離散・連続ハイブリッド最適化

室田 一雄，松井 知己，岩田 覚

情報理工学系研究科 数理情報学専攻

1　非線形整数計画問題の最適性規準

1.1　概要

線形制約の下で線形の目的関数を最小化する整数計画問題に対して，Graver 基底を用いた最適性規準が知られている．本研究では，連続・離散の最適化問題に対して統一的な最適性規準を与えることを目標として，ある種の凸関数を目的関数とする非線形整数計画問題に対して同様の最適性規準を与えた．本研究の結果は既に学会誌に論文 [9] として採択が決定しているが，ほぼ同時期に，Hemmecke [1] が本質的に等価な結果を得ている．

1.2　整数計画問題

整数ベクトルを変数とし非線形関数を目的関数とする最適化問題

$$\text{minimize} \quad f(x) \text{ subject to } \quad x \in \mathcal{S},$$

を扱う．ただし，$f : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}$ であり，ある行列 $A \in \mathbf{Z}^{m\times n}$ とベクトル $b \in \mathbf{Z}^m$ に対し，$\mathcal{S} = \{x \in \mathbf{Z}^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$ である．

線形整数計画 ($f(x) = c^\top x$) に対しては Hilbert 基底を用いた最適性規準が知られている．$O_1, \ldots, O_{2^n}$ を $\mathbf{R}^n$ の第 1 象限から第 2^n 象限とすると，任意の $j \in \{1, \ldots, 2^n\}$ に対して，

$$\mathcal{C}_j = \{x \in \mathbf{R}^n \mid Ax = 0\} \cap \mathcal{O}_j$$

の極小な Hilbert 基底を H_j とする．

定理 1 (Graver) 線形整数計画問題の許容解 $x \in \mathcal{S}$ が線形目的関数 c に関して最適解であるための必要十分条件は，$x + h \in \mathcal{S}$ であるような任意の $h \in \bigcup_{j=1}^{2^n} H_j$ に対し，$c^\top h \geq 0$ が成り立つことである．

1.3　最適性規準の一般化

定理 1 を非線形目的関数に対して一般化する．核となる考えは，関数 f に応じて $\mathcal{C}_j$ の適当な細分 $\{\mathcal{C}_k(f)\}_k$ を用いて f の局所最適性を表現することである．

定義 1: ある半正定値行列 $Q \in \mathbf{Q}^{n\times n}$, ベクトル $d \in \mathbf{Q}^n$, 実数 $a \in \mathbf{R}$ によって

$$f(x) = \frac{1}{2} x^\top Q x + d^\top x + a$$

と表される関数 f の全体を $\mathcal{F}_1$ とする．

定義 2: ある正整数 s，ベクトル $c_i \in \mathbf{Q}^n$ $(i = 1, \ldots, s)$，凸関数 $\phi_i : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ $(i = 1, \ldots, s)$ によって

$$f(x) = \sum_{i=1}^{s} \phi_i({c_i}^\top x)$$

と表される関数 f の全体を $\mathcal{F}_2$ とする．

定義 3: 錐の細分 $\{\mathcal{C}_k(f)\}_k$ が存在して，任意の $x \in \mathcal{S}$，および，ある k に対して $\{h_1, h_2\} \subseteq \mathcal{C}_k(f)$ を満たす任意の $h_1, h_2 \in \mathbf{Z}^n$ に対し，$x + h_1 + h_2 \in \mathcal{S}$ ならば

$$f(x + h_1 + h_2) + f(x) \geq f(x + h_1) + f(x + h_2)$$

が成り立つような関数 f の全体を $\mathcal{F}_3$ とする．

本研究の成果は次の 2 つの定理である．

定理 2 $\mathcal{F}_1 \subseteq \mathcal{F}_2 \subseteq \mathcal{F}_3$.

定理 3 任意の $f \in \mathcal{F}_3$ に対し，定義 *3* にいう細分を $\{\mathcal{C}_k(f)\}_k$ とする．このとき，許容解 $x^0 \in \mathcal{S}$ が

最適解であるための必要十分条件は，$x^0+h \in \mathcal{S}$ なる任意の $h \in \bigcup_k H(\mathcal{C}_k(f))$ に対して，$f(x^0+h) \geq f(x^0)$ が成り立つことである．ただし，$H(\mathcal{C}_k(f))$ は $\mathcal{C}_k(f)$ の Hilbert 基底を表す.

2　M 凸劣モジュラ流問題の解法

2.1　概要

M 凸関数は, 整数格子点上で定義された関数のクラスとして, 離散凸解析 [7, 8] において中心的な役割を担っている．M 凸劣モジュラ流問題は, 効率良く解くことができる組合せ最適化問題の最も一般的な枠組みの一つであり, その特殊ケースとして最小費用流問題や劣モジュラ流問題を含んでいる．また, 数理経済学への応用として, 不可分財の交換市場における競争均衡を求める問題が M 凸劣モジュラ流問題に帰着されている [10].

