対称差に対する劣モジュラ関数の基準集合発見問題

中島淳平 * 山内由紀子 † 来嶋秀治 † 山下雅史 †
* 九州大学大学院システム情報科学府
† 九州大学大学院システム情報科学研究院

1 はじめに

劣モジュラ関数は集合関数のクラスであり，その代表例はグラフのカット関数とマトロイドの階数関数である．劣モジュラ関数の最小化は多項式回の関数値呼び出しで達成できることが知られている [1]．また，劣モジュラ関数は凸関数と類似する性質を示すことが知られている [3]．

凸関数の変数に対してアフィン変換を行っても凸性は保存される．したがって，変数変換前の関数，変換後の関数のどちらにも凸関数に対する最小化アルゴリズムを適用することができる．一方，劣モジュラ関数について同様の性質はあまり知られていない．

本稿では，基準集合との対称差で定められる変数変換（対称差変換）を考える．劣モジュラ関数を対称差変換した関数の最小化問題を考え，この問題が一般には解けないことを示す（4 節）．一方，変換前の関数が狭義劣モジュラ関数のとき，対称差変換の基準集合が求まることを示す（3 節）．

2 準備

V を有限集合とし，$n = |V|$ とする．関数 $f : 2^V \to \mathbb{R}$ が任意の $X, Y \subseteq V$ について，

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

を満たすとき，f を劣モジュラ関数という．劣モジュラ関数 f が，$X \not\subseteq Y$，$Y \not\subseteq X$ を満たす任意の $X, Y \subseteq V$ について，

$$f(X) + f(Y) > f(X \cup Y) + f(X \cap Y)$$

を満たすとき，f を狭義劣モジュラ関数という．

集合 $S \subseteq V$ の特性ベクトル $\boldsymbol{\chi}_S \in \{0,1\}^V$ を

$$\boldsymbol{\chi}_S(u) = \begin{cases} 1 & (u \in S), \\ 0 & (u \notin S) \end{cases}$$

と定義する．集合 $X, Y \subseteq V$ の対称差 $X \triangle Y$ を，

$$X \triangle Y = (X \cup Y) \setminus (X \cap Y)$$

と定義する．集合 $X \subseteq V$ の補集合 X^c を $X^c = V \setminus X$ とする．集合関数の変数変換を次のように定義する．

定義 2.1 (対称差変換)**.** 集合関数 $g : 2^V \to \mathbb{R}$ を集合 $S_0 \subseteq V$ との対称差によって変数変換した関数 f を，

$$f(X) = g(X \triangle S_0)$$

とする．

劣モジュラ性はこの変換によって保存されない．したがって，劣モジュラ関数を変換した関数に対して劣モジュラ関数最小化アルゴリズムを用いることはできない．そのため，変換後の関数から変換前の劣モジュラ関数を求める問題を考える．

問題 2.2. **入力**: 関数 $f : 2^V \to \mathbb{R}$ の関数値オラクルを入力とする．ただし，関数 f は，ある劣モジュラ関数 $g : 2^V \to \mathbb{R}$ と集合 $S_0 \subseteq V$ の組について $f(X) = g(X \triangle S_0)$ を満たす．

出力: 次の条件を満たす集合 $S \subseteq V$ を出力する．関数 $h(X) = f(X \triangle S)$ は劣モジュラ関数である．

問題 2.2 の出力となり得る集合 $S \subseteq V$ を，関数 f の基準集合と呼ぶことにする．

Vol.2016-AL-160 No.9
2016/11/24

3 狭義劣モジュラ関数に対する解法

本節では，問題 2.2 を狭義劣モジュラ関数に限定した次の問題について考える．

問題 3.1. **入力**: 関数 $f : 2^V \to \mathbb{R}$ のオラクルを入力とする．ただし，関数 f は，ある狭義劣モジュラ関数 $g : 2^V \to \mathbb{R}$ と集合 $S_0 \subseteq V$ の組について $f(X) = g(X \vartriangle S_0)$ を満たす．

出力: 次の条件を満たす集合 $S \subseteq V$ を出力する．関数 $h(X) = f(X \vartriangle S)$ は狭義劣モジュラ関数である．

