

計算数理基礎（多面体の組合せ論）

担当: 相馬 輔

July 18, 2024

目次

1. 組合せ最適化とは

- 組合せ最適化とは？
- 組合せ最適化問題を「解く」とは？
- 多項式時間とは？

2. 線形計画の復習

- 主問題・双対問題
- 相補性条件
- 多面体

3. 整数多面体，完全単模行列

- 完全単模行列
- 整数多面体
- 整数多面体と LP の整数性

目次

1. 組合せ最適化とは

- 組合せ最適化とは？
- 組合せ最適化問題を「解く」とは？
- 多項式時間とは？

2. 線形計画の復習

- 主問題・双対問題
- 相補性条件
- 多面体

3. 整数多面体，完全単模行列

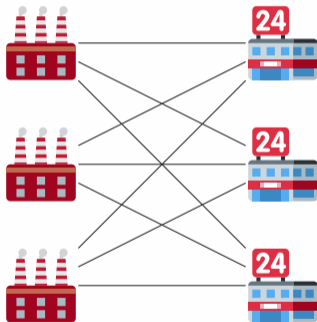
- 完全単模行列
- 整数多面体
- 整数多面体と LP の整数性

組合せ最適化とは

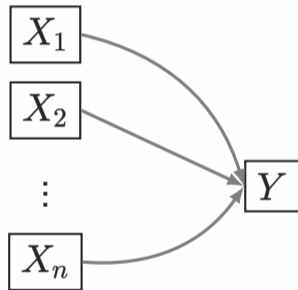
離散的な対象の中から最も良いものを**効率的**に求める方法論



ネットワーク



マッチング



機械学習・統計

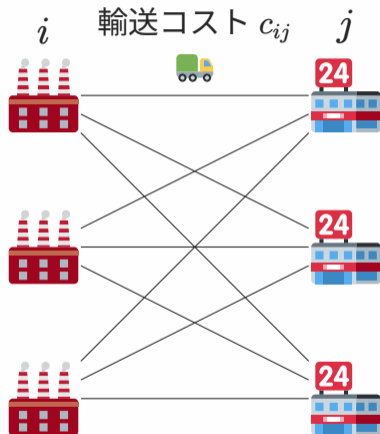
例: 割当問題

割当問題

入力 コスト $c_{ij} \in \mathbb{R}$ ($1 \leq i, j \leq n$)

出力 総コスト最小のマッチング

マッチング... どの頂点にも 1 本だけ枝が
接続しているような枝部分集合



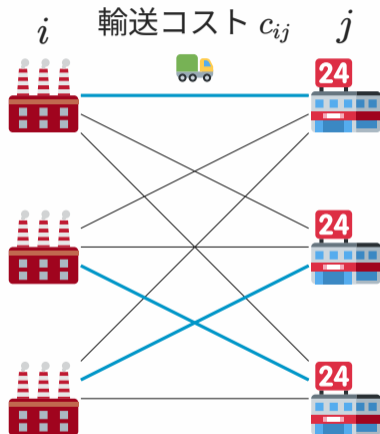
例: 割当問題

割当問題

入力 コスト $c_{ij} \in \mathbb{R}$ ($1 \leq i, j \leq n$)

出力 総コスト最小のマッチング

マッチング... どの頂点にも1本だけ枝が接続しているような枝部分集合



例: 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題

入力 枝コスト $c_{ij} \in \mathbb{R}$ ($1 \leq i, j \leq n$)

出力 各頂点を一度だけ通る閉路で総コスト最小のもの

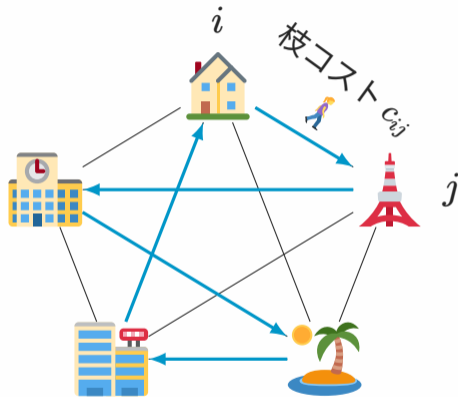


例: 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題

入力 枝コスト $c_{ij} \in \mathbb{R}$ ($1 \leq i, j \leq n$)