昨年度の研究では, スケーリングに関して不変な M 凸関数に限定して, 多項式時間の容量スケーリング算法が構成できることが示された [5]．本研究では，この結果を拡張して, 容量スケーリング法を一般の M 凸関数に適用する手法を開発し, M 凸劣モジュラ流問題に対する組合せ的な多項式時間アルゴリズムを設計した．その結果, どのような M 凸関数にも適用できるという意味でよりロバストな汎用解法が得られたことになる.

2.2　M 凸関数

M 凸関数の定義を述べる．V を有限集合とする．関数 $f : \mathbf{Z}^V \to \mathbf{R} \cup \{+\infty\}$ が **M 凸関数**であるとは, f が**交換公理** (M-EXC) を満たすことである.

(M-EXC) $\forall x, y \in \mathrm{dom}\, f$, $\forall u \in \mathrm{supp}^+(x-y)$, $\exists v \in \mathrm{supp}^-(x-y)$:
$f(x) + f(y) \geq f(x - \chi_u + \chi_v) + f(y + \chi_u - \chi_v)$.

ここで, $\mathrm{dom}\, f = \{x \in \mathbf{Z}^V \mid f(x) < +\infty\}$,
$\mathrm{supp}^+(x-y) = \{w \in V \mid x(w) > y(w)\}$,
$\mathrm{supp}^-(x-y) = \{w \in V \mid x(w) < y(w)\}$
であり, χ_w は $w \in V$ の特性ベクトルを表す.

2.3　M凸劣モジュラ流問題

M凸劣モジュラ流問題とは, 以下のように定義される最適化問題である．有向グラフ $G = (V, A)$ を考える．各枝の流量の下限と上限 $\underline{c}, \overline{c} \in \mathbf{Z}^A$ および, 単位流量あたりの費用 $\gamma \in \mathbf{R}^A$ が与えられているとする. 容量の上下限制約を満たし与えられた供給量と整合的なフロー $\xi \in \mathbf{Z}^A$ の中で総費用を最小にするものを求める問題である最小費用流問題は, 供給制約をフローの境界 $\partial\xi$ がある基多面体に属すべきであるという制約に置き換えた劣モジュラ流問題に一般化される. 劣モジュラ流問題はポテンシャル (双対変数) よる最適性規準, 負閉路による最適性規準, 最適解の整数性, 効率的なアルゴリズムの存在などの良い性質をもっており, 扱いやすい組合せ最適化問題の代表となっている.

さらに, $\partial\xi$ に対するコスト関数 $f : \mathbf{Z}^V \to \mathbf{R} \cup \{+\infty\}$ を目的関数に加えるという一般化を考えるとき, f がM凸関数ならば良い性質が保たれる. M凸関数 f によって以下のように定義される問題を整数値フローの **M 凸劣モジュラ流問題**と呼ぶ.

$$
\begin{array}{ll}
\text{Minimize} & \Gamma(\xi) = f(\partial\xi) + \displaystyle\sum_{a \in A} \gamma(a)\xi(a) \\
\text{subject to} & \underline{c}(a) \leq \xi(a) \leq \overline{c}(a) \quad (a \in A), \\
& \partial\xi \in \mathrm{dom}\, f, \\
& \xi(a) \in \mathbf{Z} \quad (a \in A).
\end{array}
$$

2.4　アルゴリズム

本年度の研究では，劣モジュラ流問題に対する容量スケーリング法を高速化した Fleischer–Iwata–McCormick [2] のアルゴリズムを拡張して, 一般の M 凸劣モジュラ流問題に対する多項式時間解法を導いた．ネットワークの点の個数を n, 最大容量を L, 最大費用を K, M 凸関数 f の関数値計算に要する時間を F とする．このとき, 新しいアルゴリズムの計算量は $O(Fn^6(\log L)^2 \log K)$ である.

一方で，M 凸関数がスケーリングに関して閉じている場合の M 凸劣モジュラ流問題に対して, 昨年度に開発されたアルゴリズムの計算量は,

$O(Fn^4 \log L)$ であり, 適用可能な範囲が限定されている代わりに高速になっている. 状況に応じて, 両者を使い分けることが望まれる.

3 行列束に関するロバスト線形計算

微分代数方程式で記述される動的システムの解析においては, 行列束の Kronecker 標準形の構造指数が基本的な役割を果たしている. しかし, 構造指数は, 摂動に対して不安定な離散値を取るため, 正確に計算するには, 計算誤差に対してロバストな手法の開発が必要とされる. 本研究は, 行列束の零非零パターンに代表される離散構造に注目し, 離散最適化の高度な技法を積極的に活用することによって, この様な要請に応えることを目的としている.

