グラフ上の離散凸関数とその応用

平井広志
東京大学情報理工学研究科
SIG-FPAI 2014, 1/30-31, 函館

本研究は、総合科学技術会議により制度設計された最先端研究開発支援プログラム（FIRST合原最先端数理モデルプロジェクト）により、日本学術振興会を通して助成されたものです。

自己紹介

- 平井広志
- 東京大学情報理工学系研究科 講師
- 専門：離散数学，離散最適化理論

  離散距離空間，多品種フロー，離散凸解析，
  劣モジュラ最適化，施設配置問題，
  ネットワークデザイン,…

最近，機械学習や画像処理の分野で
劣モジュラ性・離散凸性に基づく手法
の研究が盛んである

Bach, Bilmes, Krause, Kawahara, Nagano, Kolmogorov, …

本発表の目的：

- 応用上重要と私が思う
  劣モジュラ最適化・離散凸解析の基礎
- 今後，重要になるかもしれない
  方向性 + 私の研究の紹介

内容

1. 劣モジュラ関数とは
2. 画像処理への応用：グラフカット
3. 劣モジュラ関数の仲間たち
4. Valued CSP
5. グラフ上の離散凸関数

劣モジュラ関数

V :有限集合

2^V : V の部分集合全体のなす集合

$f : 2^V \to \mathbf{R}$ が劣モジュラ $\Leftrightarrow$

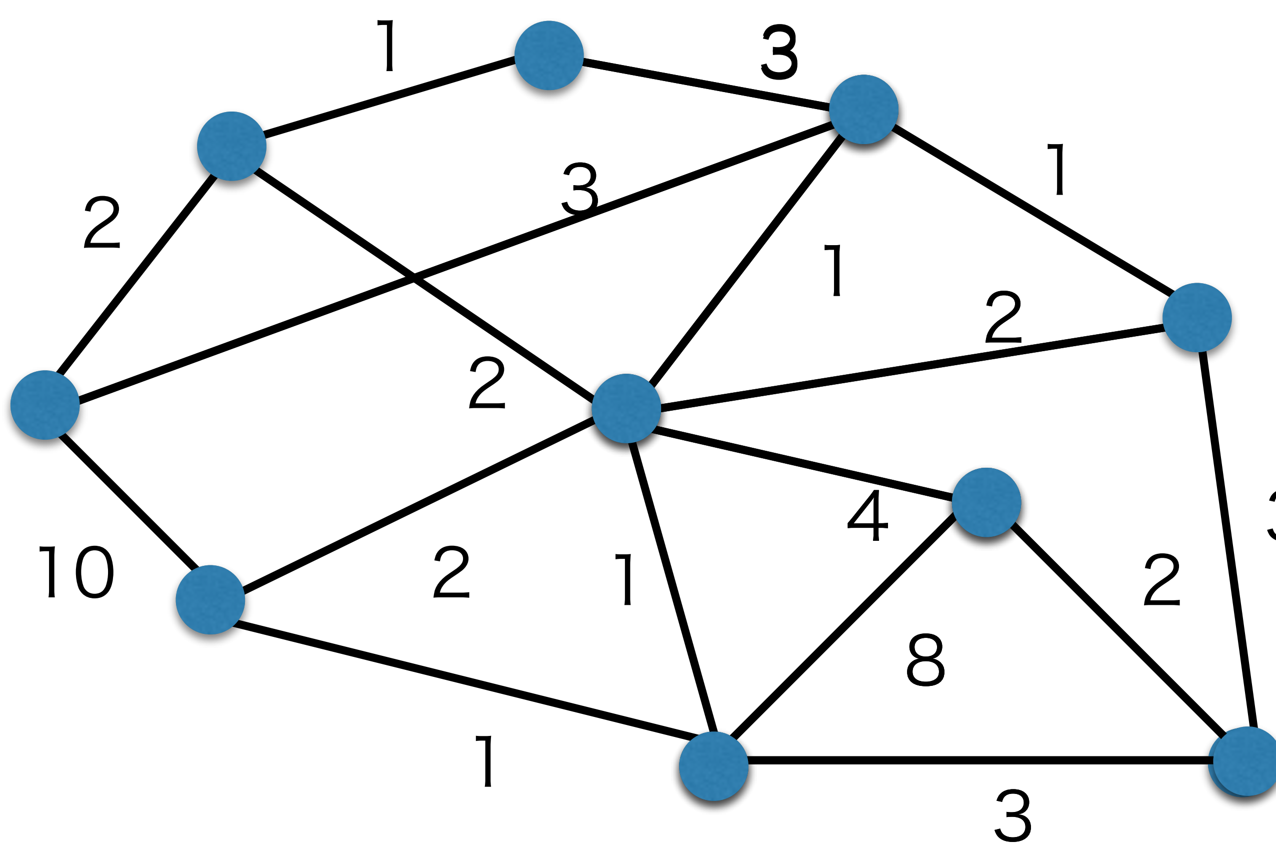
$$f(X) + f(Y) \geq f(X \cup Y) + f(X \cap Y)$$