出力 各頂点を一度だけ通る閉路で総コスト最小のもの

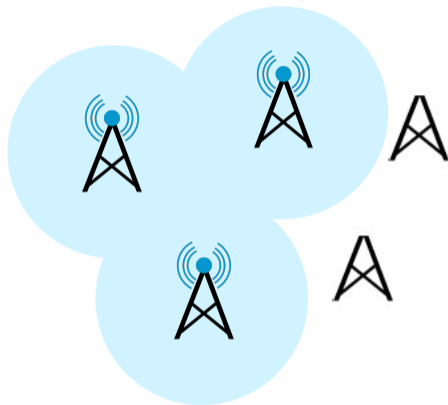


例: 最大被覆問題

最大被覆問題

入力 V : 基地局候補地の集合, $k \in \mathbb{Z}_+$

出力 $S \subseteq V$ で $|S| \leq k$ かつ S に設置したときの被覆範囲が最大となるもの



愚直な方法: 全探索

解をすべて調べて、その中から最適解を選ぶ！

愚直な方法: 全探索

解をすべて調べて、その中から最適解を選ぶ!

巡回セールスマン問題の場合

1秒間に10京 (= 10^{17}) 通り調べられるとする.

頂点数 n	計算時間 $\approx n!$
---------	-------------------

10	3.6×10^{-11} 秒
----	-------------------------

20	24 秒
----	------

30	3168 万年
----	---------

愚直な方法: 全探索

解をすべて調べて，その中から最適解を選ぶ！

巡回セールスマン問題の場合

1秒間に10京 (= 10^{17}) 通り調べられるとする.

頂点数 n	計算時間 $\approx n!$
10	3.6×10^{-11} 秒
20	24 秒
30	3168 万年



引用: 『フカシギの数え方』 おねえさんといっしょ! みんなで数えてみよう!
<https://www.youtube.com/watch?v=Q4gTV4r0zRs>

愚直な方法: 全探索

解をすべて調べて、その中から最適解を選ぶ！

巡回セールスマン問題の場合

1秒間に10京 (= 10^{17}) 通り調べられるとする。

頂点数 n	計算時間 $\approx n!$
10	3.6×10^{-11} 秒
20	24 秒
30	3168 万年



引用: 『フカシギの数え方』 おねえさんといっしょ! みんなで数えてみよう!
<https://www.youtube.com/watch?v=Q4gTV4r0zRs>

現実的ではないので、より**効率的なアルゴリズム**を研究する必要！

“効率的” って何だろう？ 🤔

アルゴリズムの時間計算量

アルゴリズムの時間計算量

入力の大きさ n に対して，アルゴリズムが**最大で**何回の**基本演算**（四則演算，大小比較，ビット演算...）を行うかで測る．

アルゴリズムの時間計算量

アルゴリズムの時間計算量

入力の大きさ n に対して，アルゴリズムが**最大で**何回の**基本演算**（四則演算，大小比較，ビット演算...）を行うかで測る．

多項式時間 高々 n の多項式回の基本演算

例: $O(n)$ 時間， $O(n^2)$ 時間， $O(n \log n)$ 時間， $O(n^{10000})$ 時間

指数時間 $O(2^n)$ 回，もしくはそれより大きい回数の基本演算

アルゴリズムの時間計算量

アルゴリズムの時間計算量

入力の大きさ n に対して，アルゴリズムが**最大で**何回の**基本演算**（四則演算，大小比較，ビット演算...）を行うかで測る．

多項式時間 高々 n の多項式回の基本演算

例: $O(n)$ 時間， $O(n^2)$ 時間， $O(n \log n)$ 時間， $O(n^{10000})$ 時間

指数時間 $O(2^n)$ 回，もしくはそれより大きい回数の基本演算

「最大で」・・・アルゴリズムにとって**最も苦手**な入力を与えたときにかかる計算量を考える．（最悪時計算量）

目次

1. 組合せ最適化とは

- 組合せ最適化とは？
- 組合せ最適化問題を「解く」とは？
- 多項式時間とは？

2. 線形計画の復習

- 主問題・双対問題
- 相補性条件
- 多面体

3. 整数多面体，完全単模行列

- 完全単模行列
- 整数多面体
- 整数多面体と LP の整数性

線形計画 (LP)

LP は以下の標準形で書くことができる:

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & \sum_{j=1}^n c_j x_j \\ \text{subject to} \quad & \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i \quad (i = 1, \dots, m) \\ & x_j \geq 0 \quad (j = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

