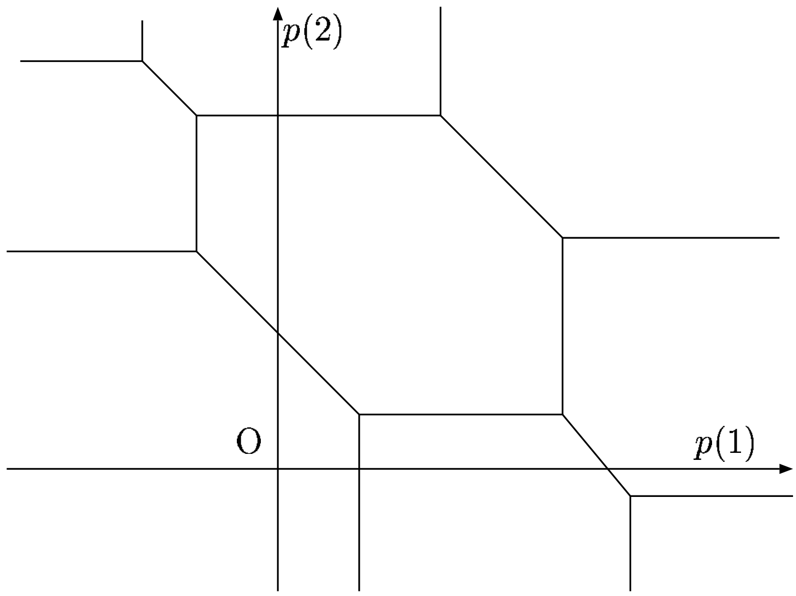
$f(x)$
$x(2)$
$(0,1)$
$(1,1)$
O
$x(1)$
$(0,0)$
$(1,0)$



$p(2)$
$\partial f(0,1)$
$\partial f(1,1)$
$f(\{2\})$
$f(\{1,2\})$
O
$f(\{1\})$
$p(1)$
$\partial f(0,0)$
$\partial f(1,0)$



x(2)
(1,2)
(2,2)
(0,2)
(0,1)
(2,1)
(1,1)
O
(1,0)
(2,0)
x(1)



p(2)
O
p(1)