$$(X, Y \subseteq V)$$

カット関数は劣モジュラ

$G = (V, E)$　　c：枝容量

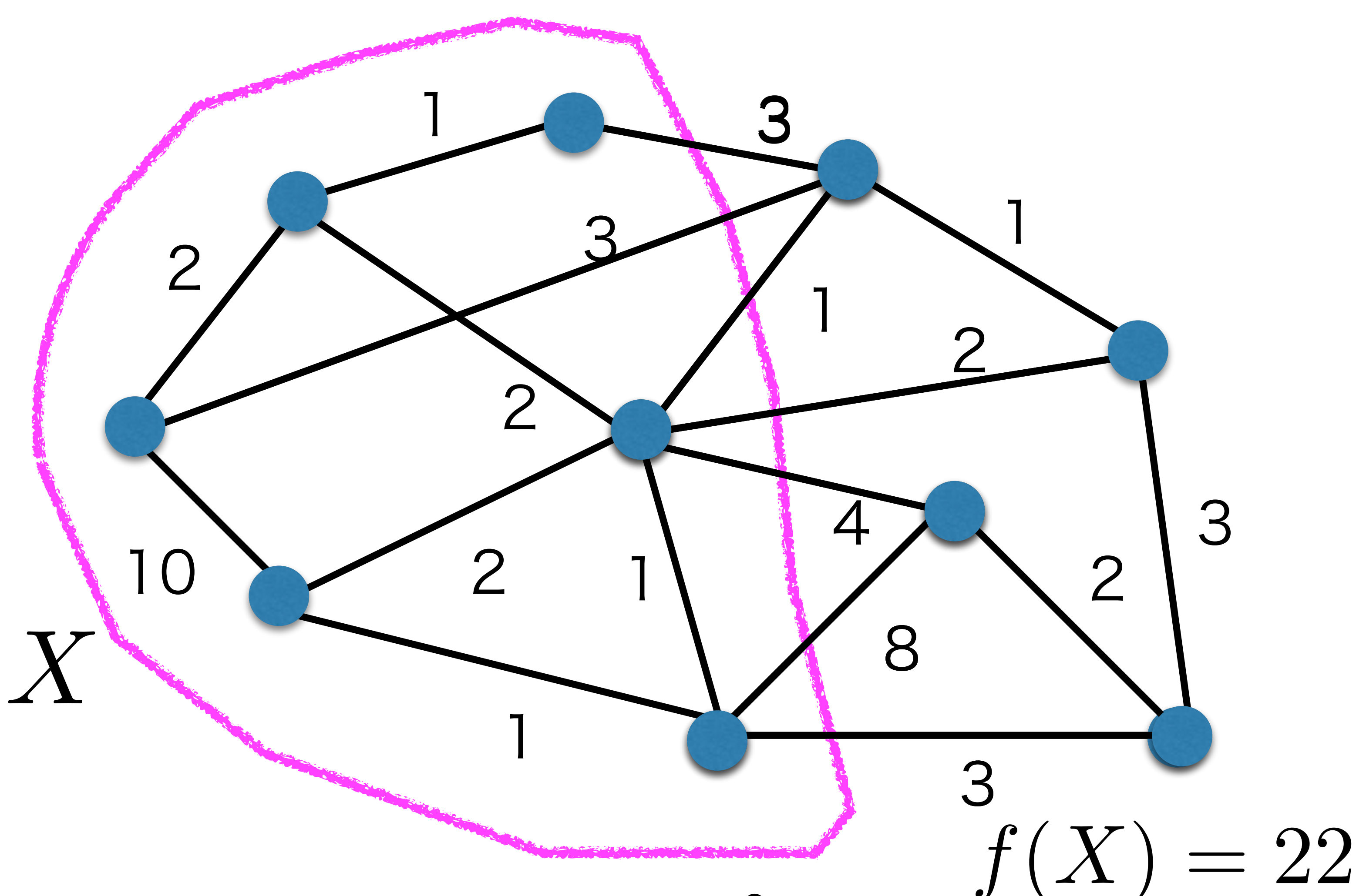
$f(X) :=$　X から出る枝の容量の総和



カット関数は劣モジュラ

$G = (V, E)$　　c : 枝容量

$f(X) :=$ X から出る枝の容量の総和

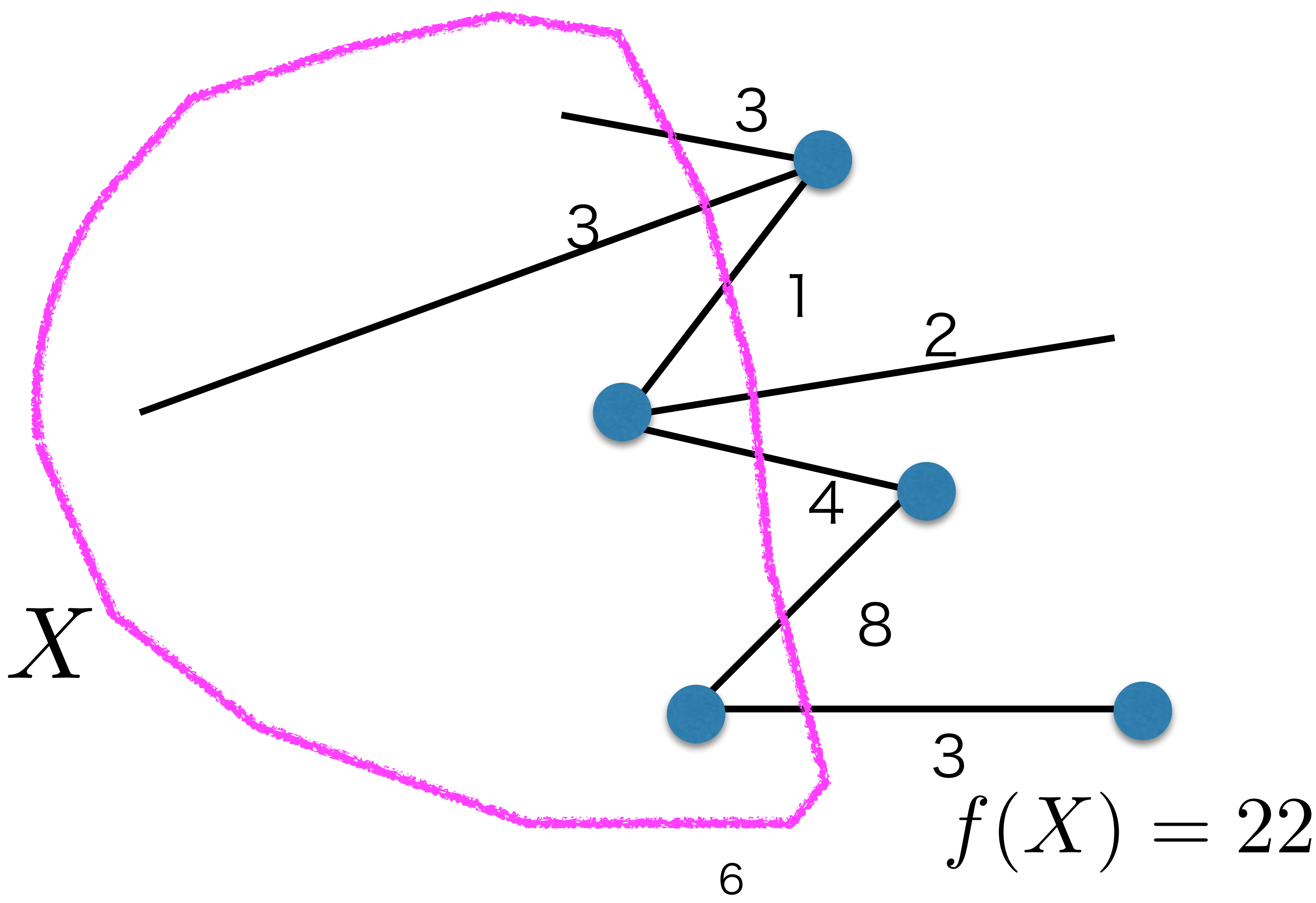


6

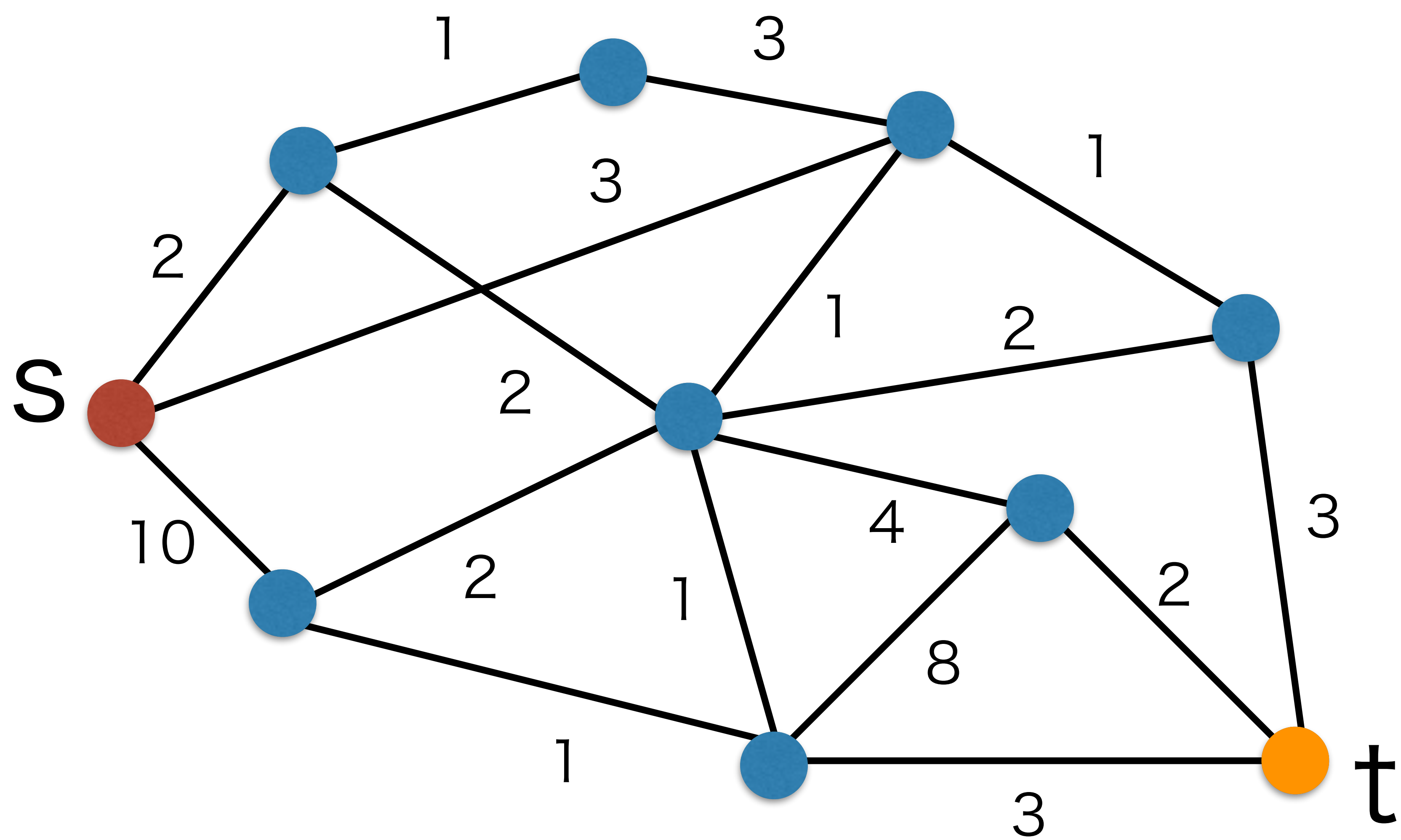
カット関数は劣モジュラ

$G = (V, E)$　　c : 枝容量

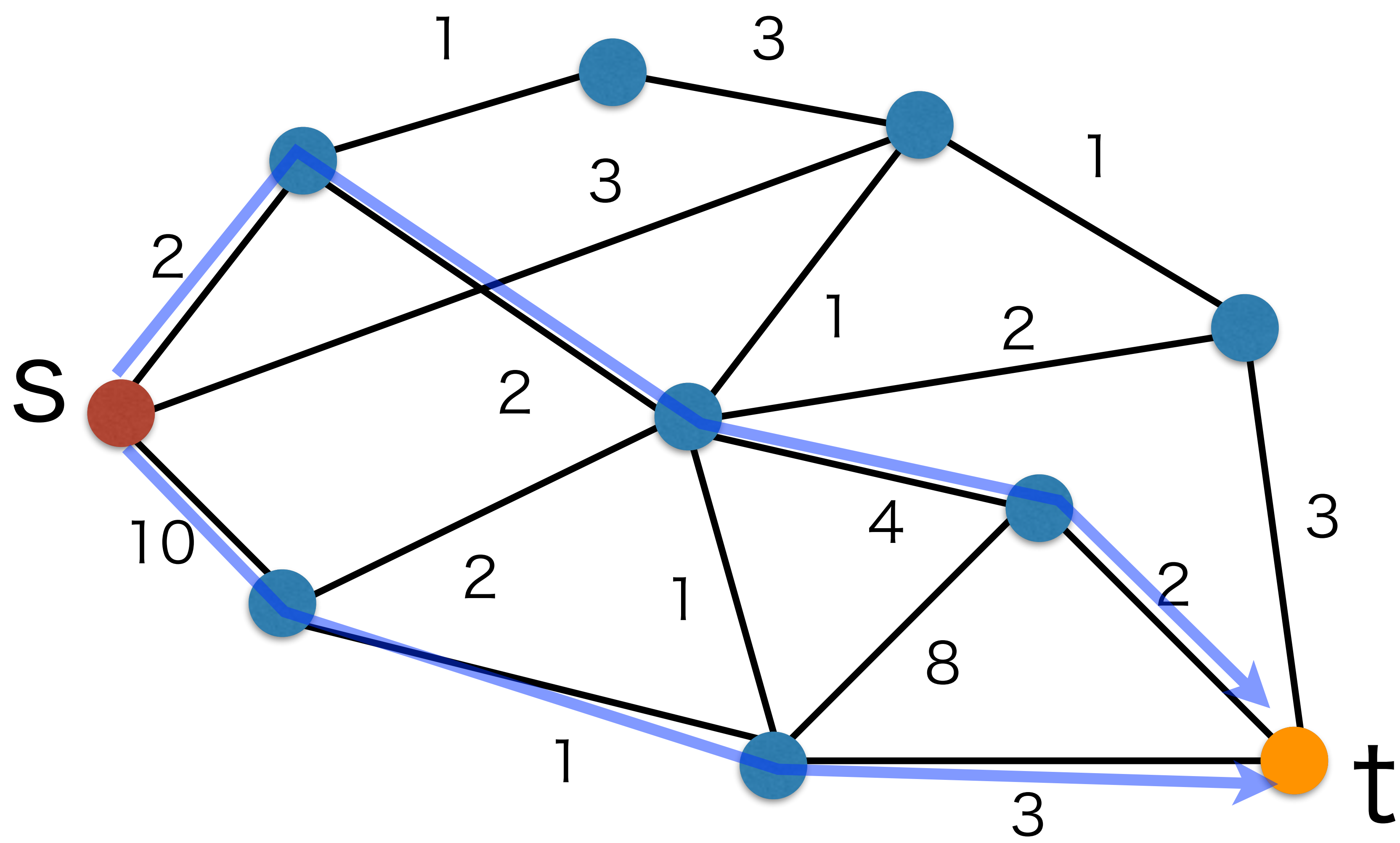
$f(X) :=$ X から出る枝の容量の総和



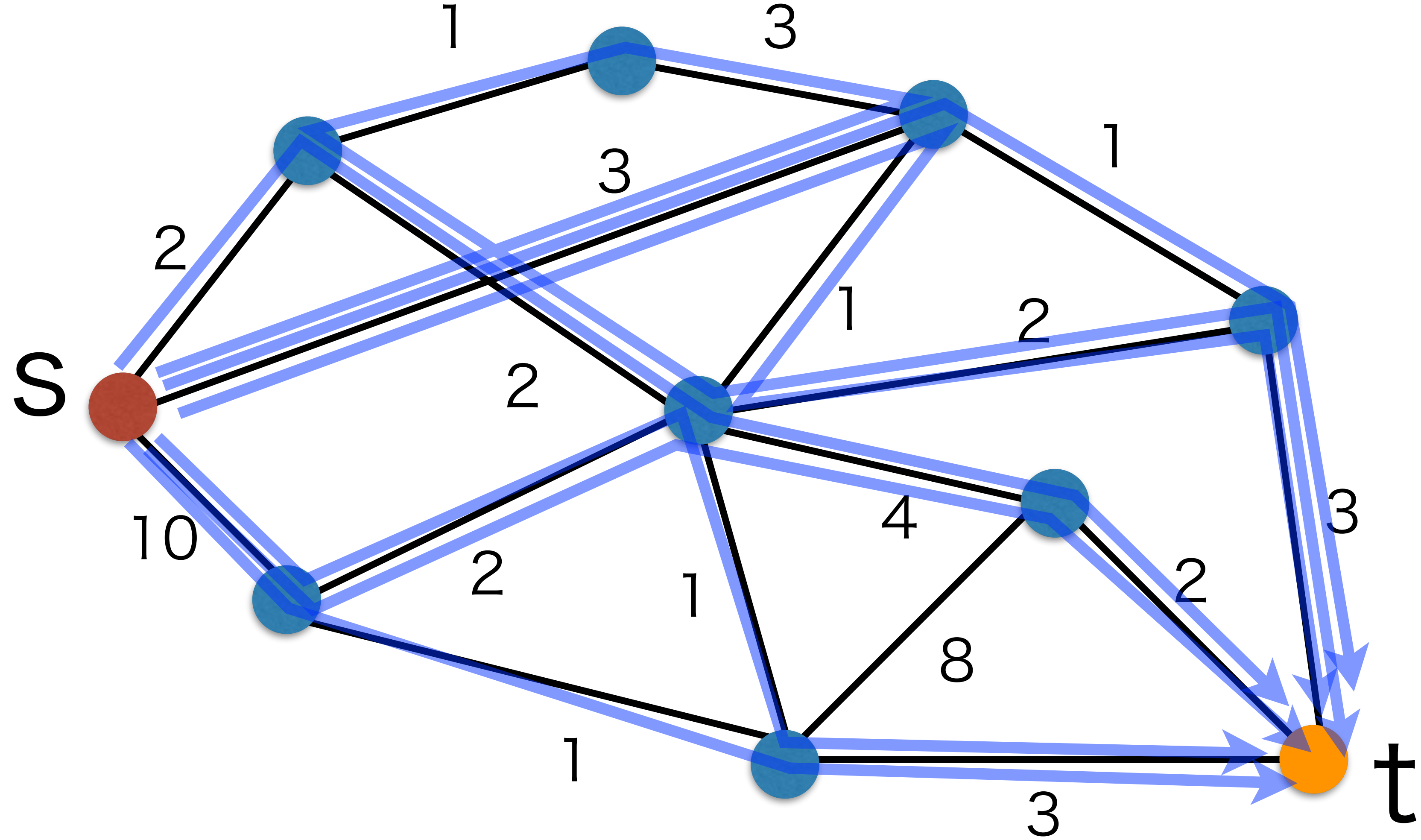
最大フロー問題



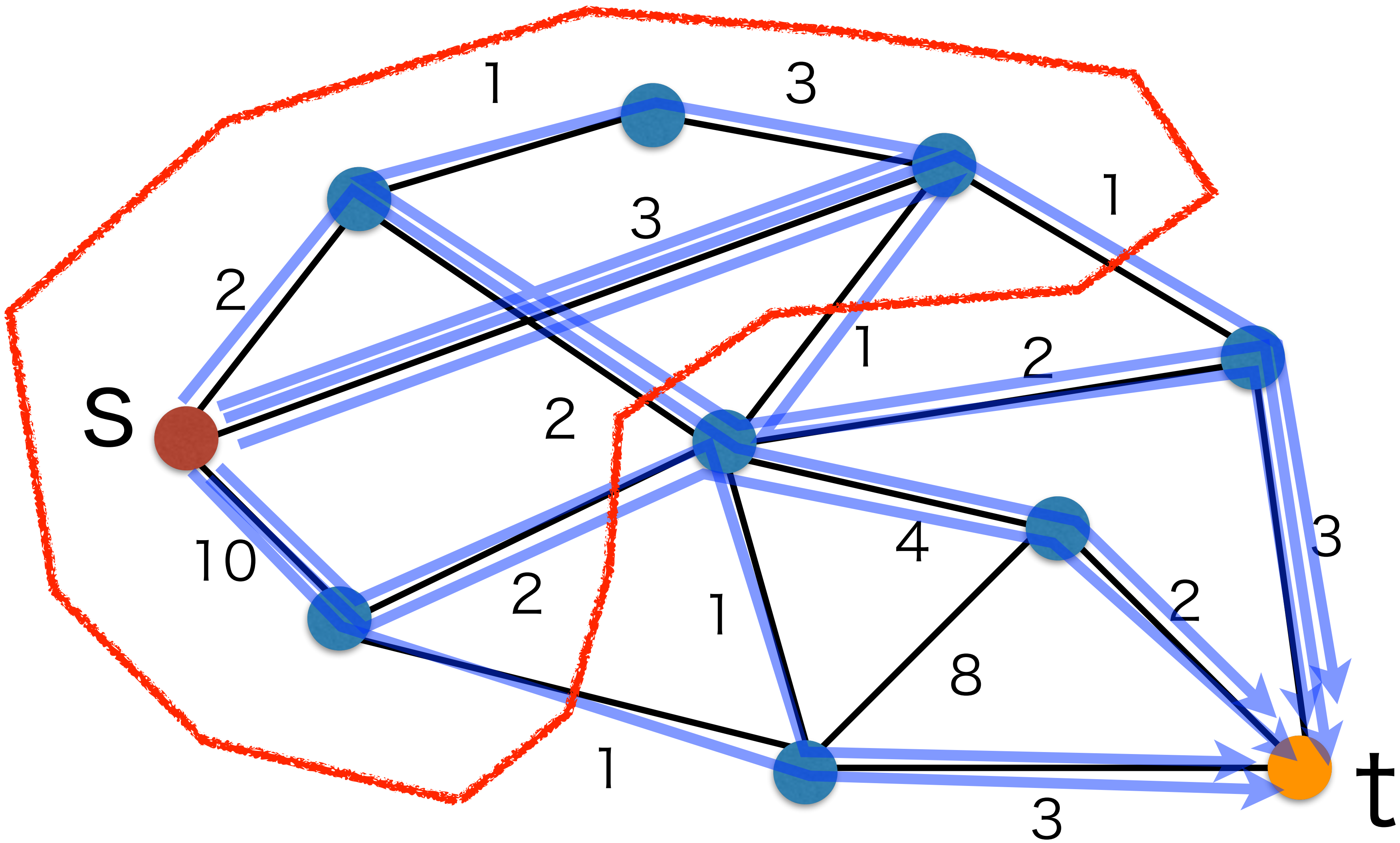
