

不変性の普遍性と不変性

首都大学東京 室田 一雄

最適化の分野には、美しい定理とアルゴリズムがたくさんある。個々の定理やアルゴリズムを勉強することは、もちろん大切であるが、それらの意義を別の立場から整理して理解することも重要である。「不変性」とは「本質的なものは、変数の選び方や並べ方などの恣意的なものに影響されない (されてはいけない)」ことを意味し、物理学などでは周知の考え方である。最適化においても、モデル化、アルゴリズム設計、理論構築など、いろいろな側面で「不変性」に着目すると面白い。不変性を尊重することの意義、不変性を敢えて破ることの効用などを考える。

不変性 (モデル や 計算過程 の 客観性)

物事の本質は記述の仕方に依らない

||

許容変換の下で不変なものが本質的

普遍性 何処でも通用する

不変性 時間とともに変化しない

内容目次

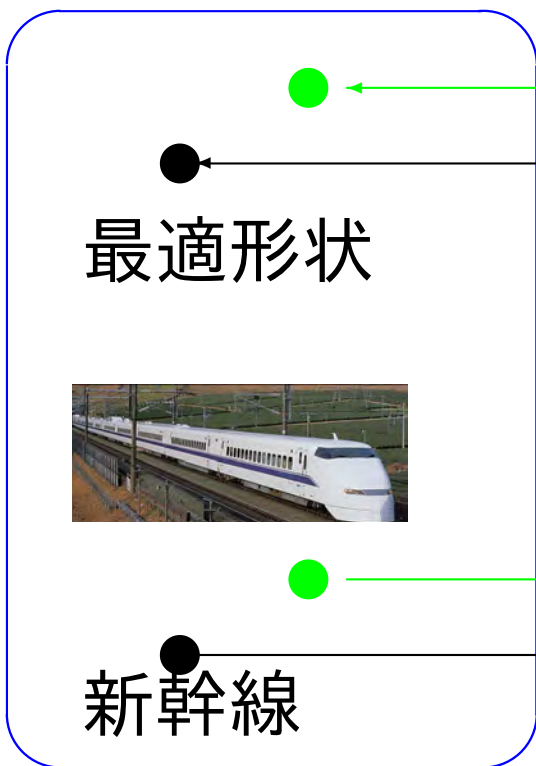
1. 客観性 と不変性 記述の恣意性, 奥義と定石
2. 計算過程 の不変性 **Newton**法,**Gauss**消去法, 共役勾配法
3. 離散近似 の不変性 調和関数の離散近似, 代用電荷法
4. 対称性 系の対称性と挙動の対称性
5. 混合行列 と不変性 階層分解, 許容変換, 階数公式
6. 離散凸関数 と不変性 単模変換

客観性と不変性

現象と数理

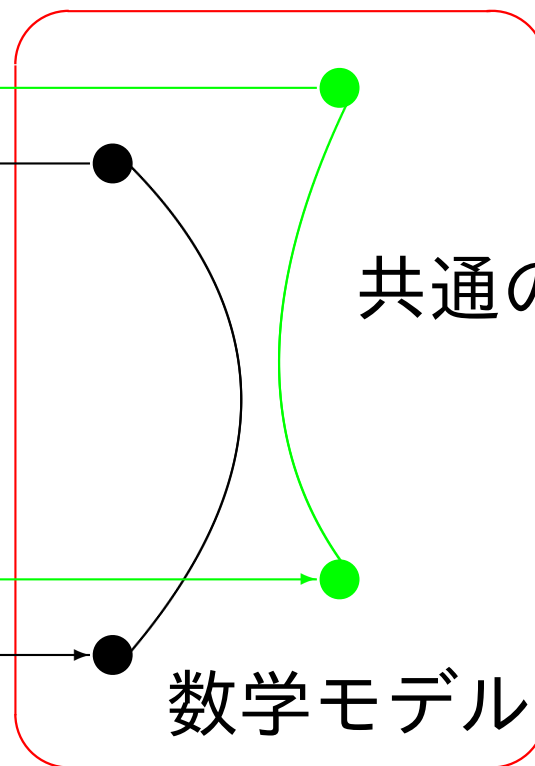
物（もの）

現象・現実



理（こと）

数理・論理

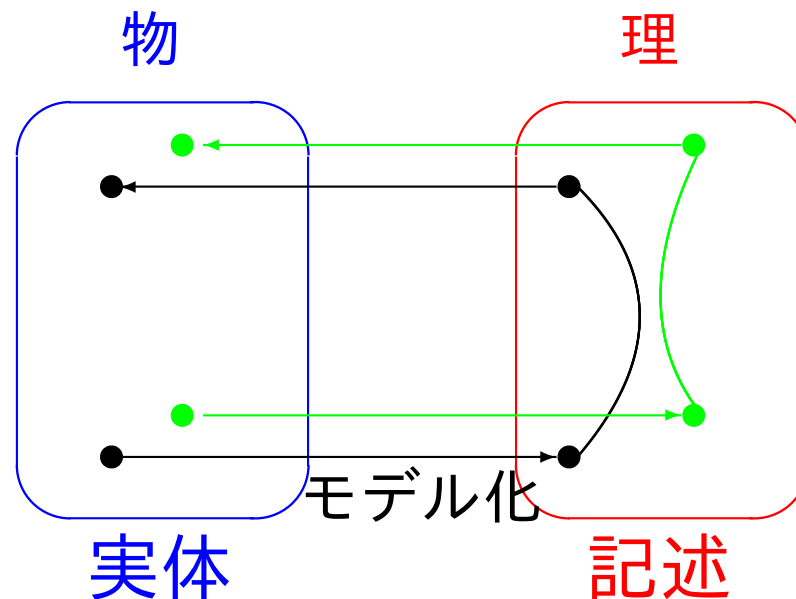


モデル化

共通の論理
計算

記述の恣意性

||
任意性
⇕
客観性



実体の本質は記述の仕方に依らない

||

許容変換の下で不変なものが本質的

⇒ 許容される変換は？（これが要点）

行列の変換と不変量

A: 行列

(S:正則)

- SA のランク = A のランク
- $S^{-1}AS$ の固有値 = A の固有値

A: 対称行列

- $Q^T A Q$ の固有値 = A の固有値 (Q:直交)
- $S^T A S$ の固有値の符号 = A の固有値の符号

行列 = システムの記述, 変換 = 記述の恣意性,
不変量 = システムの性質

どの概念が意味をもつか, は 線形代数の外の話

物理学（力学）と不変性

古典論	ガリレイ変換	$x' = x - vt$
相対論	ローレンツ変換	$\ x\ ^2 - c^2t^2$
量子論	ゲージ変換	$\psi', A'_\mu = \dots$