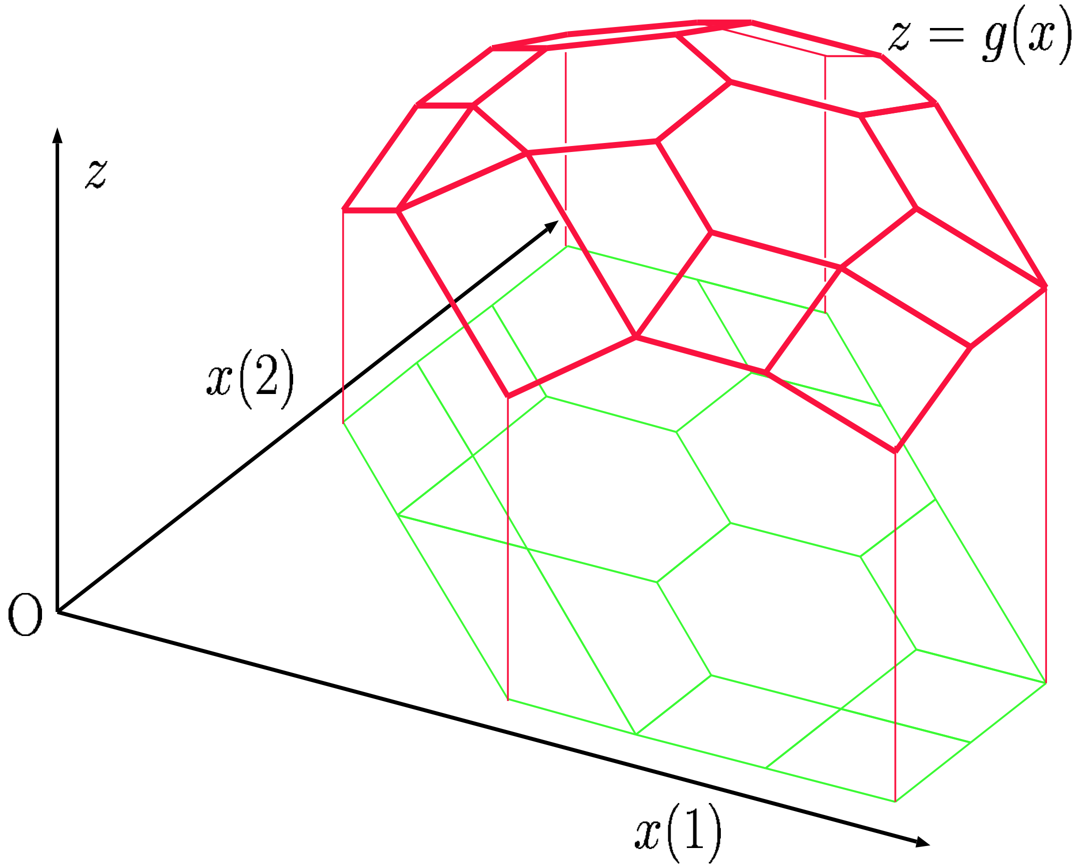


図 6: M$^\natural$ 凹関数 g.

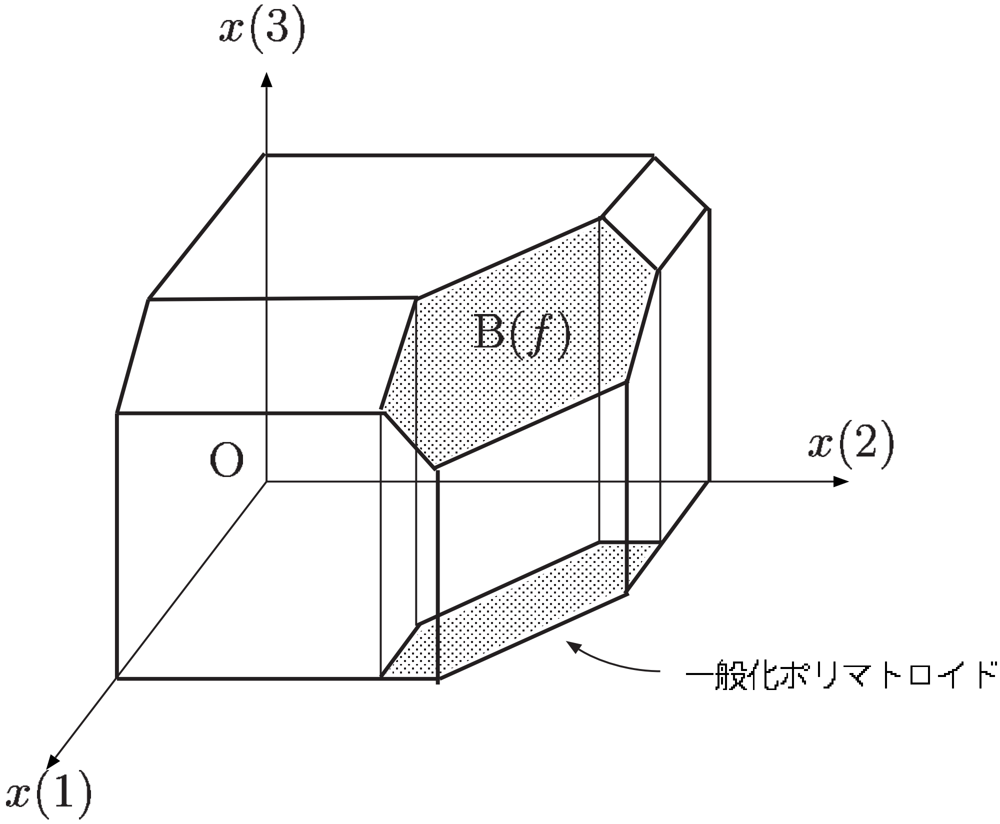


図 7: 基多面体と一般化ポリマトロイド.