最大フロー問題



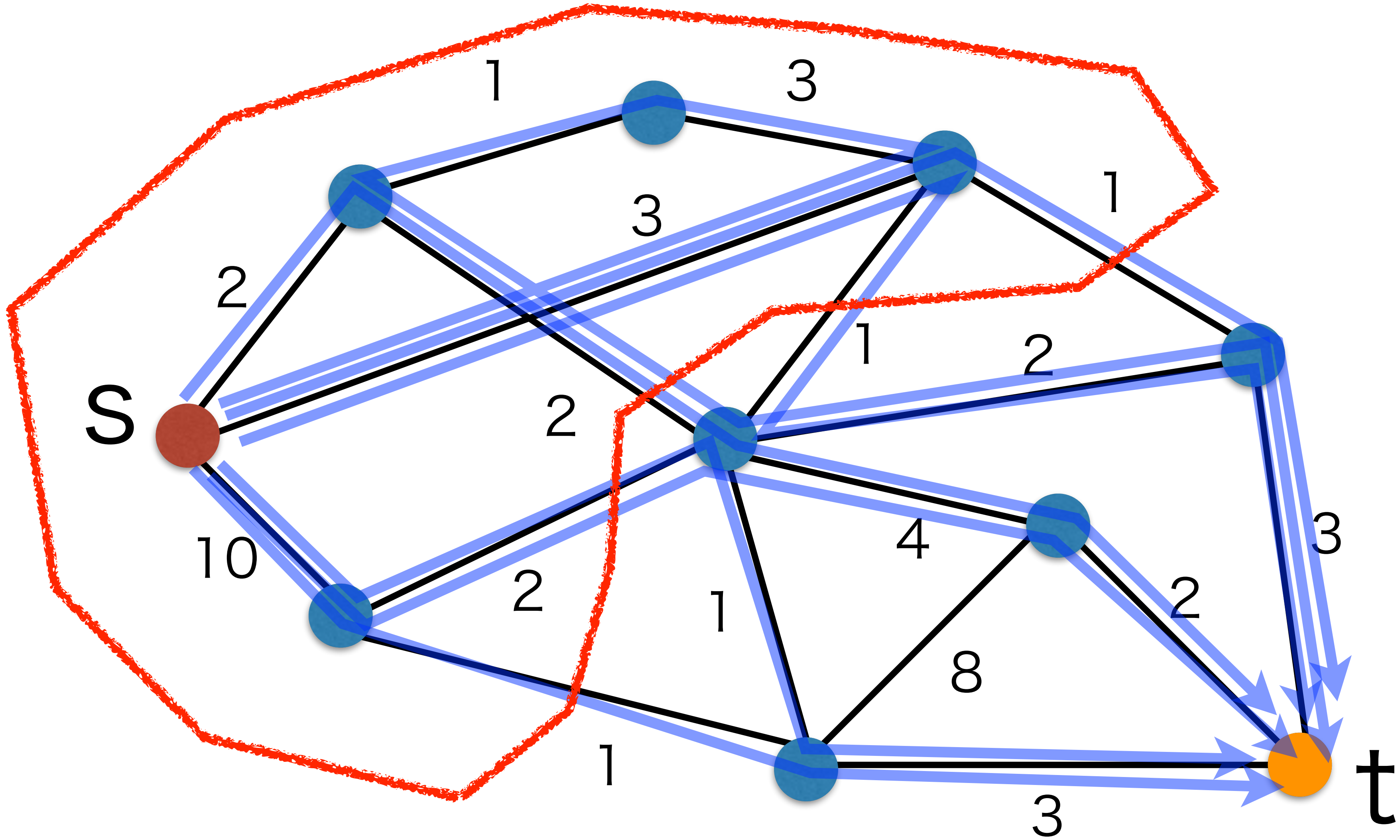
最大フロー問題



最大フロー問題

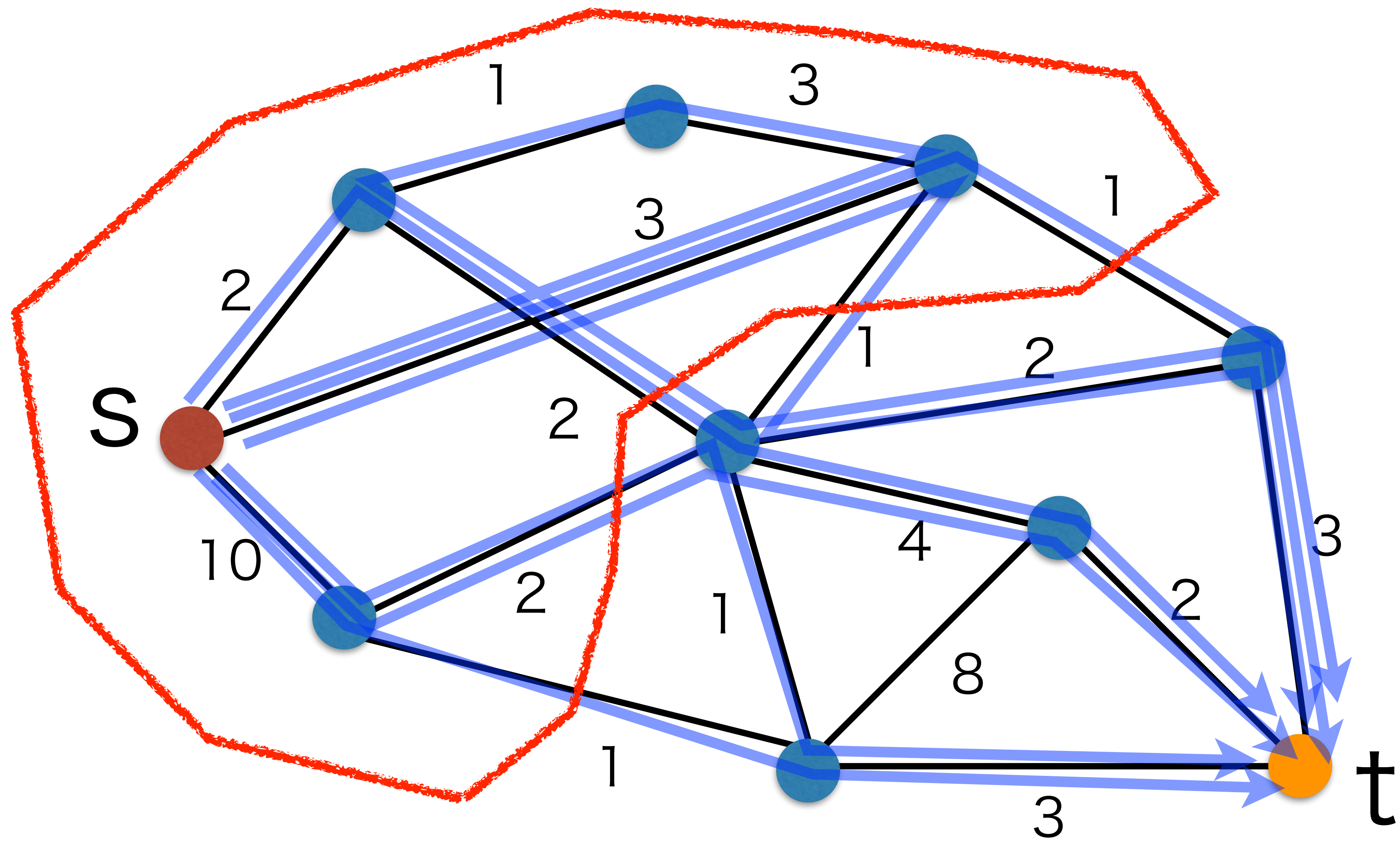


最大フロー問題



最大(s,t)-フロー　＝　最小(s,t)-カット

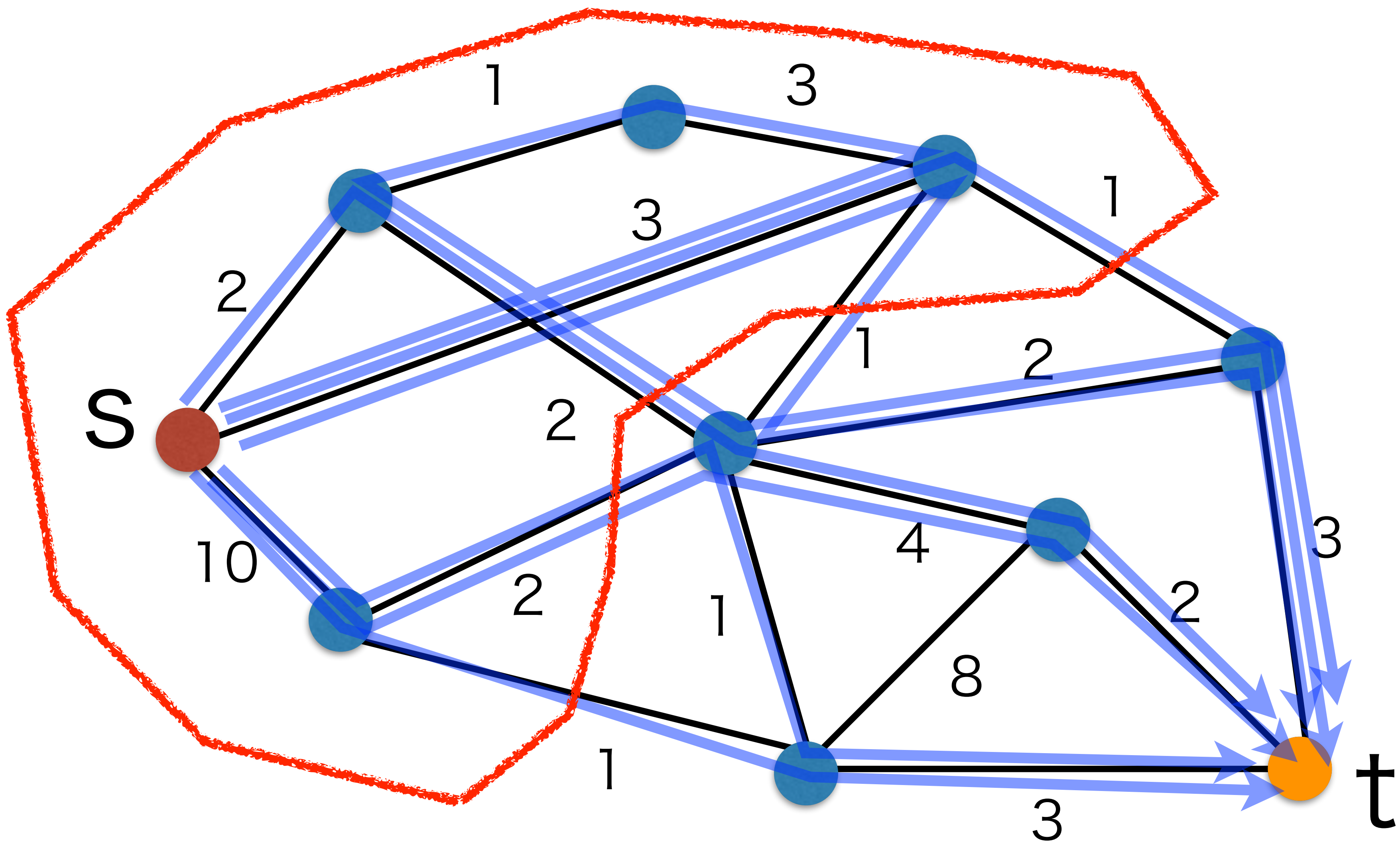
最大フロー問題



最大(s,t)-フロー　＝　最小(s,t)-カット

劣モジュラ関数最小化

最大フロー問題



最大(s,t)-フロー　＝　最小(s,t)-カット

高速フローアルゴリズム

劣モジュラ関数最小化

劣モジュラ最小化一般論

入力： f の値を返すサブルーチン(オラクル)

$$
\begin{aligned}
\text{Min.} \quad & f(X) \\
\text{s.t.} \quad & X \subseteq V
\end{aligned}
$$