1. 指導原理（公理，美意識）：

支配方程式は不変な形式をもつべし

2. 客観性：物理量（=実体）は不変量

理論を学ぶ／理論を作る

理論を学ぶ = 定義 + 定理 + 応用

理論を作る = 奥義 + 定石 + 事実

[精神] [技術] [博識]

不変性, 共変性, 対称性

invariance, covariance, symmetry

計算過程 の 不変性

反復法 の 不変性

$$[Sx =: y] \quad (S: \text{正則行列})$$

$$\min_x f(x) \qquad \min_y g(y) = f(S^{-1}y)$$

$$x_0 \ x_1 \ x_2 \ \cdots \qquad y_0 \ y_1 \ y_2 \ \cdots$$

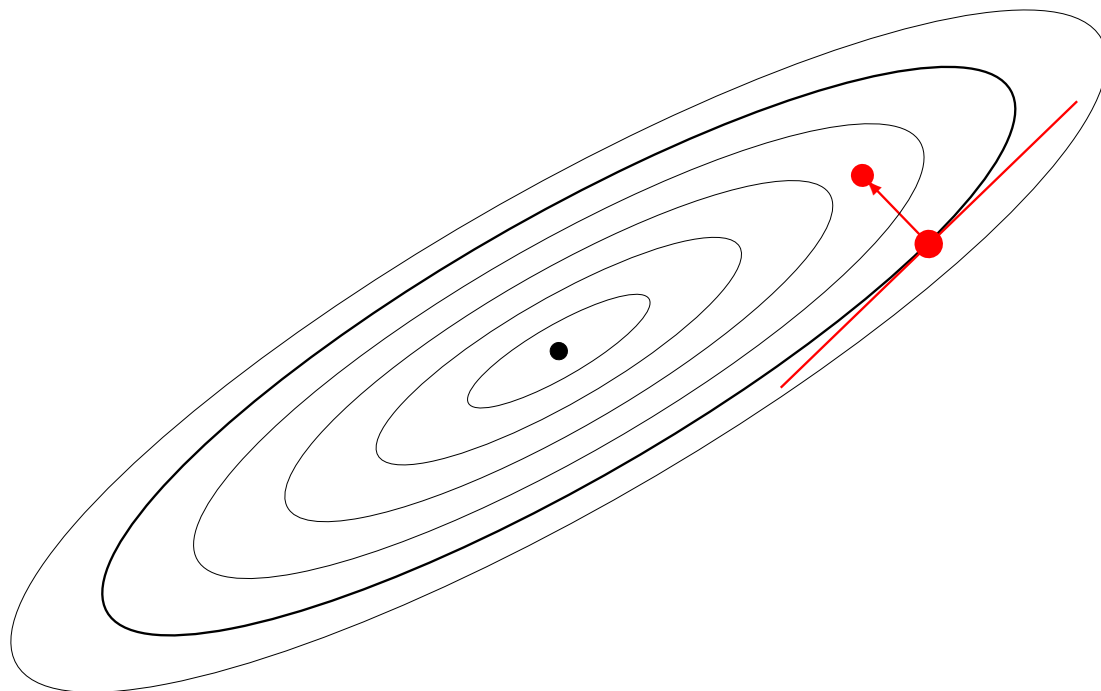
不変性とは : $Sx_0 = y_0 \Rightarrow Sx_k = y_k$

不変だと何が嬉しいのか？

不変でないとなんが困るのか？

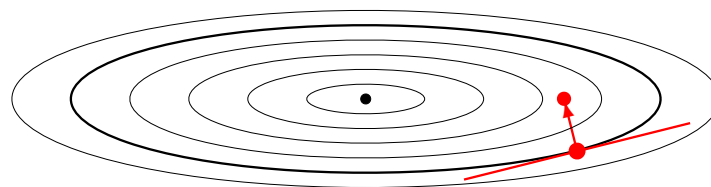
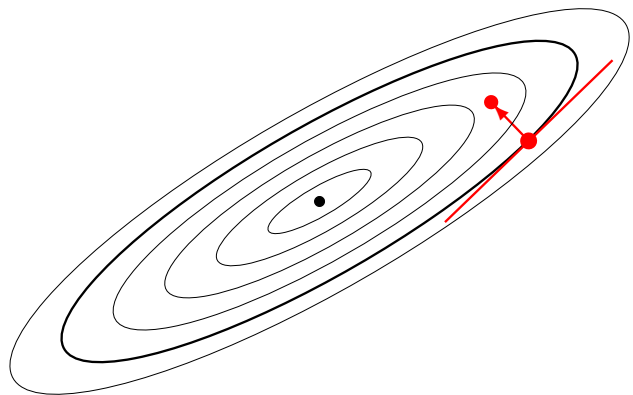
- 最急降下法は 不変性をもたない
- **Newton**法は 不変性をもつ
- $f \rightarrow af$ の変換に対する不変性も考えられる

最急降下法

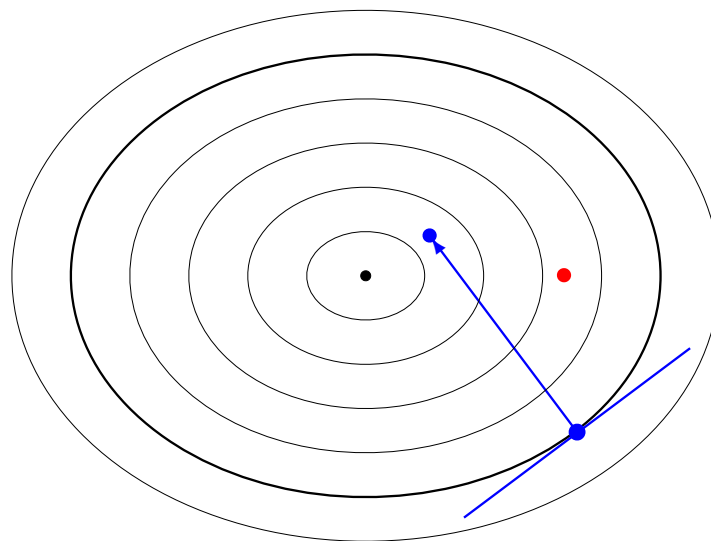


最急降下法 は 不変性をもたない

座標軸の回転



座標軸の伸縮



最急降下法 は 不変性をもたない

$f(x)$ に対する最急降下法 :

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k)$$

[勾配]