集合 V のすべての部分集合の組について劣モジュラ性を調べると，指数回の関数値呼び出しが必要になる．これを避けるために，空集合の近傍での関数 f の値から，基準集合を求める方法を考える．

元の対 $u, v \in V\,(u \neq v)$ について，$f(\{u\}) + f(\{v\})$ と $f(\{u,v\}) + f(\emptyset)$ の大小関係と，u, v と S_0 の包含関係に着目する．

$f(\{u\}) + f(\{v\}) > f(\{u,v\}) + f(\emptyset)$ のとき，$\{u,v\} \subseteq S_0$ または $\{u,v\} \subseteq S_0^c$ が成り立つ．一方， $f(\{u\}) + f(\{v\}) < f(\{u,v\}) + f(\emptyset)$ のとき，$u \in S_0$ かつ $v \notin S_0$，または，$u \notin S_0$ かつ $v \in S_0$ のいずれかが成り立つ．

すなわち，$\{u\}$ と $\{v\}$ に関する劣モジュラ不等式が成立すれば，u と v は S_0 と S_0^c のうち同じ集合に属す．一方，劣モジュラ不等式が成立しなければ u と v は S_0 と S_0^c の異なる集合に属す．この事実に基づき，問題 3.1 に対するアルゴリズムを設計する．

入力として与えられる関数 f について，GF(2) 上の連立方程式 $B_n \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を定義する．行列 $B_n \in \{0,1\}^{\binom{V}{2} \times n}$ の $\{u,v\} \in \binom{V}{2}$ 行は

$$B_n(\{u,v\}) = \boldsymbol{\chi}_{\{u,v\}}^{\mathrm{T}}$$

とし，ベクトル $\boldsymbol{b} \in \{0,1\}^{\binom{V}{2}}$ の $\{u,v\} \in \binom{V}{2}$ 成分は

$$\boldsymbol{b}(\{u,v\}) = \begin{cases} 0 & f(\{u\}) + f(\{v\}) > f(\{u,v\}) + f(\emptyset), \\ 1 & f(\{u\}) + f(\{v\}) < f(\{u,v\}) + f(\emptyset) \end{cases}$$

とする．ただし，$\binom{V}{2} = \{T \subseteq V \mid |T| = 2\}$ とする．

アルゴリズム 1 は問題 3.1 を解くアルゴリズムである．以後，アルゴリズム 1 の正しさを示す．

アルゴリズム 1

1: 与えられた関数 f について，方程式 $B_n \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をたてる．
2: 方程式の解を一つの解 $\boldsymbol{\chi}_S$ を求める．
3: $\boldsymbol{\chi}_S$ を特性ベクトルとする集合 S を出力する．

補題 3.2. アルゴリズム 1 が出力した集合を $S \subseteq V$ とし，関数 h を $h(X) = f(X \vartriangle S)$ と定義する．h が狭義劣モジュラ関数ならば，$B_n \boldsymbol{\chi}_S = \boldsymbol{b}$ が成り立つ．

証明. 証明は二つの元 $u, v \in V$ に対する場合分けによる．

$u, v \notin S$ のとき，関数 h の定義から，

$$f(\{u\}) = h(S \cup \{u\}), \qquad f(\{v\}) = h(S \cup \{v\}),$$
$$f(\{u,v\}) = h(S \cup \{u,v\}), \qquad f(\emptyset) = h(S).$$

h の劣モジュラ性より，

$$h(S \cup \{u\}) + h(S \cup \{v\}) > h(S \cup \{u,v\}) + h(S).$$

よって，$f(\{u\}) + f(\{v\}) > f(\{u,v\}) + f(\emptyset)$. したがって，ベクトル $\boldsymbol{b}$ の定義から，$\boldsymbol{b}(\{u,v\}) = 0$. 一方，$\boldsymbol{\chi}_S(u) = \boldsymbol{\chi}_S(v) = 0$ だから，$\boldsymbol{\chi}_S(u) + \boldsymbol{\chi}_S(v) = 0$.