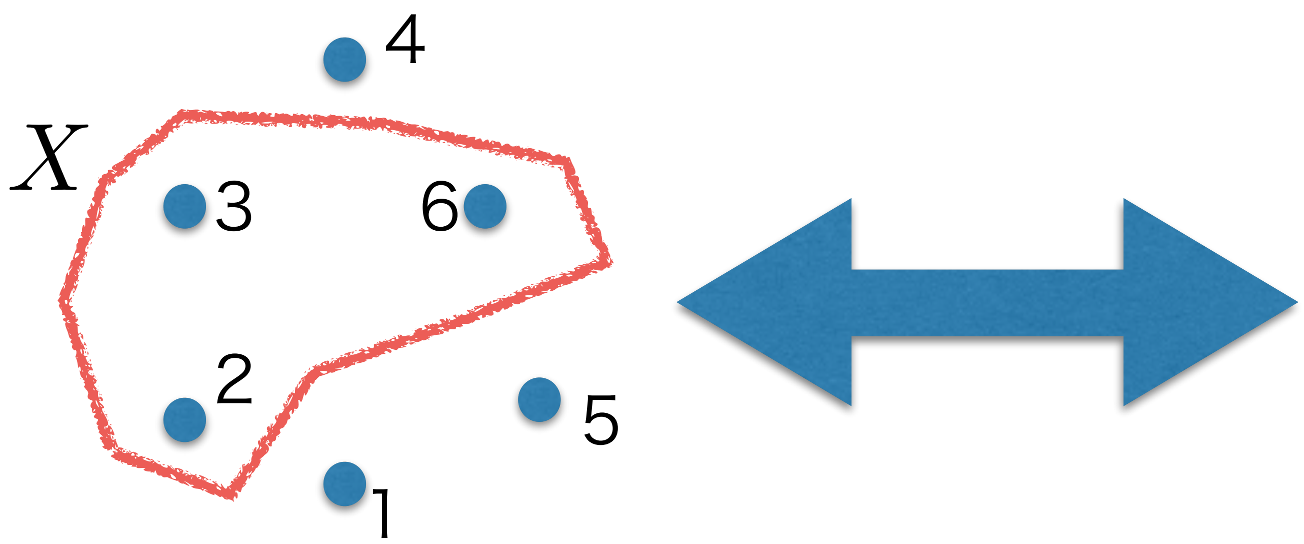
多項式時間アルゴリズム

1981, 1988: Grotschel-Lovasz-Schrijver (楕円体法)

2000: Iwata-Fleischer-Fujishige, Schrijver

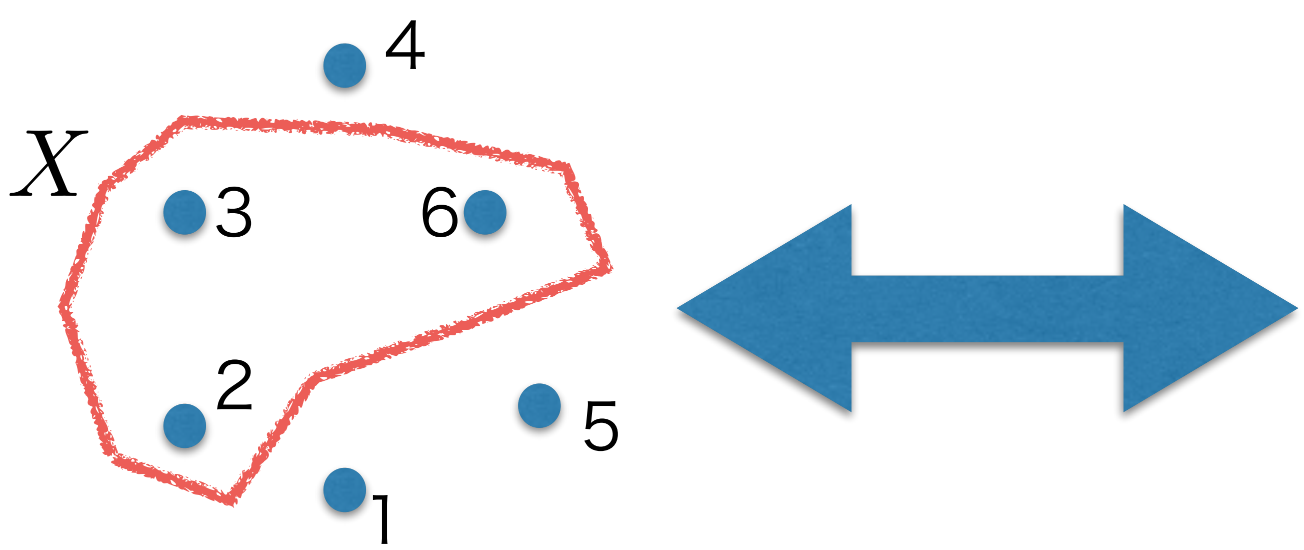
実用的：最小ノルム点アルゴリズム(Fujishige)

集合関数は0-1ベクトル上の関数である



$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

集合関数は0-1ベクトル上の関数である



$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$f : \{0,1\}^n \to \mathbf{R}$ が劣モジュラ $\Longleftrightarrow$