$y = Sx$, $g(y) = f(x)$ に対する最急降下法 :

$$y_{k+1} = y_k - \alpha \nabla g(y_k)$$

不変?: $y_0 = Sx_0 \Rightarrow? y_k = Sx_k$

両者の関係 : $g(y) = f(S^{-1}y)$, $\nabla g(y) = S^{-\top} \nabla f(x)$

$$\Rightarrow y_{k+1} - y_k = S^{-\top} (x_{k+1} - x_k) \quad (\text{不変でない})$$

- S が直交行列なら $S^{-\top} = S$ なので, 不変である

Newton法 は 不変性をもつ

$f(x)$ に対する Newton法 :

$$x_{k+1} = x_k - H(f; x_k)^{-1} \nabla f(x_k)$$

[ヘッセ行列] [勾配]

$y = Sx$, $g(y) = f(x)$ に対する Newton法 :

$$y_{k+1} = y_k - H(g; y_k)^{-1} \nabla g(y_k)$$

不変性をもつ : $y_0 = Sx_0 \Rightarrow y_k = Sx_k$

証明 : $g(y) = f(S^{-1}y)$, $\nabla g(y) = S^{-\top} \nabla f(x)$,

$$H(g; y) = S^{-\top} H(f; x) S^{-1}$$

$$\Rightarrow H(g; y)^{-1} \nabla g(y) = S H(f; x)^{-1} \nabla f(x)$$

$$\Rightarrow y_{k+1} - y_k = S(x_{k+1} - x_k)$$

Gaussの消去法 と 不変性

連立方程式 $Ax = b$

⇒ **Gauss**の消去法：

変数と方程式を **任意の順番** に消去していく

$$Ux = L^{-1}b, \quad x = U^{-1}L^{-1}b$$

- 最終結果 x は 選んだ順番に依らない
- 途中結果 U は 依存する

計算結果の不変性 vs **計算過程の不変性**

適切な順序 ⇒ 効率

共役勾配法 (CG法) $Ax = b$ (対称)

初期値 x_0 をとる; $r_0 := b - Ax_0$; $p_0 := r_0$;

for $k := 0, 1, \dots$ **until** $r_k = 0$ **do**

begin

$$\alpha_k := \frac{(r_k, p_k)}{(p_k, Ap_k)};$$

$$x_{k+1} := x_k + \alpha_k p_k; \quad r_{k+1} := r_k - \alpha_k Ap_k;$$

$$\beta_k := -\frac{(r_{k+1}, Ap_k)}{(p_k, Ap_k)};$$

$$p_{k+1} := r_{k+1} + \beta_k p_k$$

end

CG法は不変性をもつか

$$Ax = b$$

[×] 対称行列 $A_{\lambda\kappa}$

$$A^T = A$$

[◎] 計量 $G_{\lambda\kappa}$ に関する自己随伴行列 $A^{\kappa\lambda}$

$$G^T = G, \quad (GA)^T = GA$$

幾何学的不変性 をもつ計算過程

- 収束特性は A の固有値で決まる
- 数値実験で A を対角行列としてよい
- 前処理の自由度

共役勾配法の テンソル表記

$$r := b - Ax$$

$$r^\kappa := b^\kappa - A^\kappa_\lambda x^\lambda$$

$$p := r$$

$$p^\kappa := r^\kappa$$

$$\alpha := \frac{(r, p)_G}{(p, Ap)_G}$$

$$\alpha := \frac{r^\lambda G_{\lambda\kappa} p^\kappa}{p^\lambda G_{\lambda\kappa} A^\kappa_\mu p^\mu}$$

$$x := x + \alpha p$$

$$r := r - \alpha Ap$$

$$\beta := -\frac{(r, Ap)_G}{(p, Ap)_G}$$

$$p := r + \beta p$$

A : 混合テンソル

G : 2階共変テンソル

x, p, b, r : 反変ベクトル

α, β : スカラー

⇒ 杉原, 室田: 線形計算の数理, 岩波, 2009

離散近似 の 不変性

2次元のLaplace方程式

2次元領域 Ω , Laplace方程式 (Dirichlet問題)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} = 0 \quad (x \in \Omega), \quad u(x) = f(x) \quad (x \in \partial\Omega)$$

Laplace方程式は不変性をもつ

- 座標スケール $x \rightarrow \alpha x \Rightarrow u(x) \rightarrow u(\alpha x)$
- 境界条件 $f(x) \rightarrow f(x) + c \Rightarrow u(x) \rightarrow u(x) + c$

近似スキームも不変性をもつか

$\Delta u = 0$ を満たす関数を調和関数という $\left(\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right)$

調和関数の近似（代用電荷法）

- $a \notin \Omega$ のとき, $h(x; a) = \log \|x - a\|$ は Ω 上の調和関数
- 「電荷点」 $y_j \notin \Omega$ ($j = 1, 2, \dots, n$) を適当に選んで,

$$u(x) = \sum_{j=1}^n Q_j \log \|x - y_j\|$$

と近似し, 係数 Q_j を選点法や最小 2 乗法で定める (代用電荷法)

- 不変性をもたない

変数 $x \rightarrow \alpha x, y_j \rightarrow \alpha y_j$

$\Rightarrow \log \|\alpha x - \alpha y_j\| = \log |\alpha| + \log \|x - y_j\|$ だから

$u(x) \rightarrow u(\alpha x) + (\log |\alpha|) \sum Q_j$ (余分な項)

関数 $f \rightarrow f + c \Rightarrow u \not\rightarrow u + c$

代用電荷法：不変スキーム

$$u(x) = Q_0 + \sum_{j=1}^n Q_j \log \|x - y_j\|, \quad \sum_{j=1}^n Q_j = 0$$

の形を設定する

- 不変性をもつ

変数 $x \rightarrow \alpha x, y_j \rightarrow \alpha y_j$

$$\Rightarrow \log \|\alpha x - \alpha y_j\| = \log |\alpha| + \log \|x - y_j\| \text{ だから}$$

$$u(x) \rightarrow u(\alpha x) + (\log |\alpha|) \sum Q_j = u(x)$$

関数 $f \rightarrow f + c \Rightarrow Q_0 \rightarrow Q_0 + c, Q_j \rightarrow Q_j (j \geq 1)$

$$\Rightarrow u \rightarrow u + c$$

- 解析も綺麗になる

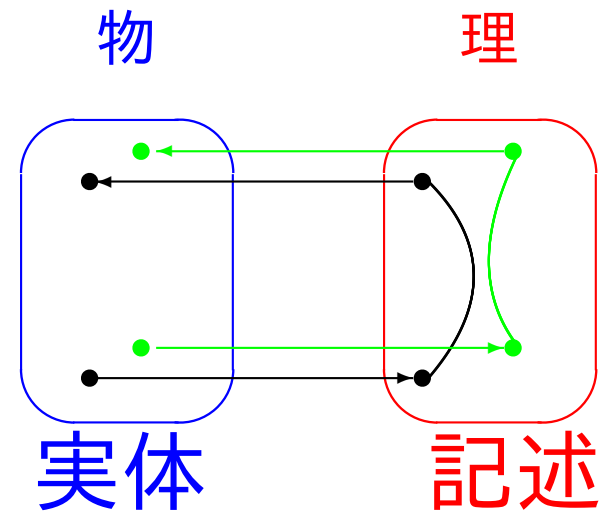
(室田：代用電荷法におけるスキームの「不変性」について, 1993)