線形計画 (LP)

LP は以下の標準形で書くことができる:

$$\begin{aligned} &\text{maximize} && \sum_{j=1}^n c_j x_j \\ &\text{subject to} && \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i \quad (i = 1, \dots, m) \\ &&& x_j \geq 0 \quad (j = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\text{maximize} && c^T x \\ &\text{subject to} && Ax \leq b \\ &&& x \geq 0 \end{aligned}$$

- A : $m \times n$ 行列
- b : m 次元ベクトル
- c : n 次元ベクトル
- x : n 次元決定変数

双対問題・強双対定理

主問題 (P)

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & c^\top x \\ \text{subject to} & Ax \leq b \\ & x \geq 0 \end{array}$$

双対問題 (D)

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & b^\top y \\ \text{subject to} & A^\top y \geq c \\ & y \geq 0 \end{array}$$

双対問題・強双対定理

主問題 (P)

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && c^\top x \\ & \text{subject to} && Ax \leq b \\ & && x \geq 0 \end{aligned}$$

双対問題 (D)

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && b^\top y \\ & \text{subject to} && A^\top y \geq c \\ & && y \geq 0 \end{aligned}$$

定理 (強双対定理)

主問題 (P) と双対問題 (D) がともに実行可能ならば、主問題 (P) に最適解 x^* 、双対問題 (D) に最適解 y^* が存在して $c^\top x^* = b^\top y^*$ が成り立つ。

相補性条件

定理 (相補性条件)

主問題 (P) の実行可能解 x と双対問題 (D) の実行可能解 y に対し, x と y がそれぞれの最適解

$$\iff (A^T y - c)^T x = 0 \text{ かつ } (b - Ax)^T y = 0$$

主問題 (P)

$$\begin{aligned} \max \quad & c^T x \\ \text{s.t.} \quad & Ax \leq b \\ & x \geq 0 \end{aligned}$$

双対問題 (D)

$$\begin{aligned} \min \quad & b^T y \\ \text{s.t.} \quad & A^T y \geq c \\ & y \geq 0 \end{aligned}$$

相補性条件

定理 (相補性条件)

主問題 (P) の実行可能解 x と双対問題 (D) の実行可能解 y に対し, x と y がそれぞれの最適解

$$\iff (A^T y - c)^T x = 0 \text{ かつ } (b - Ax)^T y = 0$$

証明

実行可能解 (x, y) に対して,

$$c^T x \leq (A^T y)^T x = y^T (Ax) \leq y^T b$$

が常に成り立つ (弱双対性).

主問題 (P)

$$\begin{aligned} \max \quad & c^T x \\ \text{s.t.} \quad & Ax \leq b \\ & x \geq 0 \end{aligned}$$

双対問題 (D)

$$\begin{aligned} \min \quad & b^T y \\ \text{s.t.} \quad & A^T y \geq c \\ & y \geq 0 \end{aligned}$$

相補性条件

定理 (相補性条件)

主問題 (P) の実行可能解 x と双対問題 (D) の実行可能解 y に対し, x と y がそれぞれの最適解

$$\iff (A^\top y - c)^\top x = 0 \text{ かつ } (b - Ax)^\top y = 0$$

証明

実行可能解 (x, y) に対して,

$$c^\top x \leq (A^\top y)^\top x = y^\top (Ax) \leq y^\top b$$

が常に成り立つ (弱双対性). (x, y) が最適解ならば, 強双対定理から $c^\top x = y^\top b$ なので, 途中の不等号はすべて等号.

よって

$$c^\top x = (A^\top y)^\top x, \quad y^\top (Ax) = y^\top b$$

が成り立つ. 移項すると相補性条件が出る. 逆も同様. \square

主問題 (P)

$$\begin{aligned} \max \quad & c^\top x \\ \text{s.t.} \quad & Ax \leq b \\ & x \geq 0 \end{aligned}$$

双対問題 (D)

$$\begin{aligned} \min \quad & b^\top y \\ \text{s.t.} \quad & A^\top y \geq c \\ & y \geq 0 \end{aligned}$$

多面体と端点

LP の実行可能領域

$$P = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leq b, x \geq 0\} = \left\{x \in \mathbb{R}^n : \begin{array}{c} [A] \\ [-I] \end{array} x \leq \begin{array}{c} [b] \\ [0] \end{array} \right\}$$

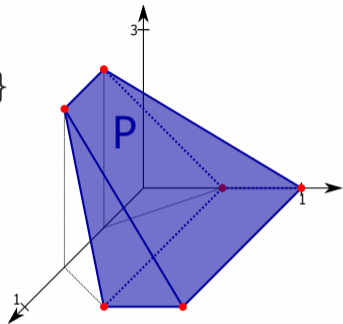
\tilde{A} \tilde{b}

は**多面体 (polyhedron)** と呼ばれる凸集合.