$$f(x) + f(y) \geq f(x \wedge y) + f(x \vee y)$$

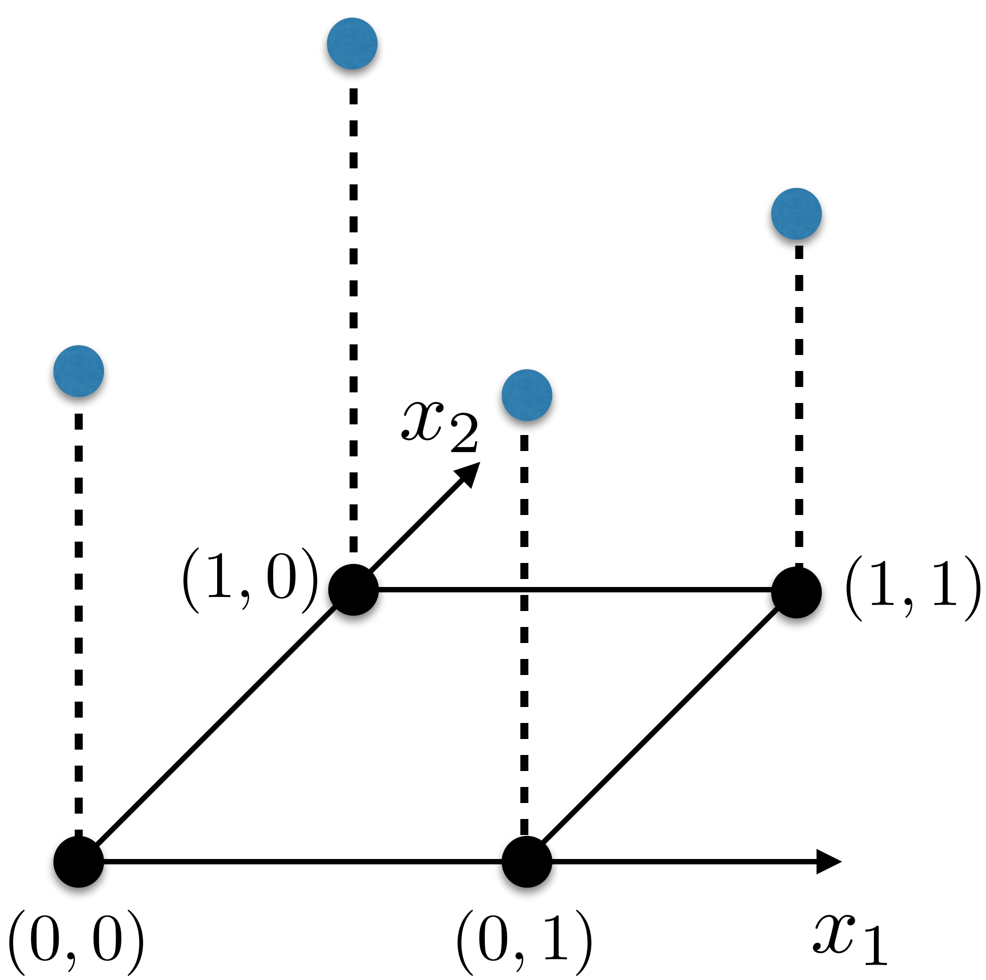
$$(x, y \in \{0,1\}^n)$$

$(x \wedge y)_i := \min(x_i, y_i) \qquad (x \vee y)_i := \max(x_i, y_i)$

離散凸性：Lovasz拡張

劣モジュラ関数

$$f:\{0,1\}^n \to \mathbf{R}$$



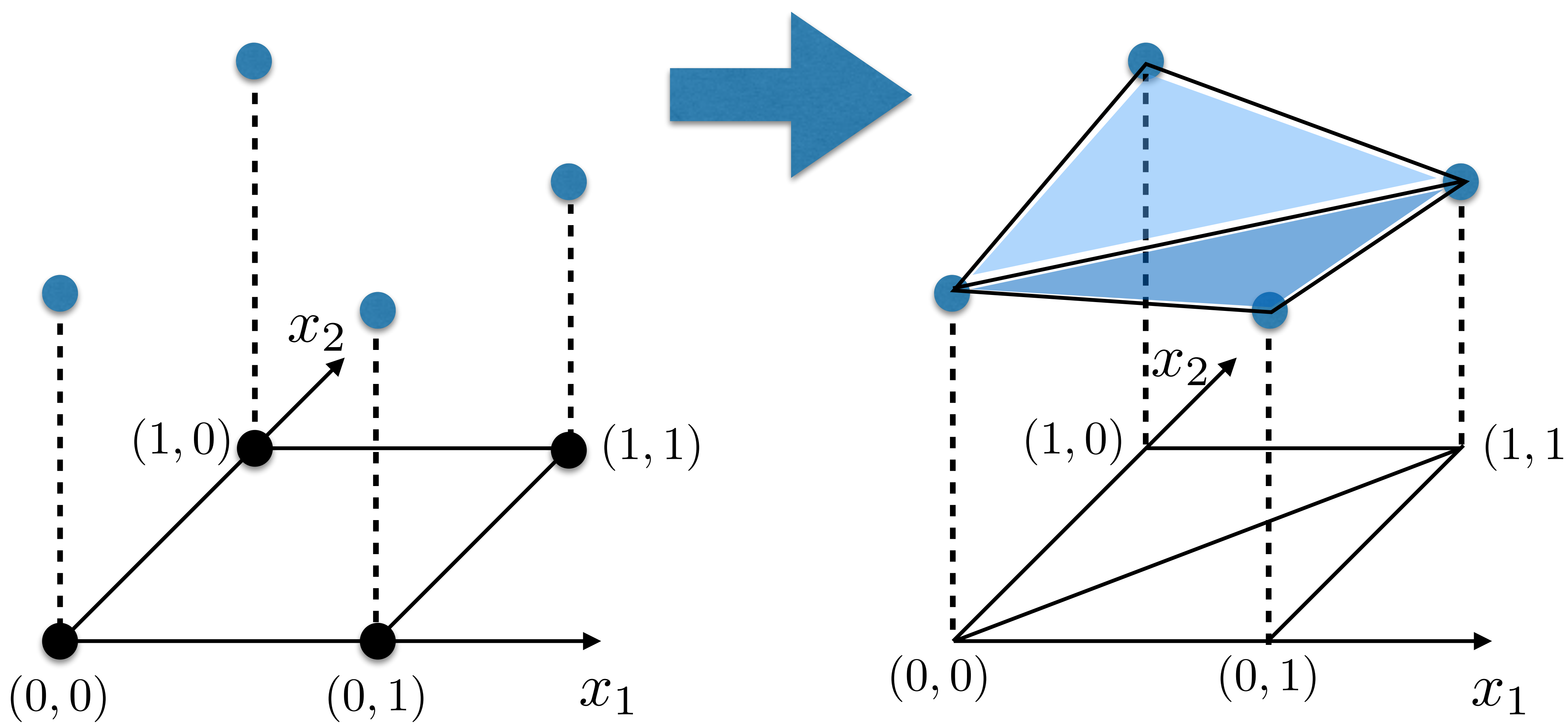
離散凸性：Lovasz拡張

劣モジュラ関数

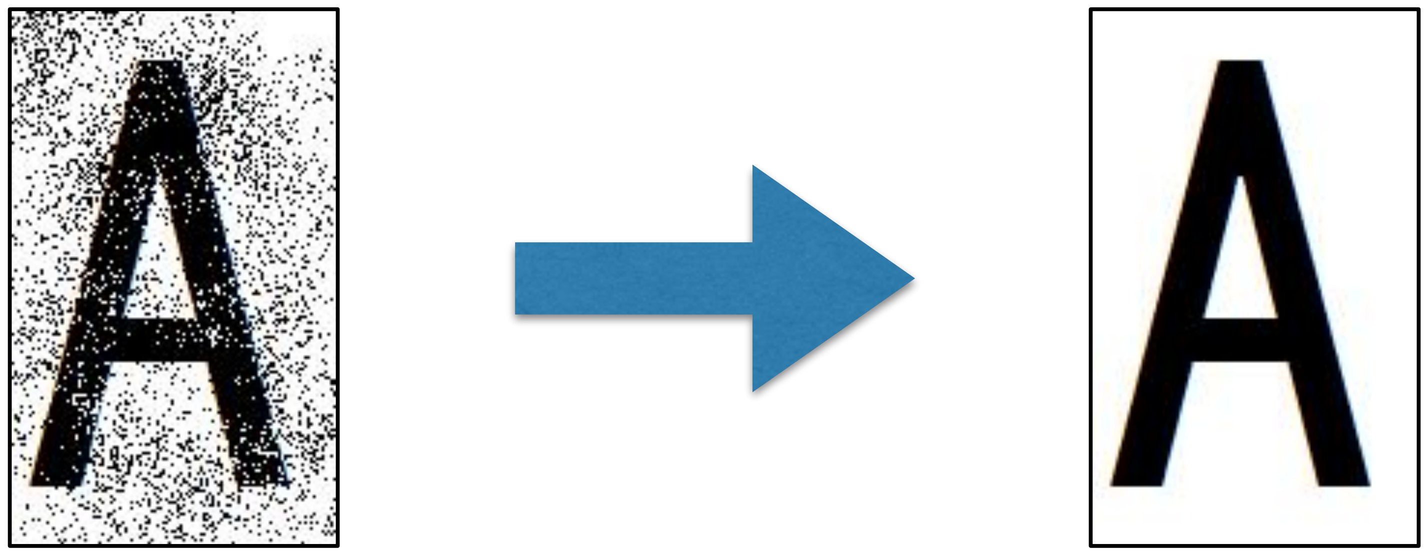
$$f : \{0, 1\}^n \to \mathbf{R}$$

凸関数

$$\hat{f} : [0, 1]^n \to \mathbf{R}$$

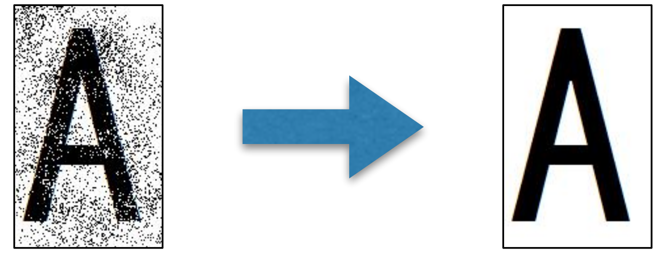


応用：２値画像のノイズ除去



画像を0-1ベクトルで表現

- 白=0, 黒＝1, 画素数= n
- 元画像: $y = (y_1, y_2, \ldots, y_n) \in \{0,1\}^n$
- 推定画像: $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \{0,1\}^n$



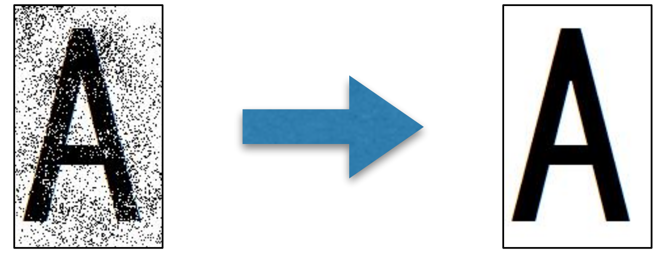
y $\qquad\qquad$ x

エネルギー最小化問題

$$\text{Min.} \quad \sum_{i} b|x_i - y_i| + \sum_{i,j:\text{隣接画素}} c|x_i - x_j|$$

$$\text{s.t.} \quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \{0,1\}^n$$

の大域最小解を推定画像にする.



y $\qquad$ x

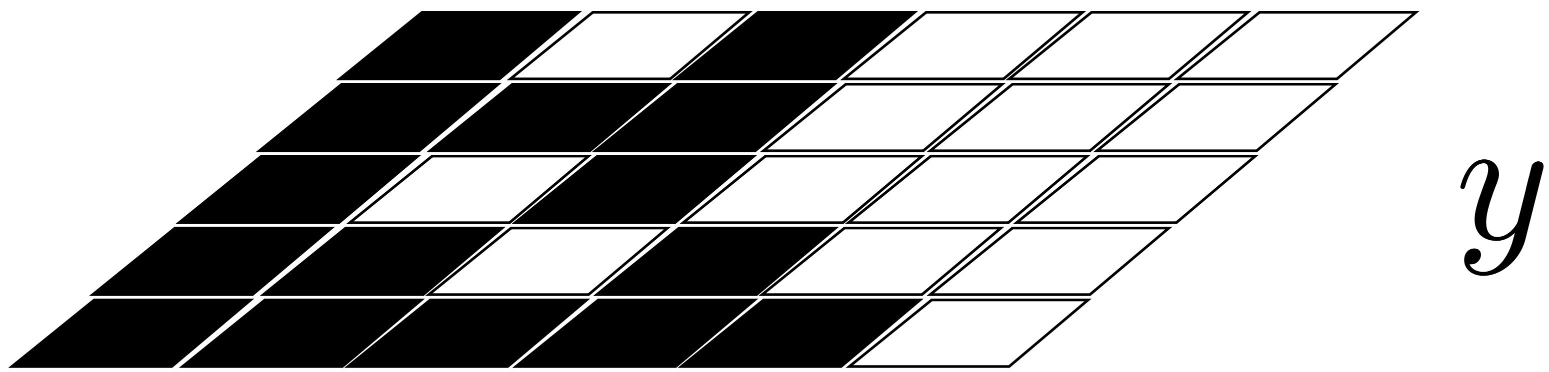
エネルギー最小化問題

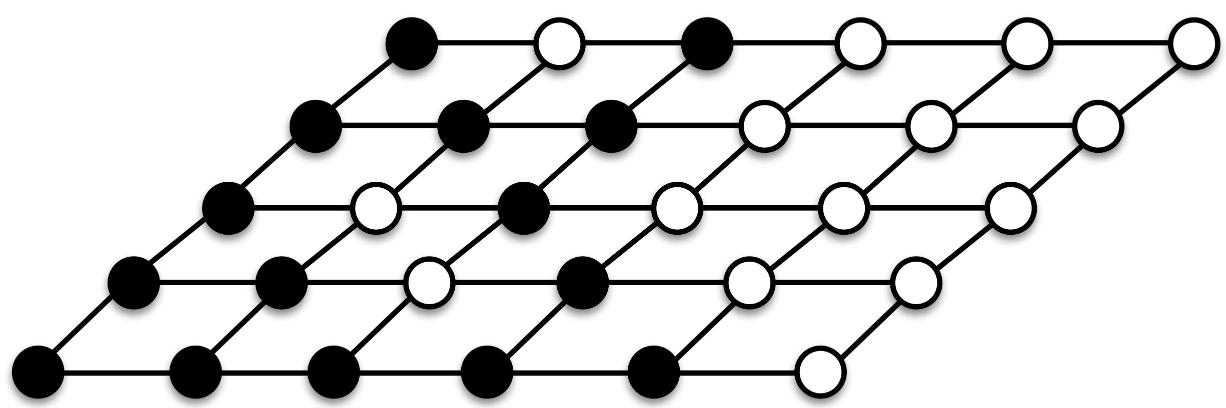
$$\text{Min.} \quad \sum_i b|x_i - y_i| + \sum_{i,j:\text{隣接画素}} c|x_i - x_j|$$

$$\text{s.t.} \quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \{0,1\}^n$$

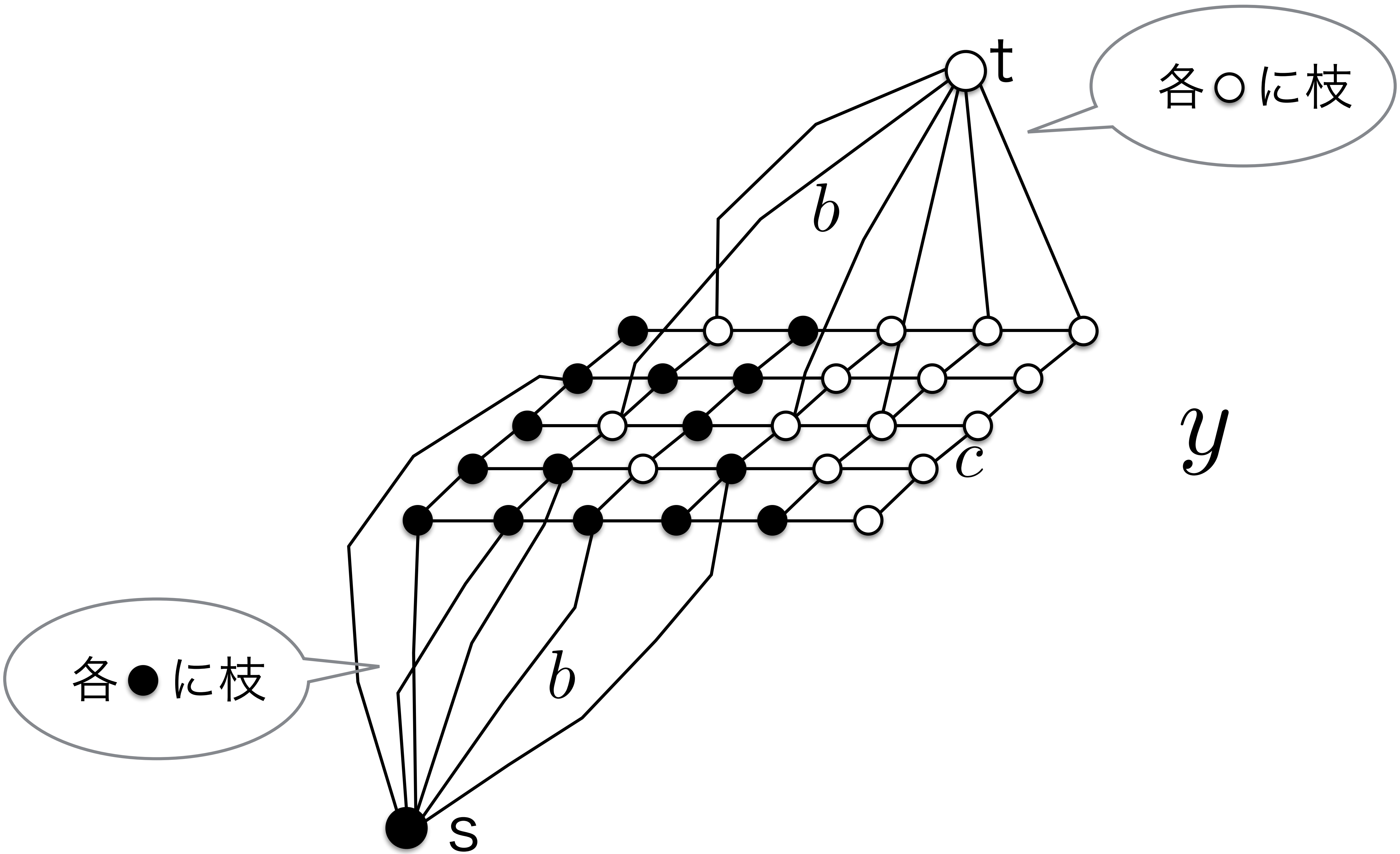
の大域最小解を推定画像にする.