对称性

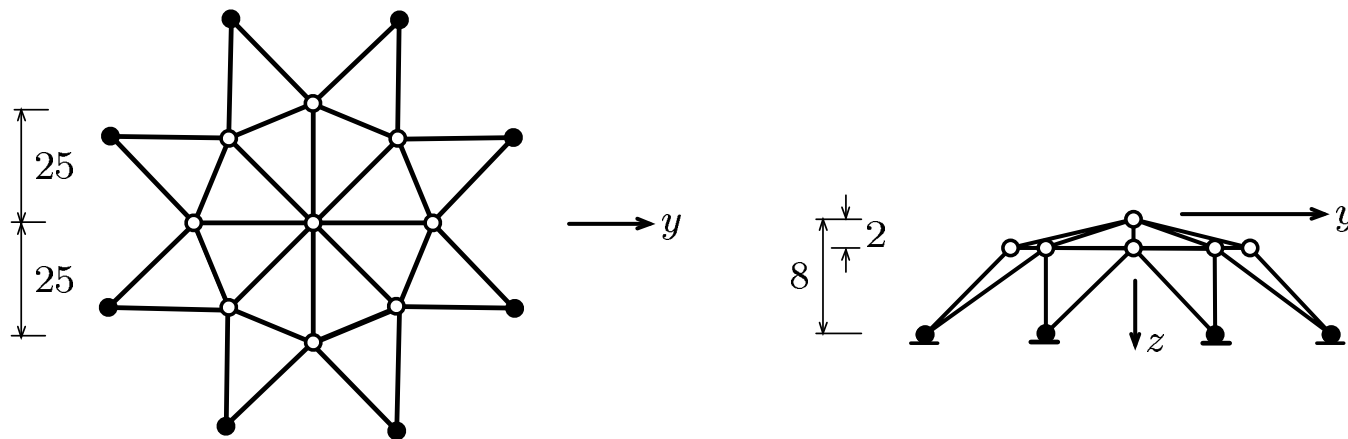
対称性 (symmetry)

対称操作に関する

不変性 $Tx = x$



対称なトラス構造 (T : 45度回転, 鏡映)



因数分解と対称性

(T : 変数の置換)

対称式 の因子は 対称式

$$\begin{aligned}x^3 + y^3 + z^3 \\= (x + y + z)(x^2 + y^2 + z^2 - xy - yz - zx)\end{aligned}$$

各因子は 対称とは限らない

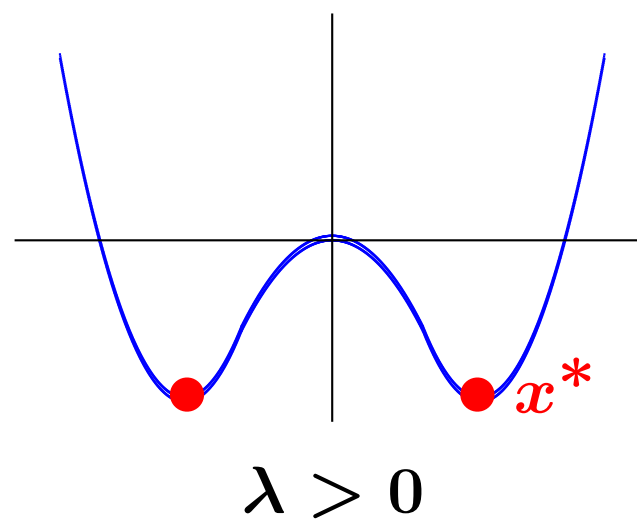
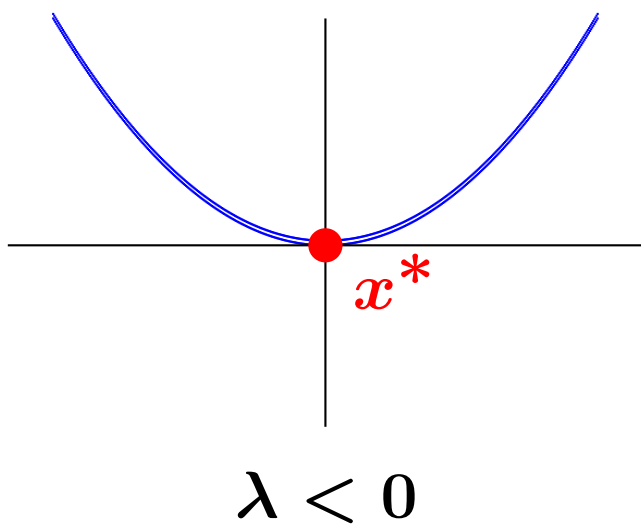
$$\begin{aligned}xy^2 + yz^2 + zx^2 + yx^2 + zy^2 + xz^2 + 2xyz \\= (x + y)(y + z)(z + x)\end{aligned}$$

- 全体としては対称 (\Rightarrow ガロア理論)

系(方程式)の対称性と挙動(解)の対称性

偶関数 $f(x) = x^4 - \lambda x^2$ の最小点

変換 $T(x) = -x$ $f(Tx) = f(x)$ $Tx^* = x^*$ か?



- 対称な問題の最適解は対称に限らない
- 凸計画問題なら対称最適解が存在

対称な凸計画問題は 対称な最適解 をもつ

Min. $f(x)$ 対称な凸関数: $f(Tx) = f(x)$

証明

1つの最適解 x に対称操作を施して 平均する :

$$x_1 = T_1 x, \quad x_2 = T_2 x, \quad \dots \Rightarrow \bar{x} = (x_1 + x_2 + \dots) / N$$

● \bar{x} は対称 ($T_i \bar{x} = \bar{x}$)

● \bar{x} は最適解 f の対称性 $\Rightarrow f(x_i) = f(x)$

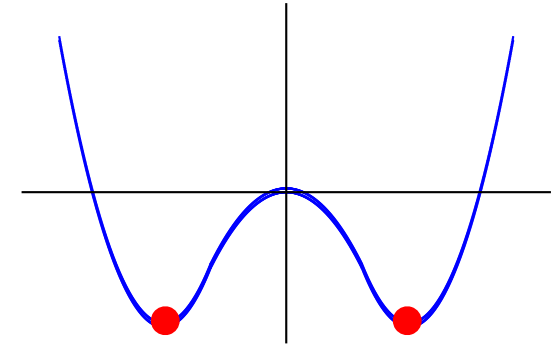
$$f \text{ の凸性 } \Rightarrow f(\bar{x}) \leq [f(x_1) + f(x_2) + \dots] / N = f(x)$$

SDP の内点法は 対称性を保存 ?