$u, v \in S$ のとき，

$$f(\{u\}) = h(S \setminus \{u\}), \qquad f(\{v\}) = h(S \setminus \{v\}),$$
$$f(\{u,v\}) = h(S \setminus \{u,v\}), \qquad f(\emptyset) = h(S).$$

h の劣モジュラ性より，

$$h(S \setminus \{u\}) + h(S \setminus \{v\}) > h(S \setminus \{u,v\}) + h(S).$$

よって，$f(\{u\}) + f(\{v\}) < f(\{u,v\}) + f(\emptyset)$. したがって，$\boldsymbol{b}(\{u,v\}) = 0$. 一方，$\boldsymbol{\chi}_S(u) = \boldsymbol{\chi}_S(v) = 1$ だから，$\boldsymbol{\chi}_S(u) + \boldsymbol{\chi}_S(v) = 0$.

$u \notin S, v \in S$ のとき，

$$f(\{u\}) = h(S \cup \{u\}),$$
$$f(\{v\}) = h(S \setminus \{v\}),$$
$$f(\{u,v\}) = h((S \cup \{u\}) \setminus \{v\}),$$
$$f(\emptyset) = h(S).$$

$$((S \cup \{u\}) \setminus \{v\}) \cup S = S \cup \{u\},$$
$$((S \cup \{u\}) \setminus \{v\}) \cap S = S \setminus \{v\}$$

と h の劣モジュラ性より，

$$h(S \cup \{u\}) + h(S \setminus \{v\}) < h((S \cup \{u\}) \setminus \{v\}) + h(S).$$

よって，$f(\{u\}) + f(\{v\}) < f(\{u,v\}) + f(\emptyset)$. したがって，$\boldsymbol{b}(\{u,v\}) = 1$. 一方，$\boldsymbol{\chi}_S(u) = 0$, $\boldsymbol{\chi}_S(v) = 1$ だから，$\boldsymbol{\chi}_S(u) + \boldsymbol{\chi}_S(v) = 1$. □

補題 3.3. 関数 $g : 2^V \to \mathbb{R}$ を劣モジュラ関数とする．関数 $g^c : 2^V \to \mathbb{R}$ を，任意の X について $g^c(X) = g(X^c)$ と定義するとき，g^c は劣モジュラ関数である．

証明. 任意の $X, Y \subseteq V$ について，ド・モルガン則より，

$$g^c(X \cup Y) = g((X \cup Y)^c) = g(X^c \cap Y^c),$$
$$g^c(X \cap Y) = g((X \cap Y)^c) = g(X^c \cup Y^c).$$

g の劣モジュラ性より，

$$g(X^c) + g(Y^c) \geq g(X^c \cup Y^c) + g(X^c \cap Y^c).$$

よって，

$$g^c(X) + g^c(Y) \geq g^c(X \cap Y) + g^c(X \cup Y).$$

□

補題 3.4.

$$\operatorname{rank} B_n = n - 1.$$

証明. 帰納法により証明する．

$\operatorname{rank} B_2 = \operatorname{rank} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} = 1.$

$k-1\,(k > 2)$ のとき，$\operatorname{rank} B_{k-1} = k-2$ と仮定する．行列 B_k の定義より，

$$B_k = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ & & & \vdots & & \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ \mathbf{0} & & B_{k-1} & & & \end{pmatrix}.$$

行列の 1 行目を 2 行目から $k-1$ 行目へ加えると，

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ & & & \vdots & & \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ \mathbf{0} & & B_{k-1} & & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \mathbf{0} & & B_{k-1} & & \\ \mathbf{0} & & B_{k-1} & & \end{pmatrix}.$$

よって，$\operatorname{rank} B_k = \operatorname{rank} B_{k-1} + 1 = k - 1$. □

補題 3.2，3.3，3.4 より，次の定理を得る．この定理はアルゴリズム 1 の正しさを保障する．

定理 3.5. 集合 $S \subseteq V$ について，$h(X) = f(X \vartriangle S)$ が狭義劣モジュラ関数であるとき，かつ，そのときに限り $B_n \boldsymbol{\chi}_S = \boldsymbol{b}$ が成り立つ．