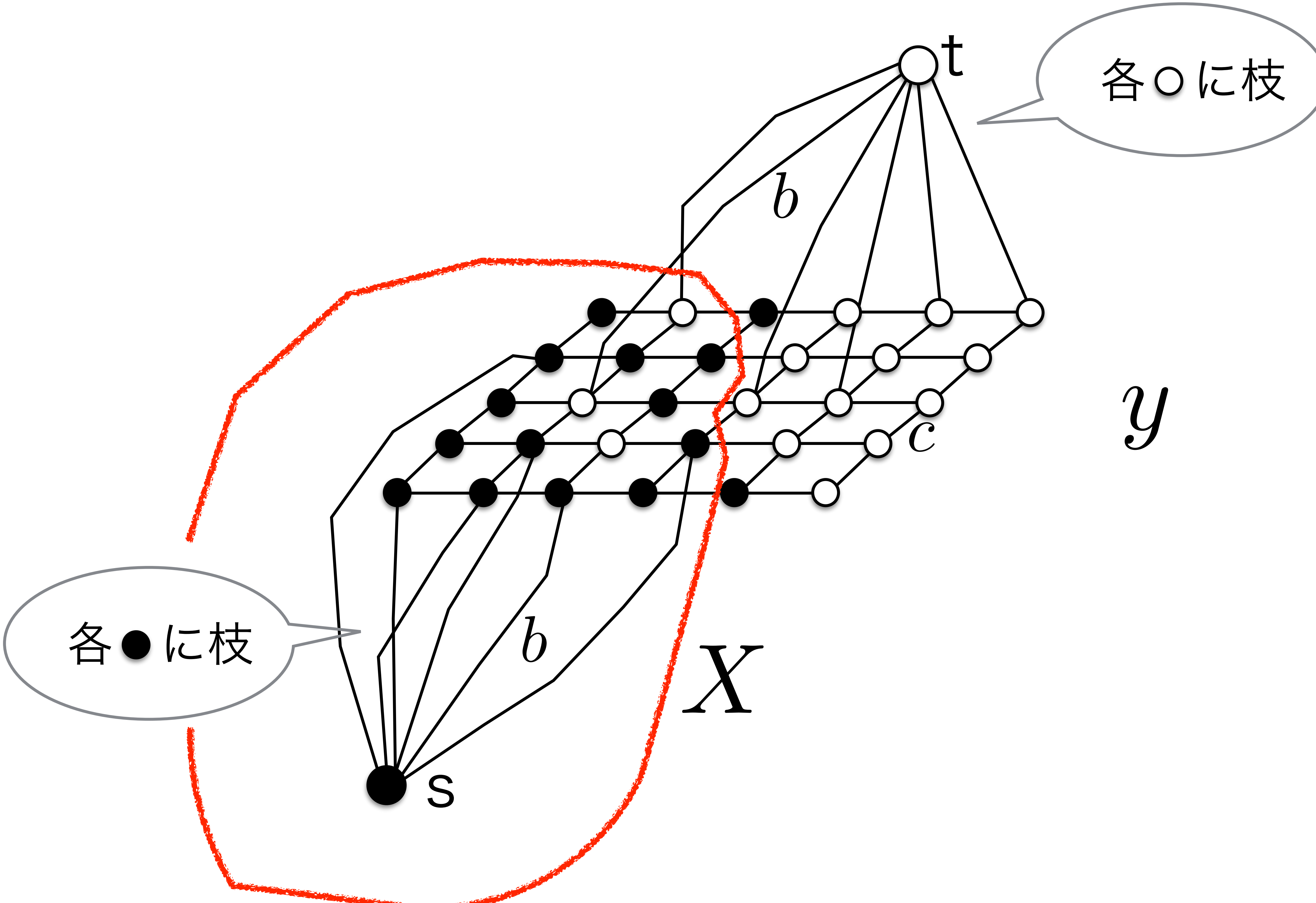
目的関数は劣モジュラ，さらにグラフカットで解ける


y

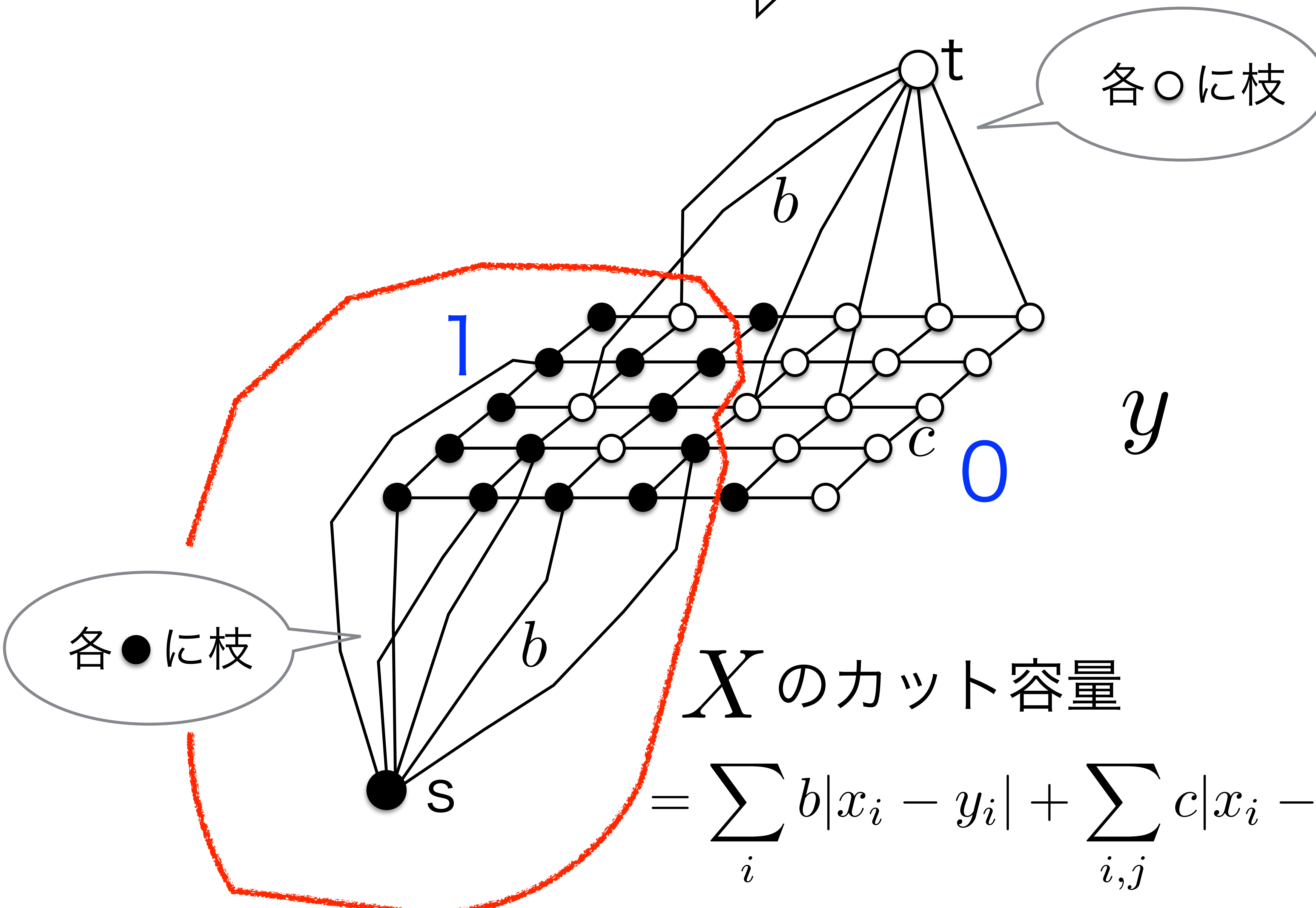


y


t
各○に枝
b
y
c
各●に枝
b
s


t
各○に枝
b
y
c
X
各●に枝
b
s

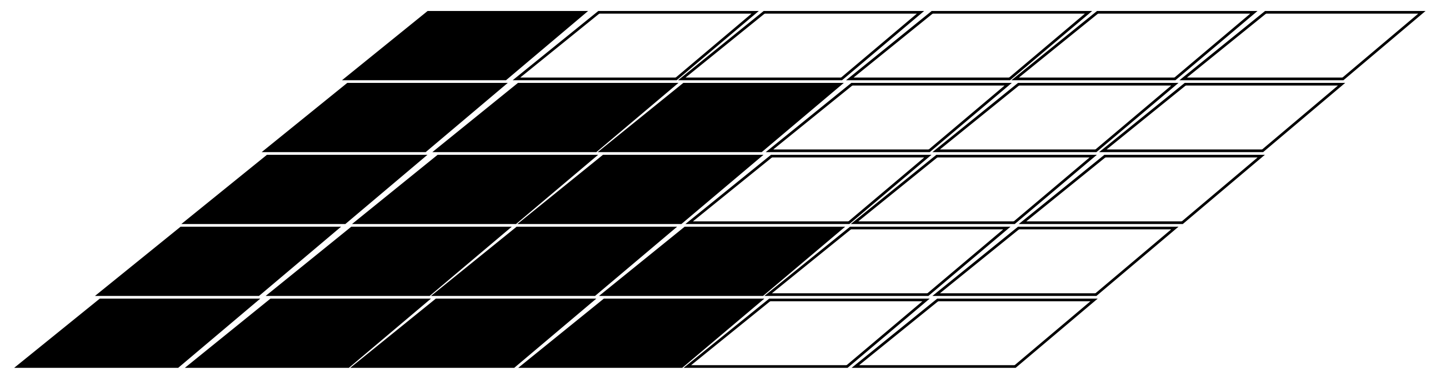
最小カットX ⇨ 推定画像 x



X のカット容量

$$= \sum_i b|x_i - y_i| + \sum_{i,j} c|x_i - x_j|$$

最小カットX ⇨ 推定画像 x



エネルギー最小化一般形

$$\text{Min.} \quad \sum_i h_i(x_i) + \sum_{i,j} h_{ij}(x_i, x_j)$$

$$\text{s.t.} \quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \{0,1\}^n$$

定理 [Hammer 65, Kolmogorov-Zabih 04]

$h_{ij} : \{0,1\}^2 \to \mathbf{R}$ が劣モジュラなら

グラフカットで解ける

f：k次 ⇔ 引数がk個以下の関数の和

$$\sum_i h_i(x_i) + \sum_{i,j} h_{ij}(x_i, x_j) + \sum_{i,j,k} h_{ijk}(x_i, x_j, x_k) + \cdots$$

f：k次 ⇔ 引数がk個以下の関数の和

$$\sum_i h_i(x_i) + \sum_{i,j} h_{ij}(x_i, x_j) + \sum_{i,j,k} h_{ijk}(x_i, x_j, x_k) + \cdots$$

- ３次劣モジュラ関数はグラフ表現可能

Billionnet-Minoux 85, Kolmogorov-Zabih 04

$\rightarrow$ グラフカットで最小化

- ４次劣モジュラ関数にはグラフで表現できないものがある

Zivny-Cohen-Jeavons 09

劣モジュラ関数の仲間たち

- $\mathrm{L}^\natural$凸関数

$$f : \mathbf{Z}^n \to \mathbf{R}$$

- 双劣モジュラ関数

$$f : \{-1, 0, 1\}^n \to \mathbf{R}$$

- k-劣モジュラ関数

$$f : \{0, a_1, a_2, \ldots a_k\}^n \to \mathbf{R}$$

L$^\natural$凸関数 (Favati-Tardella, Murota, Fujishige-Murota)

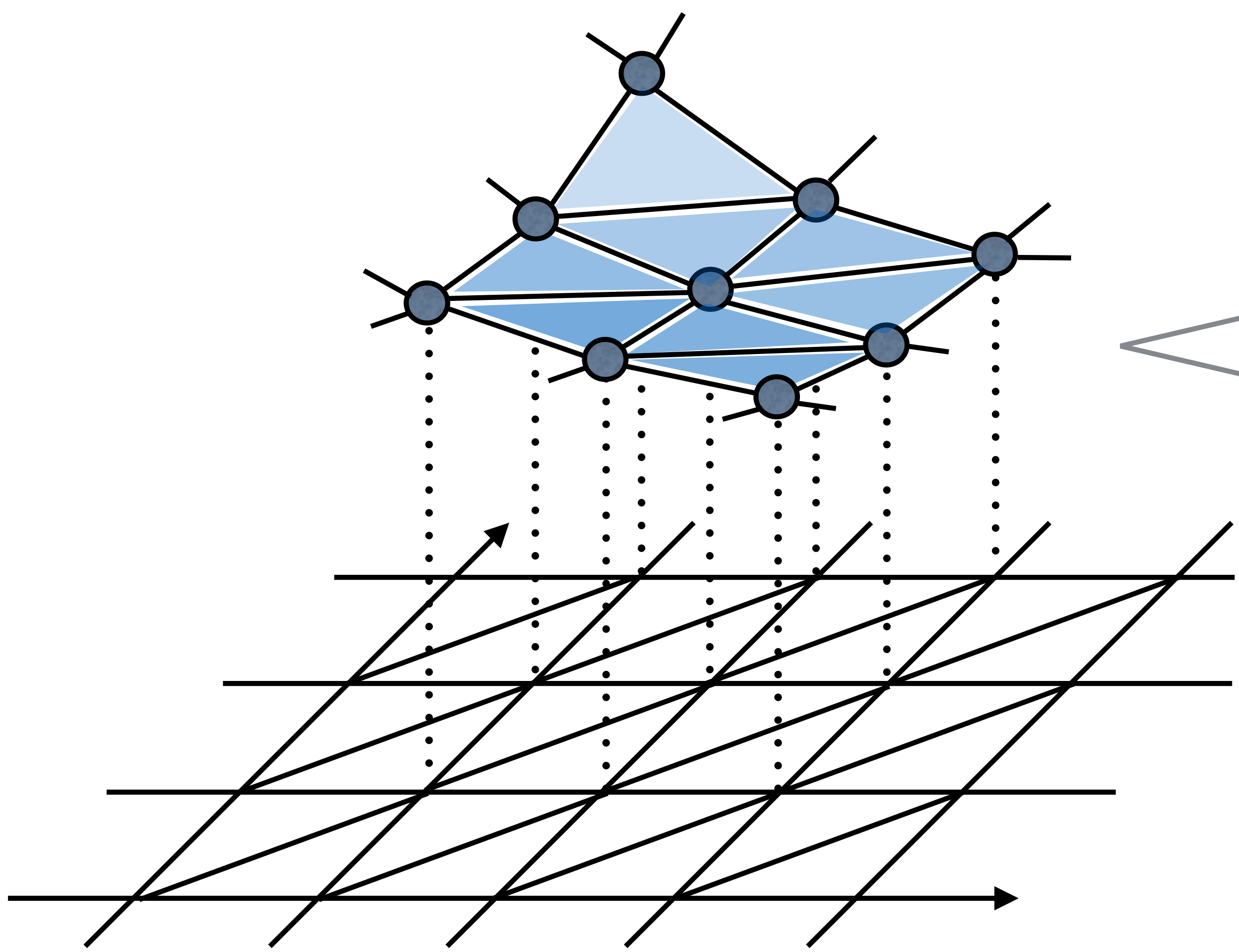
$f : \mathbf{Z}^n \to \mathbf{R}$ が L$^\natural$凸 $\Longleftrightarrow$