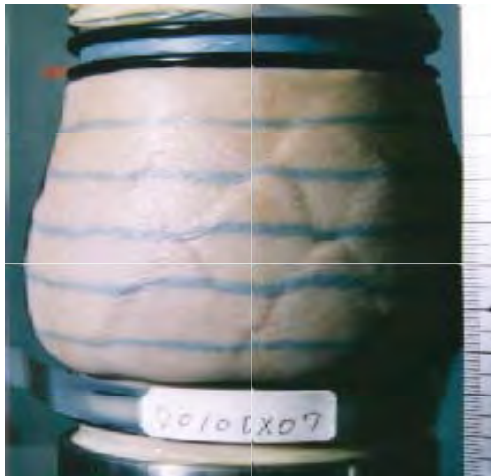
SDP の内点法で 対称性を利用 ?

解の非対称性＝パターン形成

⇒ 群論的分岐理論



砂の円柱供試体のパターン



ダイヤモンドパターン



ストライプパターン



エシェロンモード

⇒ Ikeda, Murota: Imperfection Bifurcation in Structures
Materials, Springer, 2002; 3rd. ed., 2019

混合行列 と 不変性

Dulmage–Mendelsohn 分解：階層構造の抽出

与えられた行列 $A =$

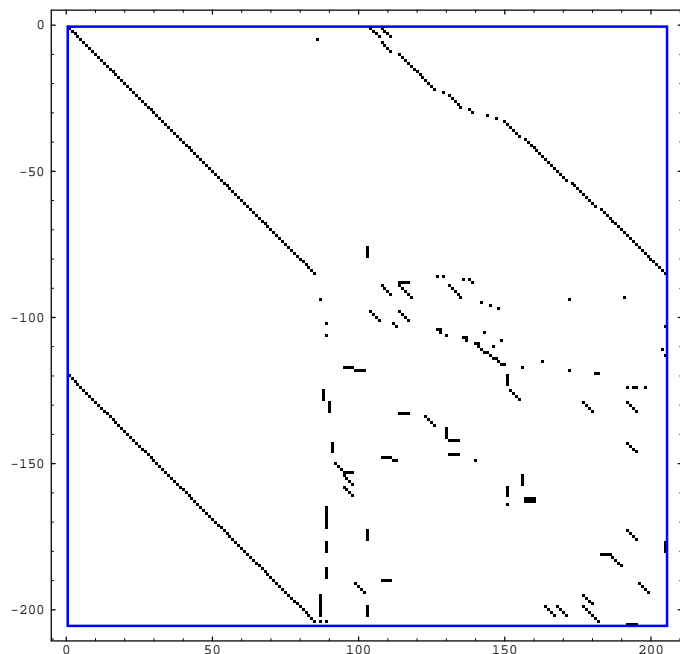
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
e_1	0	1	0	1	2	0	0
e_2	0	0	2	1	0	5	0
e_3	0	0	0	4	0	0	1
e_4	1	0	0	1	0	0	0
e_5	3	1	0	0	1	1	0
e_6	0	0	0	3	0	0	1
e_7	0	0	1	0	0	3	6

$$\bar{A} = P_r A P_c$$

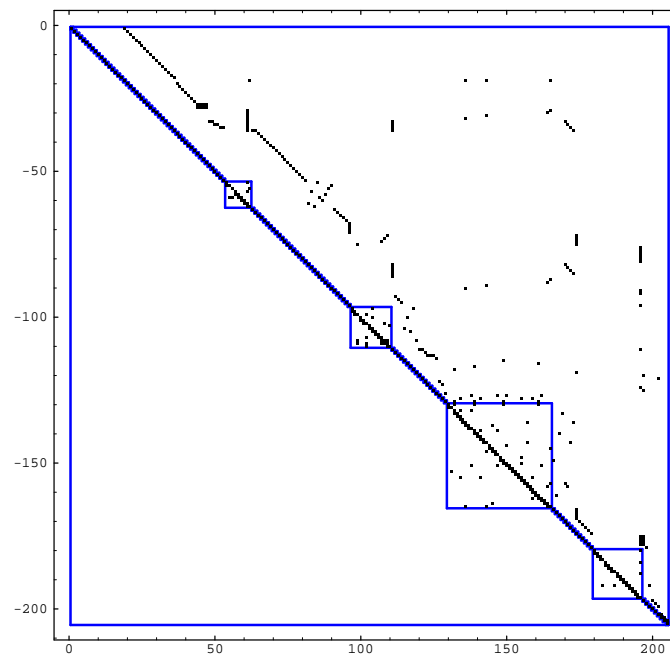
並べ替えた行列 $\bar{A} =$

	x_2	x_5	x_1	x_3	x_6	x_4	x_7
e_1	1	2	0	0	0	1	0
e_5	1	1	3	0	1	0	0
e_4			1	0	0	1	0
e_2				2	5	1	0
e_7				1	3	0	6
e_3						4	1
e_6						3	1