補題

多面体 P の端点を x とする. このとき, 次を満たす大きさ n の行部分集合 S が存在する.

- \tilde{A} から S に対応する行を抜き出した部分行列 \tilde{A}_S は正則
- x は線形方程式 $(\tilde{A}_S)x = \tilde{b}_S$ の (一意) 解. ここで, \tilde{b}_S は b から S に対応する行を抜き出したベクトル.



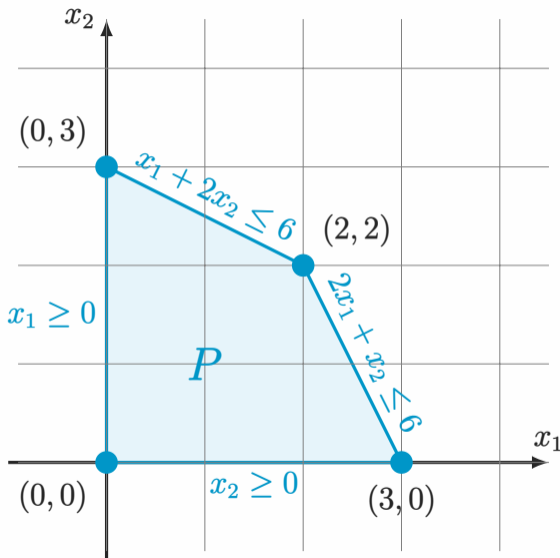
例

P :

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 \leq 6 \\ 2x_1 + x_2 \leq 6 \\ x_1 \geq 0 \\ x_2 \geq 0 \end{cases}$$

で定まる \mathbb{R}^2 の多面体

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \tilde{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 6 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$



目次

1. 組合せ最適化とは

- 組合せ最適化とは？
- 組合せ最適化問題を「解く」とは？
- 多項式時間とは？

2. 線形計画の復習

- 主問題・双対問題
- 相補性条件
- 多面体

3. 整数多面体，完全単模行列

- 完全単模行列
- 整数多面体
- 整数多面体と LP の整数性

LPを使った組合せ最適化問題の解法？

- ① 組合せ最適化問題を **0-1 整数計画問題 (IP)** として定式化する
- ② IP の 0-1 制約を落として得られる LP を解く
- ③ もし 0-1 成分の LP 最適解が得られたら、それは元の IP の最適解でもあるので、問題が解けた（ラッキー！）

これがうまくいくための十分条件は？ → **完全単模行列**

例：二部マッチング

重み付き二部マッチング問題

入力 $G = (V; E)$: 二部グラフ, 枝重み $w_e (e \in E)$

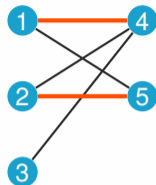
出力 G の最大重みマッチング M

例：二部マッチング

重み付き二部マッチング問題

入力 $G = (V; E)$: 二部グラフ, 枝重み w_e ($e \in E$)

出力 G の最大重みマッチング M



IP 定式化

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && \sum_{e \in E} w_e x_e \\ & \text{subject to} && \sum_{e \in \delta(i)} x_e \leq 1 \quad (i \in V) \\ & && x_e \in \{0, 1\} \quad (e \in E) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \max \quad & w^\top x \\ \text{s.t.} \quad & x_{14} + x_{15} \leq 1 \\ & x_{24} + x_{25} \leq 1 \\ & x_{34} \leq 1 \\ & x_{14} + x_{24} + x_{34} \leq 1 \\ & x_{15} + x_{25} \leq 1 \\ & x_{14}, x_{15}, x_{24}, x_{25}, x_{34} \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

例：二部マッチング

重み付き二部マッチング問題

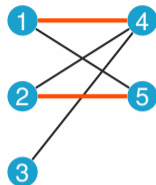
入力 $G = (V; E)$: 二部グラフ, 枝重み $w_e (e \in E)$