証明. 必要性は補題 3.2 による．

補題 3.4 より，方程式 $B_n \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解の自由度は 1 である．GF(2) 上での方程式を考えているので，方程式の解はちょうど 2 つになる．補題 3.2，3.3 より，$B_n \boldsymbol{\chi}_{S_0} = \boldsymbol{b}$，$B_n \boldsymbol{\chi}_{S_0^c} = \boldsymbol{b}$ が成り立つ．したがって，十分性が成り立つ． □

3.1 アルゴリズムの計算量の改善

アルゴリズム 1 では，n 変数の問題に対して $\binom{n}{2}$ 個の方程式を立てており，明らかに冗長である．この冗長さを回避する方法を考える．

集合関数 $f : 2^V \to \mathbb{R}$ に関する無向グラフ $G = (V, E)$ を定義する．辺集合 E は，

$$E = \left\{\{u,v\} \in \tbinom{V}{2} \mid f(\{u\}) + f(\{v\}) \neq f(\{u,v\}) + f(\emptyset)\right\}$$

とする．辺 $\{u,v\} \in E$ に対するラベルを $\boldsymbol{b}(\{u,v\})$ と定義する．ベクトル $\boldsymbol{b}$ は前の節で定義したベクトルである．

問題 3.1 は，定理 3.5 より，グラフ G とベクトル $\boldsymbol{b}$ に関する次の問題に置き換えることができる．

問題 3.6. グラフ $G = (V, E)$ 上の頂点を黒と白の二色に塗り分けよ．ただし，辺 $e \in E$ につい

て，$\boldsymbol{b}(e) = 0$ ならば e の両端点を同じ色で塗り，$\boldsymbol{b}(e) = 1$ ならば e の両端点を異なる色で塗る．

この問題において，G が連結であるとき，ある頂点 $v_0 \in V$ の色を決定すれば，残りの頂点の色が一意に定まる．

アルゴリズム 1 では，任意の二頂点間を結ぶ辺のラベルの値を求めていた．これを，グラフ G の全域木 $T = (V, E')$ について，E' に含まれる辺のラベルのみを求めるように変更する．この変更を行うと，立てる方程式の数が $n-1$ に改善される．

次に，問題 3.1 を解くためのアルゴリズムを用いて，問題 2.2 を解くことができるか検討する．入力として与えられる関数 f のグラフが連結であれば，問題の解が 2 つに定まり，問題 3.1 と同様のアルゴリズムで解くことができる．完全グラフ K_n から，辺を取り除く操作を考えると，$n-2$ 本まではどのように辺を除去しても連結性が保たれる．したがって，次の系が得られる．

系 3.7. 問題 2.2 において，$X \not\subseteq Y$，$Y \not\subseteq X$ と，$f(X) + f(Y) = f(X \cup Y) + f(X \cap Y)$ を満たす $X, Y \subseteq V$ の組の個数を k とする．$k \leq n-2$ のとき，問題 2.2 は問題 3.1 と同様の方法で解くことができる．

4 基準集合発見問題の計算困難さ

本節では，問題 2.2 を多項式回の関数値呼び出しのみで解くアルゴリズムが存在しないことを示す．証明では，次の関数 $\hat{g} : 2^V \to \mathbb{R}$ を用いる．

$$\hat{g}(X) = \begin{cases} -1 & (X = V), \\ 0 & (X \neq V). \end{cases}$$

補題 4.1. 関数 $\hat{g}$ は劣モジュラ関数である．

証明．集合 $X, Y \subseteq V$ について，$\hat{g}$ が劣モジュラ不等式が満たすことを示す．$X = V$ のとき，$Y \subseteq V$ であるから劣モジュラ不等式は等号で成り立つ．

$X \neq V$，$Y \neq V$ のとき，$\hat{g}$ の定義から，$\hat{g}(Y) = \hat{g}(X \cap Y)$ と $\hat{g}(X \cup Y) \leq \hat{g}(X \cap Y)$ が成り立つ．したがって，

$$\begin{aligned} \hat{g}(X) + \hat{g}(Y) &= \hat{g}(X) + \hat{g}(X \cap Y) \\ &\geq \hat{g}(X \cup Y) + \hat{g}(X \cap Y). \end{aligned}$$