DM分解：化学工学の例題 $n = 205$

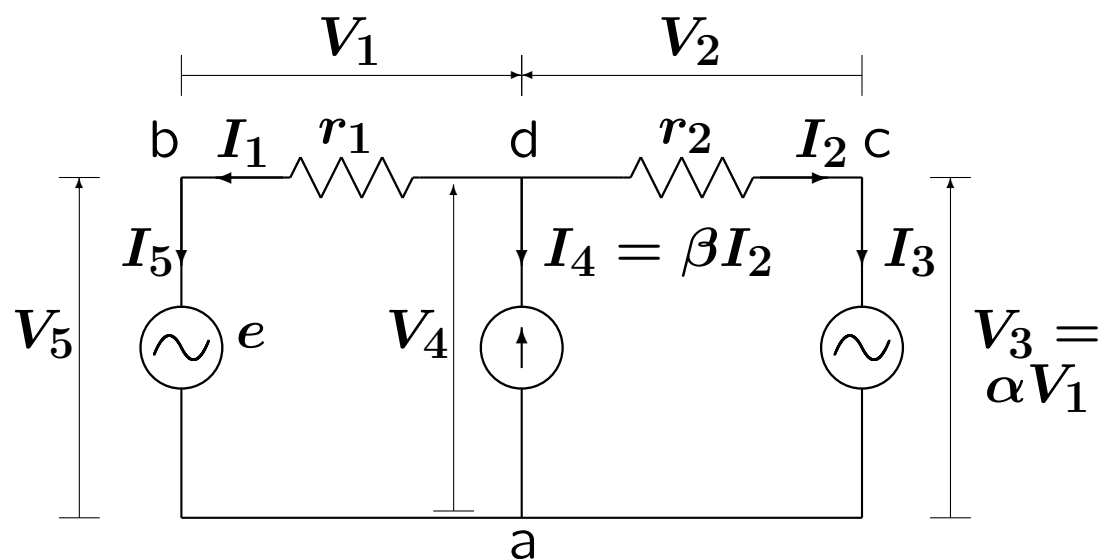


与えられた行列



並べ替えた行列

電気回路の記述



電流保存則 (a, b, c) :

$$I_3 + I_4 + I_5 = 0, \quad I_1 - I_5 = 0, \quad I_2 - I_3 = 0$$

電圧保存則: $V_1 - V_4 + V_5 = 0, \quad V_2 + V_3 - V_4 = 0$

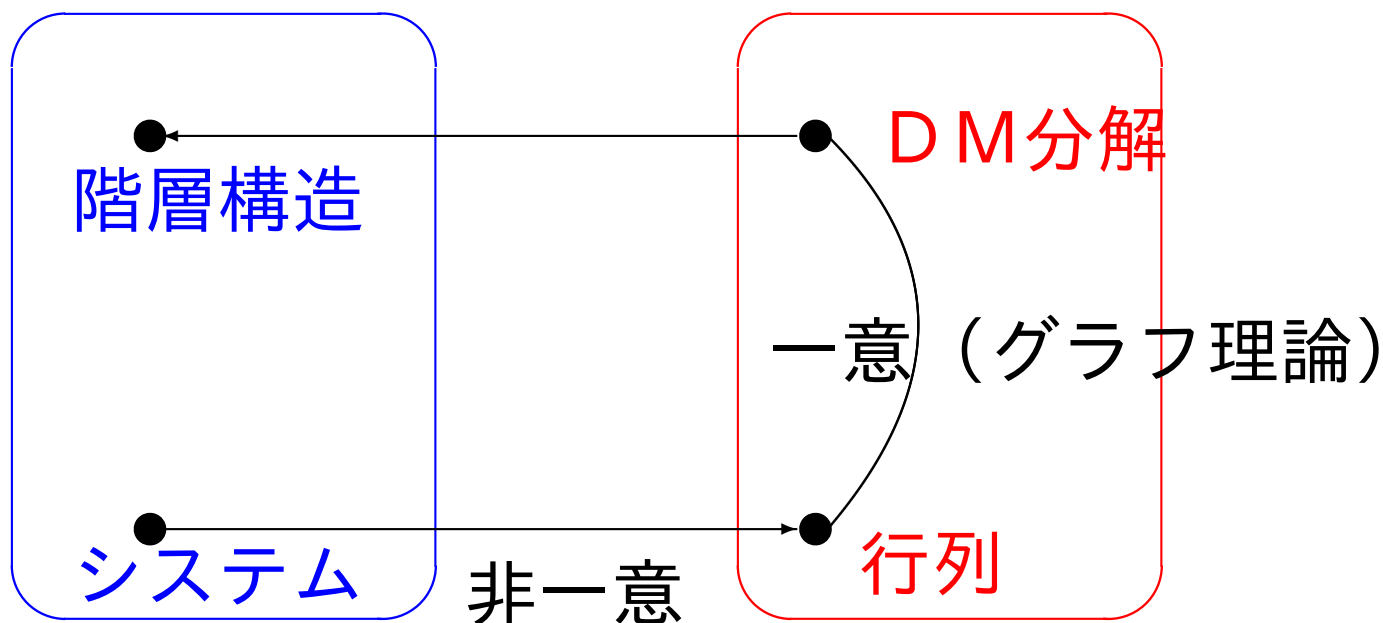
素子特性: $V_1 = r_1 I_1, \quad V_2 = r_2 I_2, \quad I_4 = \beta I_2$

$$V_5 = -e, \quad V_3 = \alpha V_1$$

⇒ 保存則の記述は非一意

素子特性の記述は一意

DM分解の一意性と恣意性



本質は記述の仕方に依らない

DMは記述の仕方に依存する

⇒ この階層構造は 物理的に意味があるか？

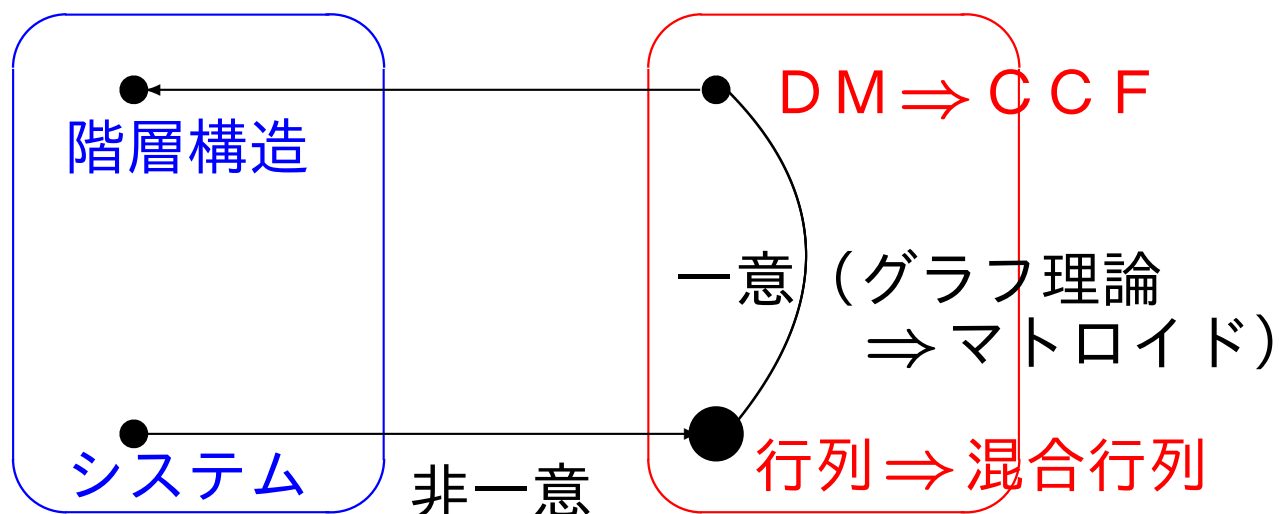
DMを超えて：混合行列と許容変換

$$\bar{A} = P_r \begin{bmatrix} S & O \\ O & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ T \end{bmatrix} P_c$$