出力 G の最大重みマッチング M

LP 定式化

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && \sum_{e \in E} w_e x_e \\ & \text{subject to} && \sum_{e \in \delta(i)} x_e \leq 1 \quad (i \in V) \\ & && x_e \geq 0 \quad (e \in E) \end{aligned}$$

実は、係数行列の完全単模性により常に 0-1 の LP 最適解をもつ！



$$\begin{aligned} & \max && w^\top x \\ & \text{s.t.} && x_{14} + x_{15} \leq 1 \\ & && x_{24} + x_{25} \leq 1 \\ & && x_{34} \leq 1 \\ & && x_{14} + x_{24} + x_{34} \leq 1 \\ & && x_{15} + x_{25} \leq 1 \\ & && x_{14}, x_{15}, x_{24}, x_{25}, x_{34} \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

完全単模行列

定義 (完全単模行列)

$m \times n$ 行列 A が**完全単模行列** $\stackrel{\text{def}}{\iff}$ A のすべての小行列式 $\in \{0, \pm 1\}$

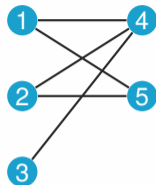
例

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

例: 二部マッチング

補題

二部マッチングの LP の係数行列 A は完全単模行列.



$$\begin{array}{c} x_{14} \quad x_{15} \quad x_{24} \quad x_{25} \quad x_{34} \\ \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} \left[\begin{array}{ccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right] \end{array}$$

例: 二部マッチング

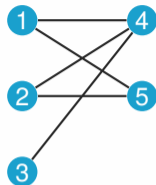
補題

二部マッチングの LP の係数行列 A は完全単模行列.

証明 $k \times k$ 小行列式 $= 0, \pm 1$ であることを, k に関する帰納法で示す.

$k = 1$ のときは, A の成分は $0, 1$ なので明らか.

$k > 1$ とし, $k \times k$ 小行列 A' を考える.



$$\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{ccccc} x_{14} & x_{15} & x_{24} & x_{25} & x_{34} \\ \left[\begin{array}{ccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right] \end{array}$$

例: 二部マッチング

補題

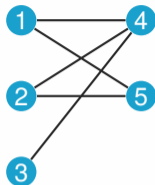
二部マッチングの LP の係数行列 A は完全単模行列.

証明 $k \times k$ 小行列式 $= 0, \pm 1$ であることを, k に関する帰納法で示す.

$k = 1$ のときは, A の成分は $0, 1$ なので明らか.

$k > 1$ とし, $k \times k$ 小行列 A' を考える.

- A' にゼロ列が含まれる場合: $\det A' = 0$ より成立.



$$\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{ccccc} x_{14} & x_{15} & x_{24} & x_{25} & x_{34} \\ \left[\begin{array}{ccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right] \end{array}$$

例: 二部マッチング

補題

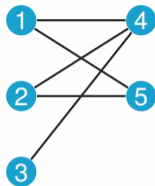
二部マッチングのLPの係数行列 A は完全単模行列.

証明 $k \times k$ 小行列式 $= 0, \pm 1$ であることを, k に関する帰納法で示す.

$k = 1$ のときは, A の成分は $0, 1$ なので明らか.

$k > 1$ とし, $k \times k$ 小行列 A' を考える.

- A' にゼロ列が含まれる場合: $\det A' = 0$ より成立.
- A' に 1 が 1 つだけ含まれる列がある場合: 余因子展開すれば, $(k-1) \times (k-1)$ 小行列 A'' を用いて, $\det A' = \pm \det A''$. 帰納法の仮定より $\det A'' \in \{0, \pm 1\}$ なので OK.



$$\begin{array}{c} x_{14} \quad x_{15} \quad x_{24} \quad x_{25} \quad x_{34} \\ \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} \left[\begin{array}{ccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right] \end{array}$$

例: 二部マッチング

補題

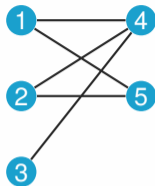
二部マッチングのLPの係数行列 A は完全単模行列.

証明 $k \times k$ 小行列式 $= 0, \pm 1$ であることを, k に関する帰納法で示す.

$k = 1$ のときは, A の成分は $0, 1$ なので明らか.

$k > 1$ とし, $k \times k$ 小行列 A' を考える.