よって，$\hat{g}$ は劣モジュラ関数である．□

補題 4.2. 関数 $f : 2^V \to \mathbb{R}$ を，集合 $S \subseteq V$ を用いて，$f(X) = \hat{g}(X \triangle S)$ と定義する．関数 f が劣モジュラ関数ならば，$S = \emptyset$ または $S = V$ である．

証明．$S = \emptyset$ のとき，任意の $X \subseteq V$ について $f(X) = \hat{g}(X)$ であり，f は劣モジュラ関数である．$S = V$ のとき，任意の $X \subseteq V$ について $f(X) = \hat{g}(V \setminus X)$ である．補題 3.3 より，f は劣モジュラ関数である．

$S \neq \emptyset$ かつ $S \neq V$ のとき，$X = S$，$Y = V \setminus S$ とする．

$$\begin{aligned} f(X) + f(Y) = \hat{g}(\emptyset) + \hat{g}(V) = -1, \\ f(X \cup Y) + f(X \cap Y) = \hat{g}(V \setminus S) + \hat{g}(\emptyset) = 0. \end{aligned}$$

したがって，$f(X) + f(Y) < f(X \cup Y) + f(X \cap Y)$ であり，f は劣モジュラ関数ではない．□

補題 4.3. 関数 $f : 2^V \to \mathbb{R}$ を，集合 $S \subseteq V$ を用いて，$f(X) = \hat{g}(X \triangle S)$ と定義する．関数 f の基準集合は S と S^c のみである．

証明．補題 4.2 より f の基準集合 T は，$S \triangle T = \emptyset$ と $S \triangle T = V$ のどちらかを満たさなくてはならない．前者を満たす集合は S のみであり，後者を満たす集合は S^c のみである．□

定理 4.4. 問題 2.2 を多項式回の関数値呼び出しのみで解くアルゴリズムは存在しない．

証明．多項式回の関数値呼び出しで解くアルゴリズム AL が存在すると仮定する．すなわち，ある正の定数 c と d，n_0 が存在し，$n \geq n_0$ を満たす任意の n について，AL は高々 cn^d 回の関数値呼び出しで基準集合を発見できる．

集合 $S \subseteq V$ との対称差によって $\hat{g}$ を変数変換した関数を $\hat{g}_S$ で表す．$\hat{g}$ を変数変換した関数すべての集合を $\Phi = \{\hat{g}_S \mid S \subseteq V\}$ とする．

$\hat{g}_S \in \Phi$ の関数値オラクルが与えられたとき，AL が行う関数値呼び出しの回数を $\ell(S)$ とする．AL が評価した関数値の列を $\sigma_S = a_1 a_2 \ldots a_{\ell(S)}$ とする．AL の定義から，σ_S はすべて 0 の列か，0 とただ 1 つの -1 からなる列である．AL が行う関数値呼び出しの回数は高々 cn^d 回なので，$\ell(S) \leq cn^d$ である．よって，AL が出力することができる解は高々 $\sum_{k=0}^{cn^d}(k+1) = (cn^d+2)(cn^d+1)/2$ 通りしか存在しない．

一方，補題 4.3 より，AL が出力するべき解は 2^{n-1} 通り存在するため矛盾する． □

5 まとめ

本稿では，劣モジュラ関数に対する変数変換を定義し，変数変換後の関数から変換前の関数を求める問題について考察を行った．問題を狭義劣モジュラ関数に限定した問題を解くアルゴリズムを提案した．さらに，問題を多項式回の関数値呼び出しのみで解くアルゴリズムが存在しないことを示した．

今後の課題は，多項式回の関数値呼び出しのみで解くことのできる関数のクラスを決定することである．

参考文献

[1] S. Fujishige, Submodular Functions and Optimization (Second Edition), Elsevier, 2005.
[2] S. Iwata and J.B. Orlin, A simple combinatorial algorithm for submodular function minimization, Proceedings of the Twentieth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms, pp.1230–1237, 2009.
[3] 室田 一雄, 離散凸解析, 共立出版株式会社, 2001.