$$f(x) + f(y) \geq f(\lceil \frac{x+y}{2} \rceil) + f(\lfloor \frac{x+y}{2} \rfloor) \quad (x, y \in \mathbf{Z}^n)$$

L♮凸関数 (Favati-Tardella, Murota, Fujishige-Murota)

$f : \mathbf{Z}^n \to \mathbf{R}$ が L♮凸 $\Longleftrightarrow$

$$f(x) + f(y) \geq f(\lceil \frac{x+y}{2} \rceil) + f(\lfloor \frac{x+y}{2} \rfloor) \quad (x, y \in \mathbf{Z}^n)$$



$z + \{0,1\}^n$で
劣モジュラ
＋
大域凸

大事な性質

- 最適性判定 + 降下方向 ⇒ 劣モ最小化
- 1次元凸関数 h_i, h_{ij} に対し

$$\sum_i h_i(x_i) + \sum_{i,j} h_{ij}(x_i - x_j)$$

は$\mathrm{L}^\natural$凸関数，しかもグラフカットの

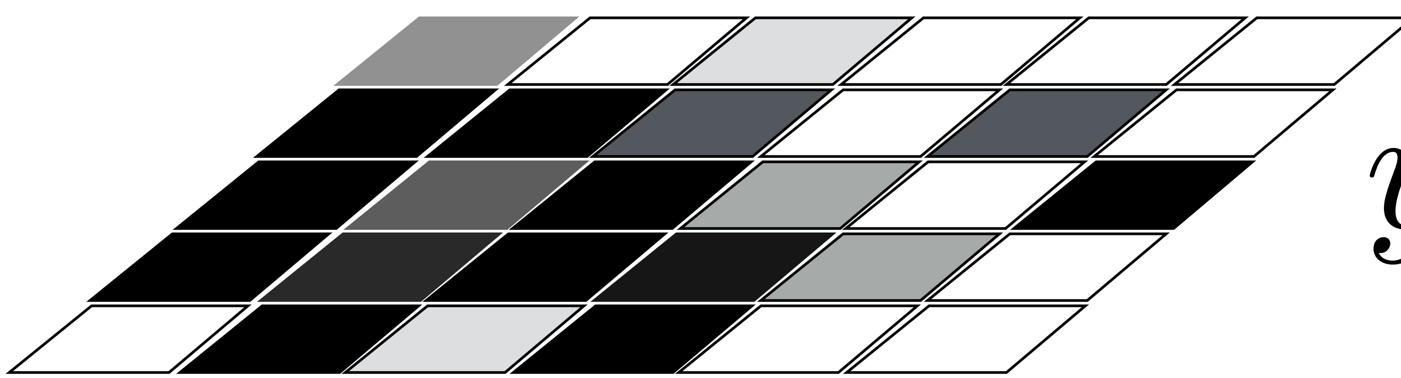
繰り返しで最小化できる

グレースケール画像のノイズ除去

$\mathrm{L}^{\natural}$凸

$$\text{Min.}\quad \sum_{i} b|x_i - y_i| + \sum_{i,j:\text{隣接画素}} c|x_i - x_j|$$

$$\text{s.t.}\quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \{0, 1, 2, \ldots, K\}^n$$



y

グラフカットO(K)回で大域的最小解がもとまる

Kolmogorov-Shioura 09

双劣モジュラ関数 (Chandrasekaran-Kabadi, Qi, Nakamura)

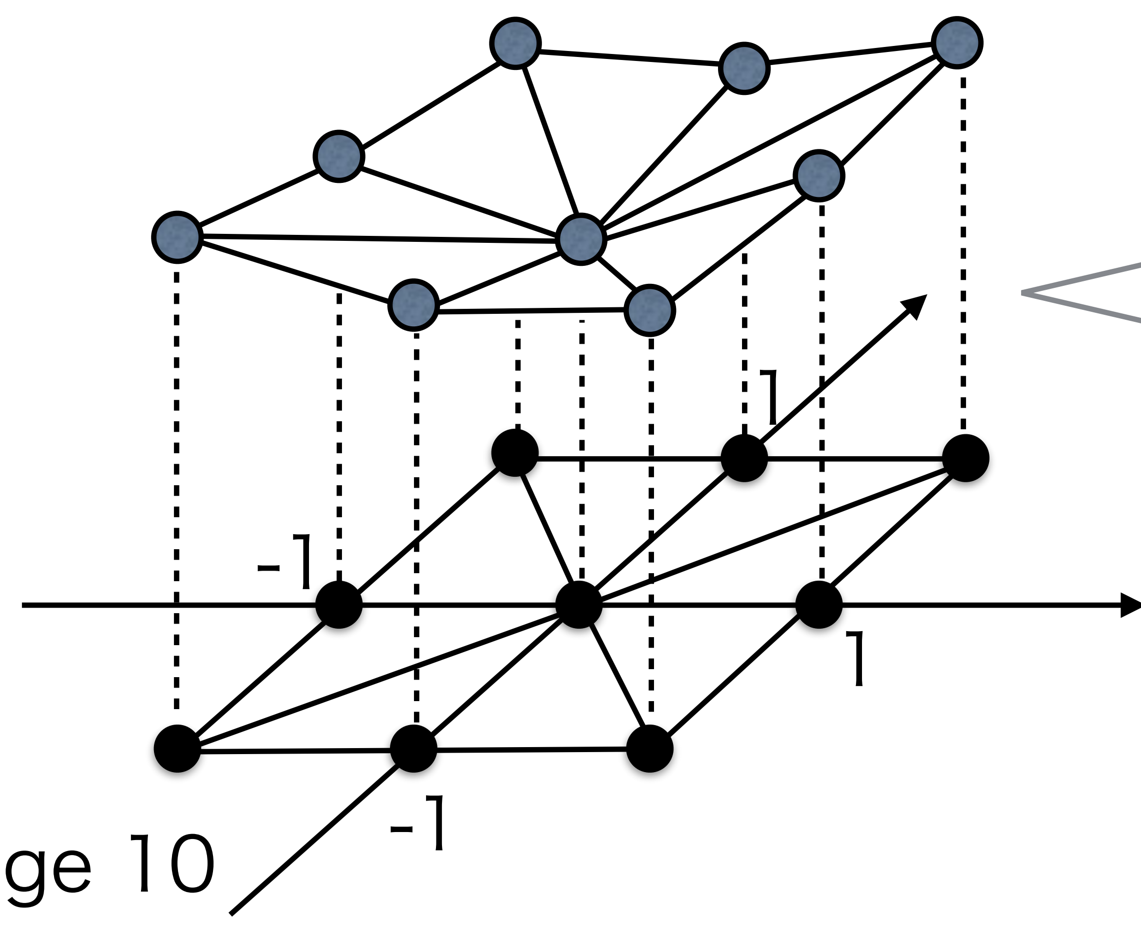
$f : \{-1, 0, 1\}^n \to \mathbf{R}$ が双劣モジュラ $\Longleftrightarrow$

$$f(x) + f(y) \geq f(x \sqcap y) + f(x \sqcup y) \quad (\forall x, y)$$

双劣モジュラ関数 (Chandrasekaran-Kabadi, Qi, Nakamura)

$f : \{-1, 0, 1\}^n \to \mathbf{R}$ が双劣モジュラ ⟺

$$f(x) + f(y) \geq f(x \sqcap y) + f(x \sqcup y) \quad (\forall x, y)$$



各象限で向きを変えて劣モジュラ
＋
大域凸

多項式時間アルゴリズム

Fujishige-Iwata 06

McCormick-Fujishige 10

大事かもしれない性質

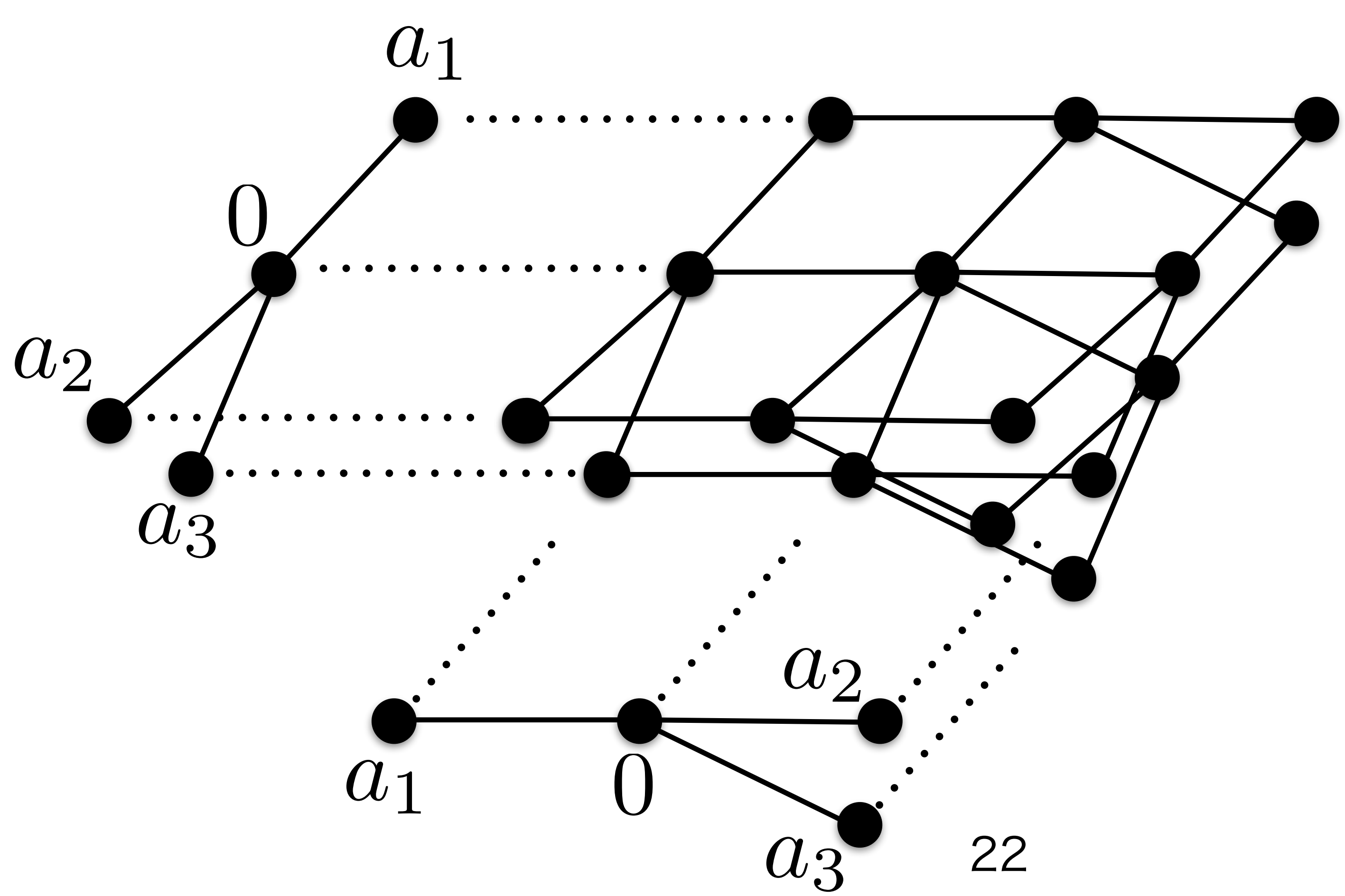
- $\sum a_i x_i + b_i|x_i| + \sum c_{ij}|x_i - x_j| + d_{ij}|x_i + x_j|$
  は双劣モ，グラフカットで最小化できる.
- 任意の2次関数 $f : \{-1, 1\}^n \to \mathbf{R}$ は,
  上の型の双劣モ関数 $f : \{-1, 0, 1\}^n \to \mathbf{R}$ に
  拡張可能.　　　(roof duality，双劣モジュラ緩和)
- 任意の2次双劣モ関数はグラフカットで最小化できる.　　　(石井勇太，修士論文，2014)