定理（冨澤）：多面体 P が基多面体であるための必要十分条件は、P のすべての辺ベクトルが

$$(0, \cdots, 0, \pm 1, 0, \cdots, 0, \mp 1, 0, \cdots, 0)$$

の形であることである。

系：多面体 P が一般化ポリマトロイドであるための必要十分条件は、P のすべての辺ベクトルが

$$(0, \cdots, 0, \pm 1, 0, \cdots, 0, \mp 1, 0, \cdots, 0), \quad (0, \cdots, 0, \pm 1, 0, \cdots, 0)$$

の形であることである。

注意 (再掲)： 順列

$(i_1, \cdots, i_{k-1}, i_k, i_{k+1}, i_{k+2}, \cdots, i_n)$,

$(i_1, \cdots, i_{k-1}, i_{k+1}, i_k, i_{k+2}, \cdots, i_n)$

に対応するセルは隣接する。（同一単位超立方体内で逆も真。）隣接関係を決める共通の面（ファセット）は 超平面 $x(i_k) - x(i_{k+1}) = 0$ で決まる。その超平面

$x(i_k) - x(i_{k+1}) = 0$

の法線ベクトルは、

$(0, \cdots, 0, \pm 1, 0, \cdots, 0, \mp 1, 0 \cdots, 0)$

である。また、隣接する単位超立方体の共通ファセットの法線ベクトルは、

$(0, \cdots, 0, \pm 1, 0, \cdots, 0)$

である。

したがって、各格子点 z において $\mathrm{L}^\natural$ 凸関数 f の劣微分

$\partial f(z)$ **は一般化ポリマトロイド**、

その上で

$\mathrm{M}^\natural$ 凸関数 $\hat{f}^\bullet$ は線形関数＋定数の形

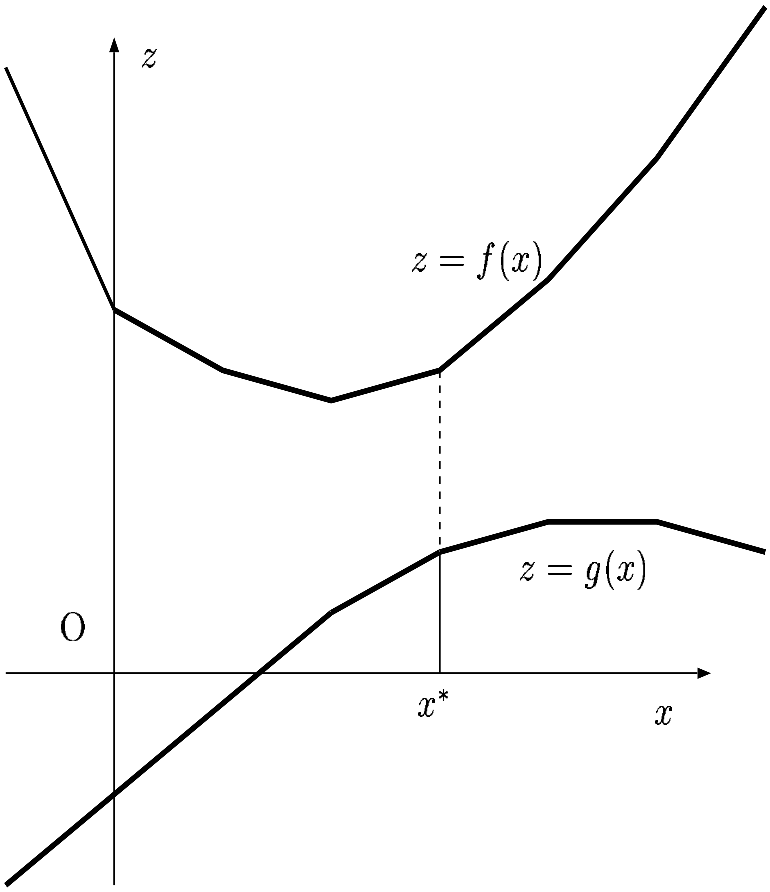
注意：f が**整数値**関数のとき、$\partial f(z)$ は**整数**一般化ポリマトロイドである。