- A' にゼロ列が含まれる場合: $\det A' = 0$ より成立.
- A' に 1 が 1 つだけ含まれる列がある場合: 余因子展開すれば, $(k-1) \times (k-1)$ 小行列 A'' を用いて, $\det A' = \pm \det A''$. 帰納法の仮定より $\det A'' \in \{0, \pm 1\}$ なので OK.
- A' のどの列にも 1 が 2 つ含まれる場合: 左側の頂点に $+1$, 右側の頂点に -1 をおいた行ベクトル v を考えると, $vA' = 0$. よって, A' は正則ではないので, $\det A' = 0$. \square

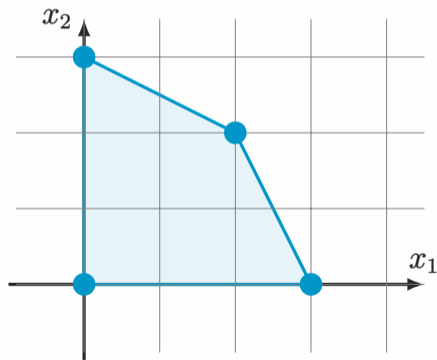


$$\begin{array}{c} x_{14} \quad x_{15} \quad x_{24} \quad x_{25} \quad x_{34} \\ \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} \left[\begin{array}{ccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right] \end{array}$$

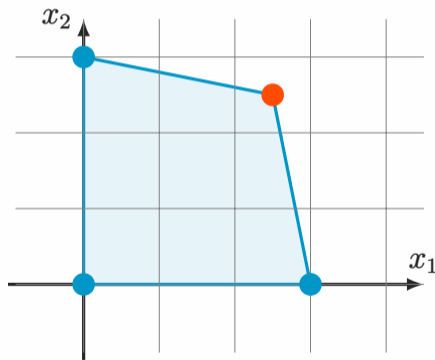
整数多面体

定義 (整数多面体)

全ての端点が整数ベクトルである多面体を**整数多面体**と呼ぶ。



整数多面体



整数多面体でない多面体

完全単模行列と整数多面体

定理

完全単模行列 A と整数ベクトル b が定める多面体 $P = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leq b, x \geq 0\}$ は整数多面体.

完全単模行列と整数多面体

定理

完全単模行列 A と整数ベクトル b が定める多面体 $P = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leq b, x \geq 0\}$ は整数多面体.

証明

x を P の端点とする. x は, (\tilde{A}, \tilde{b}) から n 行を抜き出して得られる正則行列 A' と部分ベクトル b' に対して, 線形方程式 $A'x = b'$ の解 $x = (A')^{-1}b'$ として得られる.

完全単模行列と整数多面体

定理

完全単模行列 A と整数ベクトル b が定める多面体 $P = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leq b, x \geq 0\}$ は整数多面体。

証明

x を P の端点とする。 x は、 (\tilde{A}, \tilde{b}) から n 行を抜き出して得られる正則行列 A' と部分ベクトル b' に対して、線形方程式 $A'x = b'$ の解 $x = (A')^{-1}b'$ として得られる。クラメル公式より、

$$(A')_{ij}^{-1} = \frac{\Delta_{j,i}A'}{\det A'} \in \{0, \pm 1\}$$

※ $\Delta_{j,i}A' = A'$ の (j, i) 余因子

b' は整数ベクトルなので、 $(A')^{-1}b'$ も整数ベクトル。



完全単模行列とLPの整数性

定理

A が完全単模行列， b が整数ベクトルである主問題(P)を考える．もし(P)が最適解をもつならば，(P)に**整数ベクトル**の最適解が存在する．

主問題 (P)

$$\begin{array}{ll} \max & c^\top x \\ \text{s.t.} & Ax \leq b \\ & x \geq 0 \end{array}$$

完全単模行列とLPの整数性

定理

A が完全単模行列， b が整数ベクトルである主問題 (P) を考える．もし (P) が最適解をもつならば，(P) に**整数ベクトル**の最適解が存在する．

主問題 (P)

$$\begin{array}{ll} \max & c^\top x \\ \text{s.t.} & Ax \leq b \\ & x \geq 0 \end{array}$$

証明

前定理より，(P) の実行可能領域 P は整数多面体である．いま，(P) が最適解をもつので，特に P の端点である最適解が存在する．整数多面体の定義より，これは整数ベクトル． □