Q : 保存則の係数
 T : 構成則の係数

記述の非一意性を 許容変換で吸収

⇒ **CCF** (Combinatorial Canonical Form)



Combinatorial Canonical Form of LM-matrix

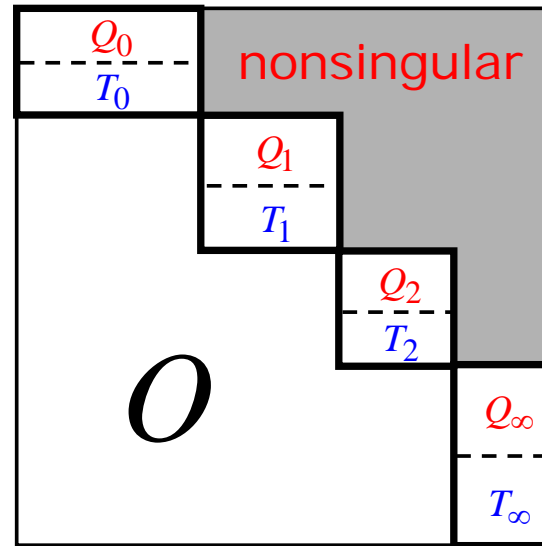
Admissible transformation

$$\begin{array}{c}
 \boxed{P_r} \quad \boxed{\begin{array}{c|c} s & O \\ \hline O & I \end{array}} \quad \boxed{\begin{array}{c} Q \\ \hline T \end{array}} \quad \boxed{P_c} = \\
 \text{permut.} \quad \text{nonsingular (constant) } \in K \quad \text{permut.}
 \end{array}$$

horizontal tail
row-full rank

Combinatorial Canonical Form (CCF)

- Uniquely determined
- Efficiently computed



vertical tail
column-full rank

階数公式と許容変換—CCFの構成法

- 階数公式 :

$$\text{rank} \begin{bmatrix} Q \\ T \end{bmatrix} = \min\{\text{劣モ関数 } f(X) : X \subseteq \text{列番号 } C\}$$

- 分解原理 : 劣モジュラ関数の Jordan-Hölder 型定理 (伊理)

	合併マトロイド型	独立マッチング型
$f(X)$	$\rho(X) + \tau(X) + C \setminus X $	$\rho(X) + \gamma(X) + C \setminus X $
変換	$P_r \begin{bmatrix} S & O \\ O & S_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ T \end{bmatrix} P_c$	$P_r \begin{bmatrix} S & O \\ O & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ T \end{bmatrix} P_c$

$$\rho(X) = \text{rank } Q[X], \quad \gamma(X) = T[X] \text{ の非零行数}$$

$$\tau(X) = \text{rank } T[X] = \text{term-rank } T[X]$$

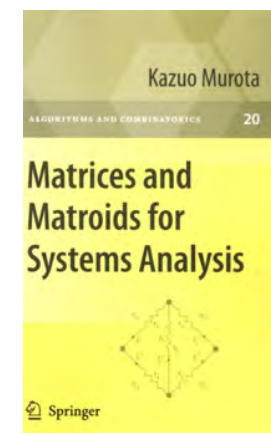
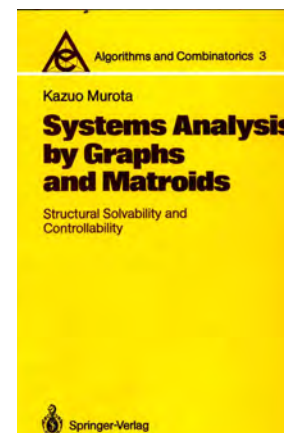
$$= \min\{\gamma(Y) + |X \setminus Y|\} \quad (\text{Hall-Ore の定理})$$

混合行列 の 参考文献

- 混合行列の話, 「数理工学への誘い」,
日本評論社, 139–149, 2002
- 離散システムの不変な階層構造を求めて—グラフ
からマトロイドへ, 応用数理, 1, 30–48, 1991
- マトロイドとシステム解析「離散構造とアルゴリズムI」
(藤重悟 編), 近代科学社, 第2章, 57–109, 1992



- **Systems Analysis by Graphs
and Matroids, Springer, 1987**
- **Matrices and Matroids for
Systems Analysis, Springer,
2000**



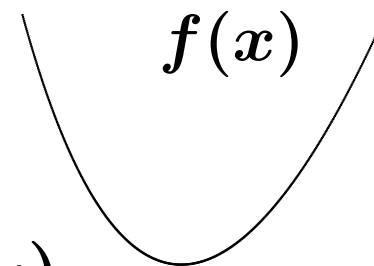
離散凸関数 と 不変性

座標変換と凸性

連続変数 $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

$\Rightarrow x = Sy$ (S :正則) $g(y) = f(Sy)$

$f(x)$: 凸関数 $\iff g(y)$: 凸関数



離散変数 $f : \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{R}$

$\Rightarrow x = Sy$ (S :単模) $g(y) = f(Sy)$

● 単模行列：整数行列で行列式 = ± 1

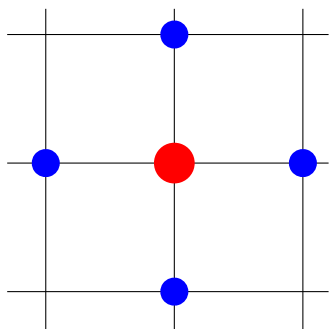
● 単模行列により \mathbb{Z}^n は \mathbb{Z}^n に移る

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$f(x)$: 離散凸関数 $\stackrel{?}{\iff} g(y)$: 離散凸関数