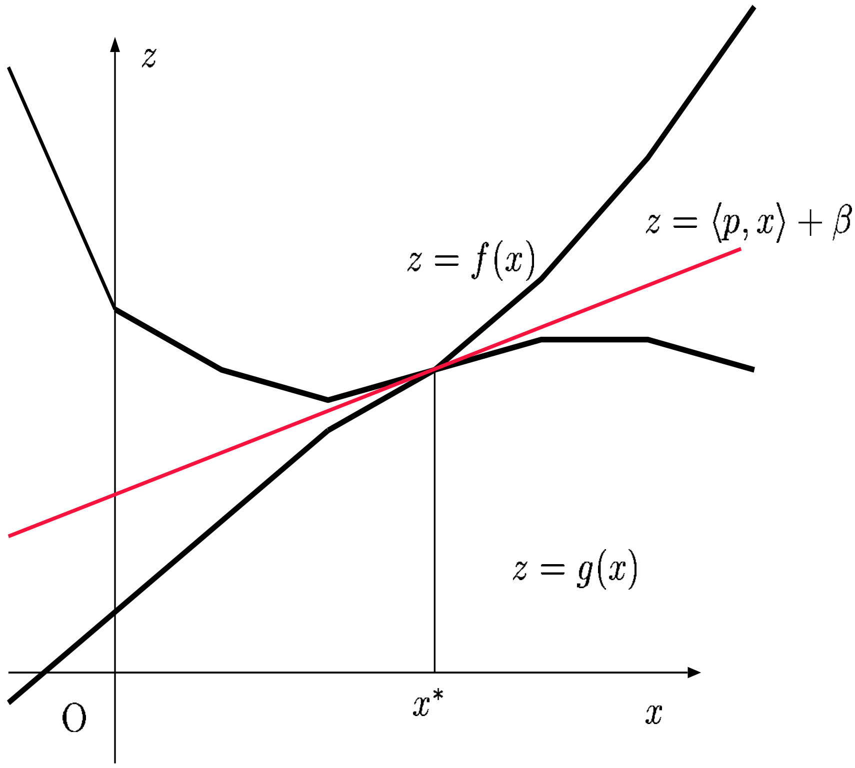
離散分離定理 (L$^\natural$)

$f(:\mathbf{Z}^n \to \mathbf{Z})$: 整数値 L$^\natural$ 凸関数
$g(:\mathbf{Z}^n \to \mathbf{Z})$: 整数値 L$^\natural$ 凹関数

離散分離定理 (室田)：

$$\forall z \in \mathbf{Z}^n : f(z) \geq g(z)$$
$$\Longrightarrow \quad \exists p \in (\mathbf{Z}^n)^*,\ \beta \in \mathbf{Z} : f(z) \geq \langle p, z \rangle + \beta \geq g(z)$$