行列束とは, 同じサイズの定数行列の組 (A, B) のことであり, 各要素が 1 次以下の多項式行列 $M(s) = sA + B$ として表現される. 任意の行列束 $M(s)$ に対して, 正則行列 P, Q が存在して, $K(s) = PM(s)Q$ が $\{sI_\nu + J, N_{\mu_1}, \cdots, N_{\mu_b}, L_{\epsilon_1}, \cdots, L_{\epsilon_p}, U_{\eta_1}, \cdots, U_{\eta_q}\}$ を成分とするブロック対角行列となる. ここで, I_ν は ν 次単位行列であり, N_μ は μ 次正則行列束

$$N_\mu = \begin{bmatrix} 1 & s & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & s & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & s \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

L_ϵ は $\epsilon \times (\epsilon + 1)$ 行列束

$$L_\epsilon = \begin{bmatrix} 1 & s & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & s & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & s \end{bmatrix}$$

を表す. また, U_η は L_η の転置行列である. ブロック対角行列 $K(s)$ を, $M(s)$ の Kronecker 標準形, $\nu, \mu_1, \cdots, \mu_b, \epsilon_1, \cdots, \epsilon_p, \eta_1, \cdots, \eta_q$ を, その構造指数と呼ぶ. 特に, $\mu_1, \cdots, \mu_b$ を巾零指数, $\epsilon_1, \cdots, \epsilon_p$ を列指数, $\eta_1, \cdots, \eta_q$ を行指数と呼ぶ.

巾零指数は, $M(s)$ の k 次小行列式の最大次数 $\delta_k(M)$ を各 k に対して計算することによって, 決定することができる. 一般の多項式行列に対して, $\delta_k(M)$ を計算する組合せ緩和算法が室田 [6] によって提案された. この算法は, 零非零パターンから得られる 2 部グラフ上のマッチング問題を解いて, $\delta_k(M)$ の推定値を得, この推定値が妥当か否かを数値計算を用いて検証し, 妥当でないと判定された場合には行列を変形するという操作を繰り返す.

計算機実験の結果, この組合せ緩和算法は, 計算時間の点では効率的であるものの, 多項式行列の変形を行った結果, 計算に必要とされる記憶容量が大きくなるという問題点を抱えていることが明らかとなった [4]. そこで, 対象を行列束に限定した上で, 定数行列による同値変換のみを用いた新たな組合せ緩和算法を開発し, 必要となる記憶容量を格段に減らした [3]. この結果, 誤差を伴う数値計算を極力避けて, 行列束の巾零指数を正確に計算する効率的なアルゴリズムが得られた.

さらに, 行指数/列指数に関する組合せ緩和法の開発を目標として, 数値計算を全く行わずに, 行指数, 列指数の推定値を得る組合せ的な手法を導入した. この手法では, 巾零指数の場合と異なり, 非零要素が代数的独立であると仮定した場合にも, 推定値が必ずしも真値と一致しないことが判明した.

本年度の研究では, この組合せ的手法で得られる各行指数 (列指数) の推定値の総和が, 代数的独立性の仮定の下では, 真値と一致することを証明した. 実際, 構造可制御や構造可観測性と言った動的システムの性質を解析する際には, 個々の指数の値よりも, その総和が重要な役割を果たす. したがって, 本研究で導入した組合せ的手法は, 動的システムの構造解析には適用可能であることが期待できる.

新たに導入した組合せ的な推定値を利用した組合せ的緩和算法の開発は, 依然として, 今後の課題である. 代数的独立性の仮定のもとで総和が一致するという事実からは, 組合せ的緩和算法の計算量が抑えられるものと期待される.

参考文献

[1] R. Hemmecke: Test sets for integer programs with Z-convex objective, preprint.

[2] L. Fleischer, S. Iwata, S. T. McCormick: A faster scaling algorithm for minimum cost submodular flow, *Math. Programming*, **92** (2002), 119–139.

[3] S. Iwata: Computing the maximum degree of minors in matrix pencils via combinatorial relaxation, *Algorithmica*, **36** (2003), 331–341.

[4] S. Iwata, K. Murota and I. Sakuta: Primal-dual combinatorial relaxation algorithms for the maximum degree of subdeterminants, *SIAM J. Sci. Comput.*, **17** (1996), 993–1012.

[5] S. Moriguchi and K. Murota: Capacity scaling algorithm for scalable M-convex submodular flow problems, *Optimization Methods and Software*, **18** (2003), 207–218.

[6] K. Murota: Combinatorial relaxation algorithm for the maximum degree of subdeterminants: Computing Smith-McMillan form at infinity and structural indices in Kronecker form, *Appl. Algebra Engin. Comm. Comput.*, **6** (1995), 251–273.

[7] 室田一雄: 離散凸解析, 共立出版, 2001.

[8] K. Murota: *Discrete Convex Analysis*, SIAM, 2003.

[9] K. Murota, H. Saito, and R. Weismantel: Optimality criterion for a class of nonlinear integer programs, *Oper. Res. Lett.*, to appear.

[10] K. Murota and A. Tamura: Application of M-convex submodular flow problem to mathematical economics, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, **20** (2003), 257–277