局所的最適 \iff 大域的最適

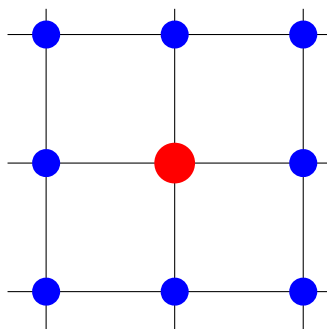
分離凸



$$2n + 1$$

$$\{\pm e_1, \dots, \pm e_n\}$$

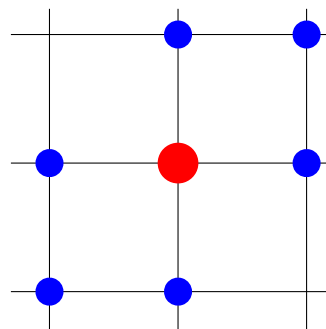
整凸



$$3^n$$

$$\{\chi_X - \chi_Y\}$$

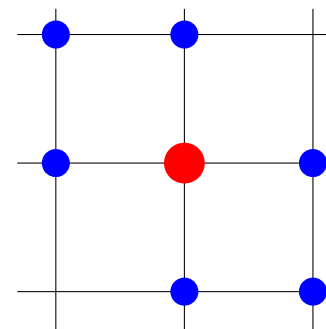
L^1 凸



$$2^{n+1} - 1$$

$$\{\pm \chi_X\}$$

M^1 凸



$$n(n + 1) + 1$$

$$\{e_i - e_j\}$$

局所 = 近傍の立方体

\Rightarrow 「局所」を保存する変換は $\text{diag}(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$

離散凸関数の許容変換

関数族

許容変換 S

置換行列 および

L凸関数

$\pm \text{diag}(1, 1, 1)$

M凸関数 (基多面体)

$\pm \text{diag}(1, 1, 1)$

M凸関数 (ジャンプ)

$\text{diag}(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$

整凸関数

$\text{diag}(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$

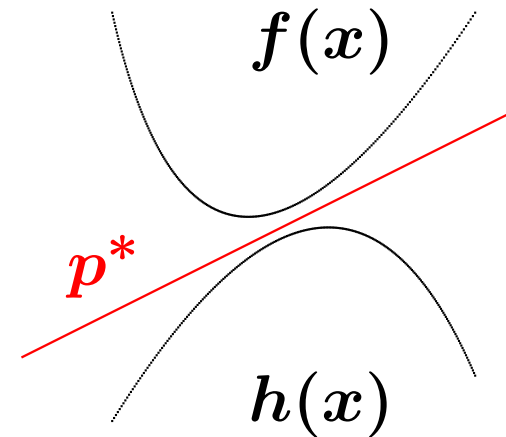
凸拡張可能関数

任意の単模行列

離散分離定理

$f : Z^n \rightarrow Z$ “凸関数”

$h : Z^n \rightarrow Z$ “凹関数”



$f(x) \geq h(x) \quad (\forall x) \Rightarrow \exists \alpha^* \in Z, \exists p^* \in Z^n :$

$$f(x) \geq \alpha^* + \langle p^*, x \rangle \geq h(x) \quad (x \in Z^n)$$

離散分離定理は 任意の単模変換でOK

$$x = Sy, \quad p^* = S^{-\top} q^*$$

$$\Rightarrow q^* \in Z^n \quad \langle p^*, x \rangle = \langle q^*, y \rangle$$

マルチモジユラ関数 と L^1 凸関数

単模行列

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad D^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

変数変換 $f(Dp) = g(p), \quad f(x) = g(D^{-1}x)$

定理 f : マルチモジユラ $\iff g$: L^1 凸

\Rightarrow マルチモジユラ関数に対して離散分離定理が成立

離散凸解析 の 参考書

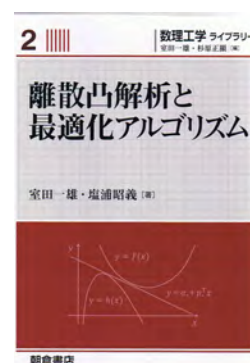
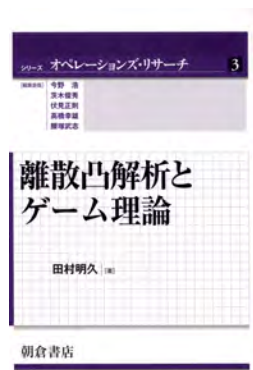
2001: 室田, 離散凸解析, 共立出版

2007: 室田, 離散凸解析の考えかた, 共立出版

2009: 田村, 離散凸解析とゲーム理論, 朝倉書店

2013: 室田, 塩浦, 離散凸解析と最適化アルゴリズム, 朝倉

2015: 穴井, 斉藤, 今日から使える! 組合せ最適化, 講談社



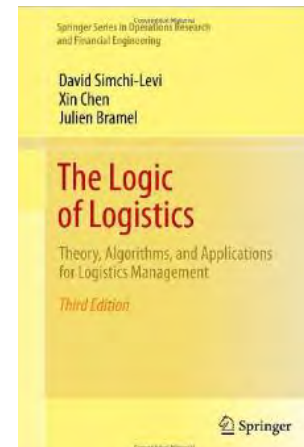
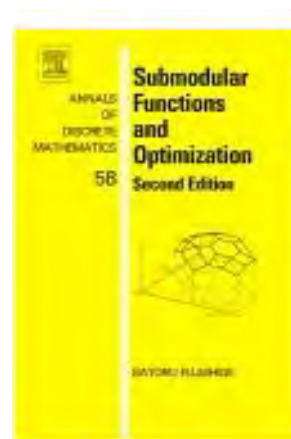
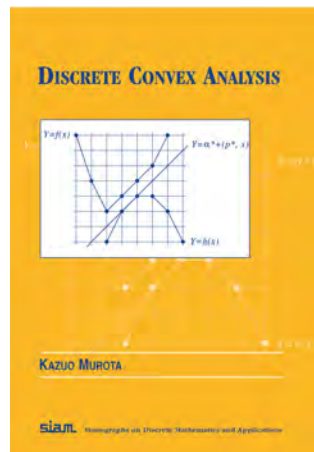
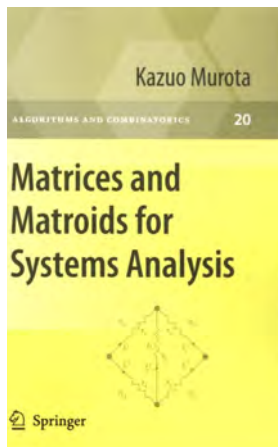
Books (discrete convex analysis)

2000: Murota, **Matrices and Matroids for Systems Analysis**, Springer

2003: Murota, **Discrete Convex Analysis**, SIAM

2005: Fujishige, **Submodular Functions and Optimization**, 2nd ed., Elsevier

2014: Simchi-Levi, Chen, Bramel, **The Logic of Logistics**, 3rd ed., Springer



内容目次（復習）

1. 客観性 と不変性 記述の恣意性, 奥義と定石
2. 計算過程 の不変性 **Newton**法,**Gauss**消去法, 共役勾配法
3. 離散近似 の不変性 調和関数の離散近似, 代用電荷法
4. 対称性 系の対称性と挙動の対称性
5. 混合行列 と不変性 階層分解, 許容変換, 階数公式
6. 離散凸関数 と不変性 単模変換

E N D