z
$z = f(x)$
$z = g(x)$
O
x^*
x

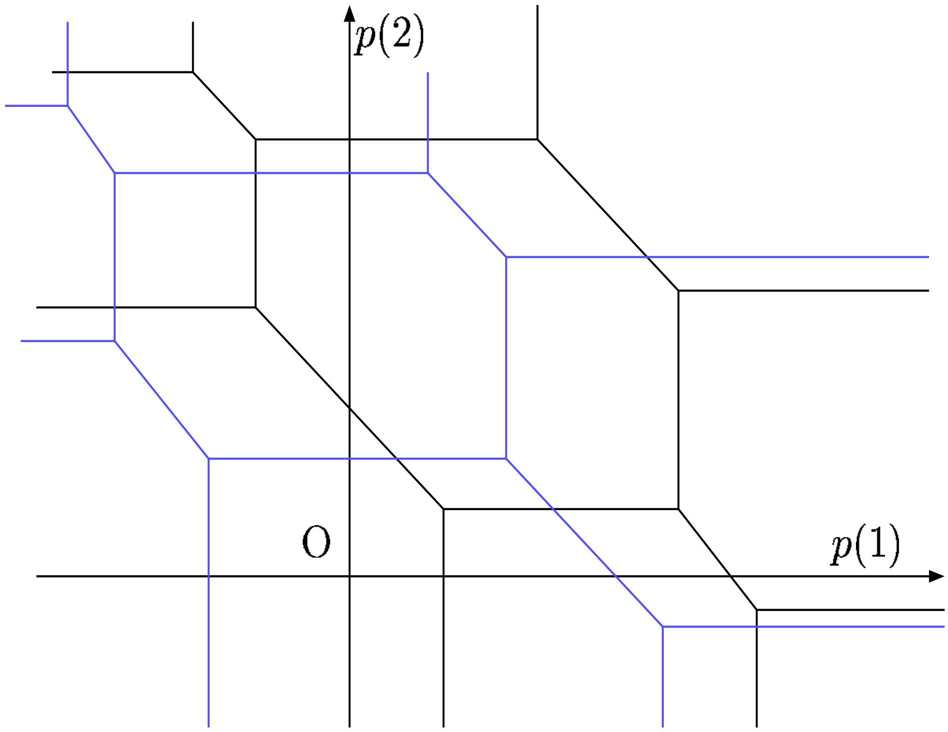


$$p \in \partial f(x^*) \cap \partial g(x^*) \quad （整数ベクトルが選べる）$$

$$g(x^*) - \langle p, x^* \rangle \le \beta \le f(x^*) - \langle p, x^* \rangle$$

一般化ポリマトロイドの交わり定理：

二つの整数一般化ポリマトロイド P_1, P_2 に対して、その交わり $P_1 \cap P_2$ が非空であるとき、$P_1 \cap P_2$ は整数多面体である。



離散 Fenchel 双対定理（室田）：

L$^\natural$ 凸関数 $f : \mathbf{Z}^E \to \mathbf{Z}$ と L$^\natural$ 凹関数 $g : \mathbf{Z}^E \to \mathbf{Z}$ に対して、

$$\inf\{f(x) - g(x) \mid x \in \mathbf{Z}^E\} = \sup\{g^\circ(p) - f^\bullet(p) \mid p \in (\mathbf{Z}^E)^*\}$$

が成り立つ.

$$f(x^*) - g(x^*) = \inf\{f(x) - g(x) \mid x \in \mathbf{Z}^E\},$$
$$\hat{p} \in \partial f(x^*) \cap \partial g(x^*) \qquad (x^* \in \mathbf{Z}^E,\ \hat{p} \in (\mathbf{Z}^E)^*)$$

であるとき、

$$\begin{aligned}
&\inf\{f(x) - g(x) \mid x \in \mathbf{Z}^E\} \\
&= \inf\{f(x) - \langle \hat{p}, x\rangle + \langle \hat{p}, x\rangle - g(x) \mid x \in \mathbf{Z}^E\} \\
&= (\langle \hat{p}, x^*\rangle - g(x)) - (\langle \hat{p}, x^*\rangle - f(x)) \\
&= g^\circ(\hat{p}) - f^\bullet(\hat{p})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f(x) - g(x) &= f(x) - \langle p, x\rangle + \langle p, x\rangle - g(x) \\
&= (\langle p, x\rangle - g(x)) - (\langle p, x\rangle - f(x)) \\
&\geq g^\circ(p) - f^\bullet(p)
\end{aligned}$$

$\mathrm{M}^\natural$ 凸関数 $f: \mathbf{Z}^n \to \mathbf{Z}$ に関する交換公理

$$\mathrm{dom}\, f = \{x \mid f(x) < +\infty\}$$

$$\mathrm{supp}^+(x) = \{i \mid x(i) > 0\}, \qquad \mathrm{supp}^-(x) = \{i \mid x(i) < 0\}$$

($\mathrm{M}^\natural$-EXC) For $x, y \in \mathrm{dom}\, f$ and $i \in \mathrm{supp}^+(x-y)$,

$$f(x) + f(y) \;\geq\; \min\Big[f(x-\chi_i) + f(y+\chi_i), \min_{j \in \mathrm{supp}^-(x-y)} \{ f(x-\chi_i+\chi_j) + f(y+\chi_i-\chi_j)\} \Big].$$

($\longrightarrow$ 「整数一般化ポリマトロイド」に関する同時交換公理)

参考文献

1. 室田 一雄：「離散凸解析」, 共立出版, 2001.

2. K. Murota: *Discrete Convex Analysis* (SIAM Monographs on Discrete Mathematics and Applications **10**, SIAM, 2003).

3. S. Fujishige: *Submodular Functions and Optimization* (Annals of Discrete Mathematics, Vol. 47) (North-Holland, 1991); also, the second edition (*ibid.* Vol. 58) (2005).

4. 藤重 悟：「グラフ・ネットワーク・組合せ論」, 共立出版, 2002.

5. 藤重 悟：「劣モジュラ構造と離散凸性」, 数学入門公開講座 (数理解析研究所，2005) (テキストは数理解析研ホームページで公開).