k-劣モジュラ関数

Huber-Kolmogorov 13

$$f : \{0, a_1, a_2, \ldots, a_k\}^n \to \mathbf{R} \quad \Longleftrightarrow$$

$$f(x) + f(y) \geq f(x \sqcap y) + f(x \sqcup y) \quad (\forall x, y)$$

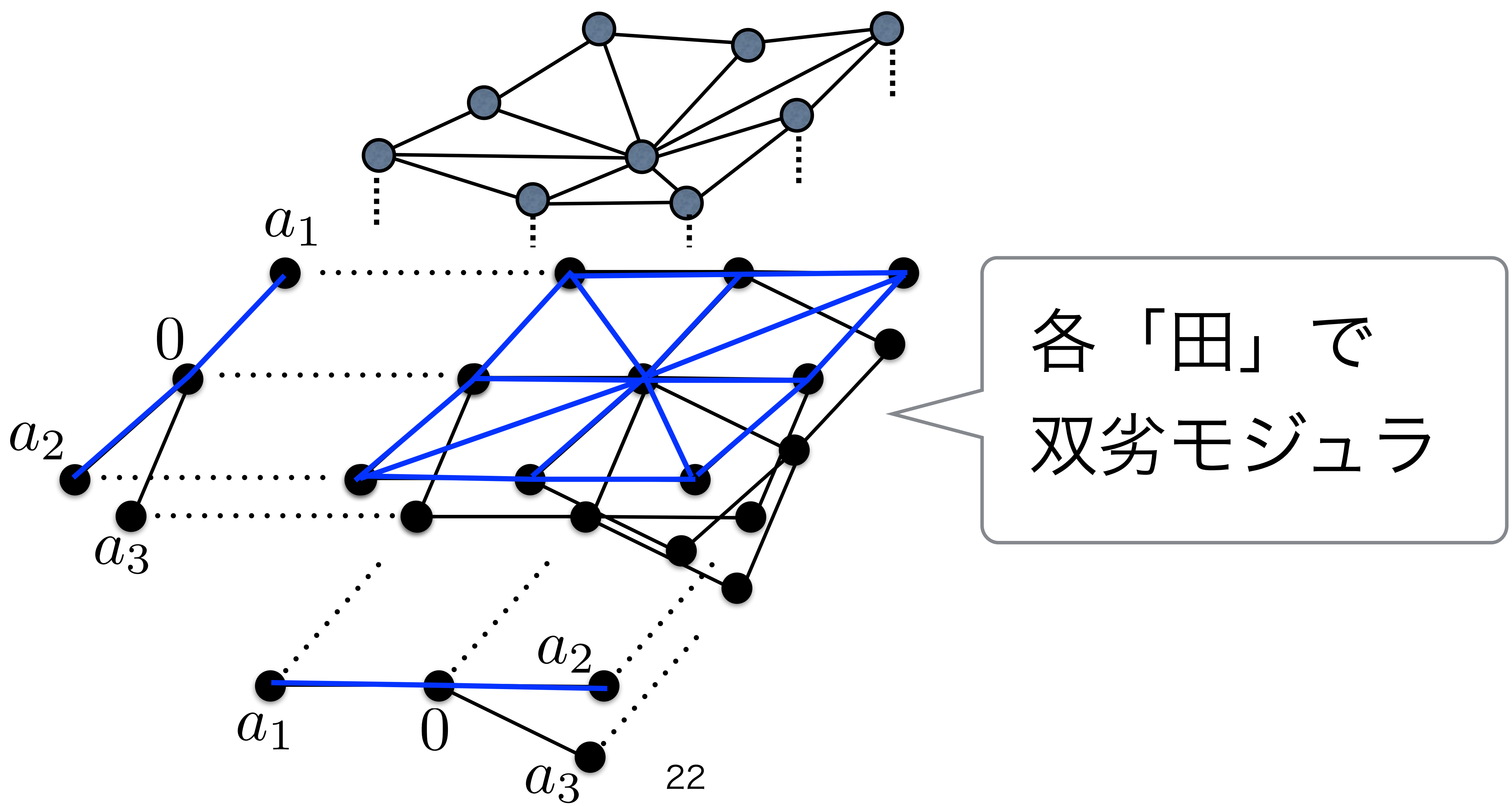


k-劣モジュラ関数

Huber-Kolmogorov 13

$$f:\{0,a_1,a_2,\ldots,a_k\}^n\to\mathbf{R} \iff$$

$$f(x)+f(y)\geq f(x\sqcap y)+f(x\sqcup y)\quad(\forall x,y)$$

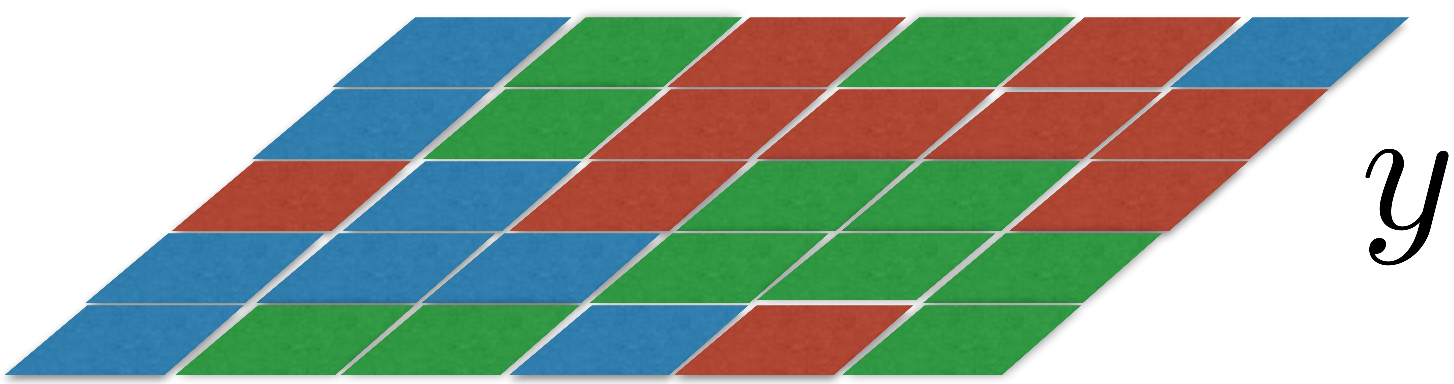


3色画像のノイズ除去

$$\text{Min.}\quad \sum_i b\,\delta(x_i, y_i) + \sum_{i,j:\text{隣接画素}} c\,\delta(x_i, x_j)$$

$$\text{s.t.}\quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \{R, G, B\}^n$$

δ ：引数が同じなら０，そうでないなら１



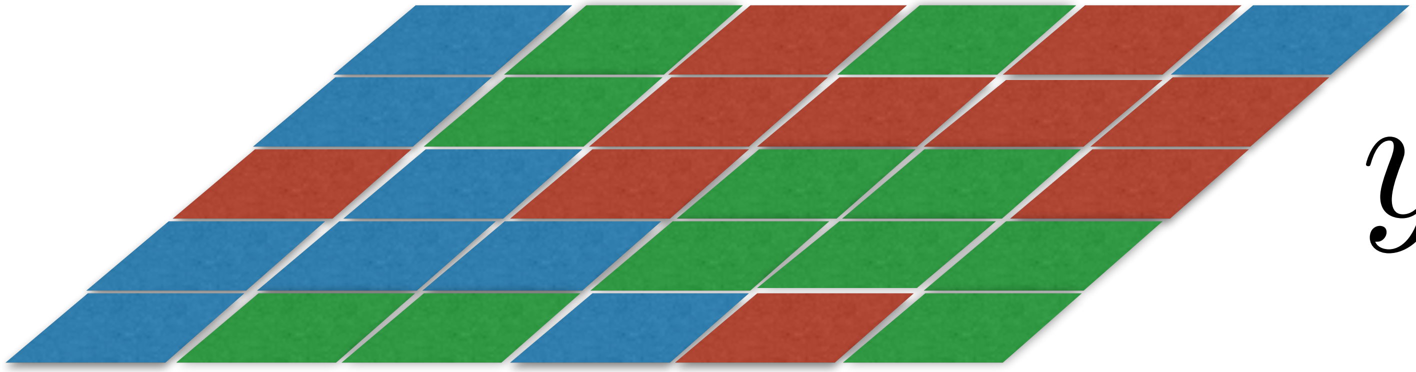
多分割カット：NP困難

3色+1緩和問題

$$\text{Min.} \quad \sum_i b\,\delta(x_i, y_i) + \sum_{i,j:\text{隣接画素}} c\,\delta(x_i, x_j)$$

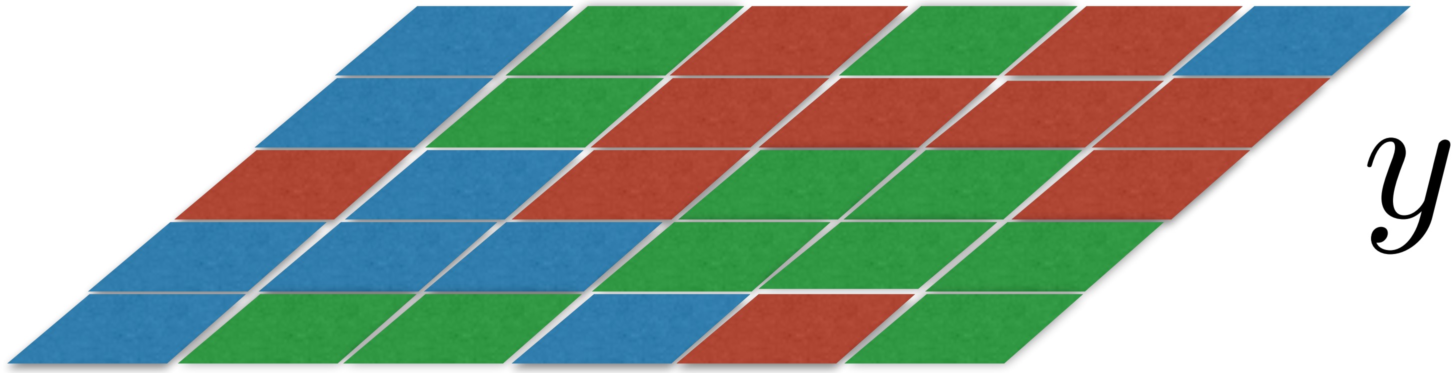
$$\text{s.t.} \quad x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \{0, R, G, B\}^n$$

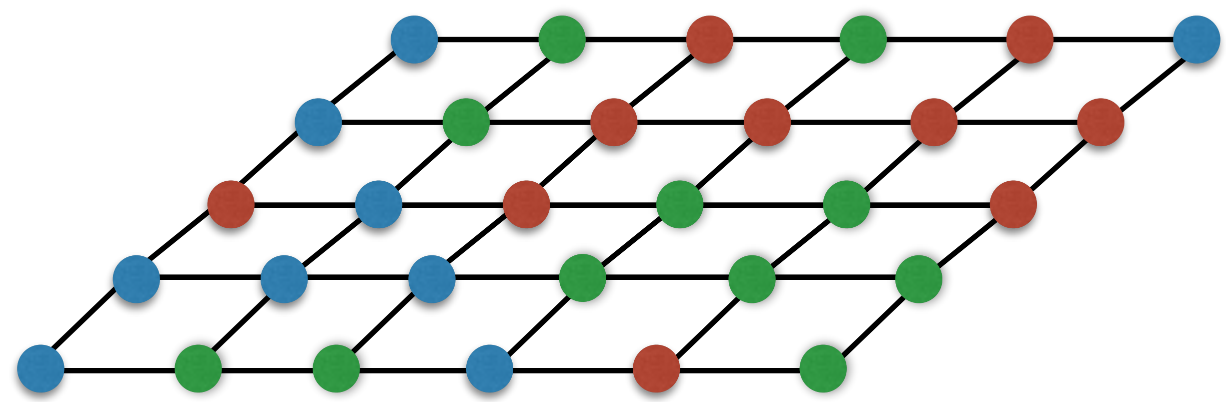
$$\delta(0, R) = \delta(0, G) = \delta(0, B) := 1/2$$

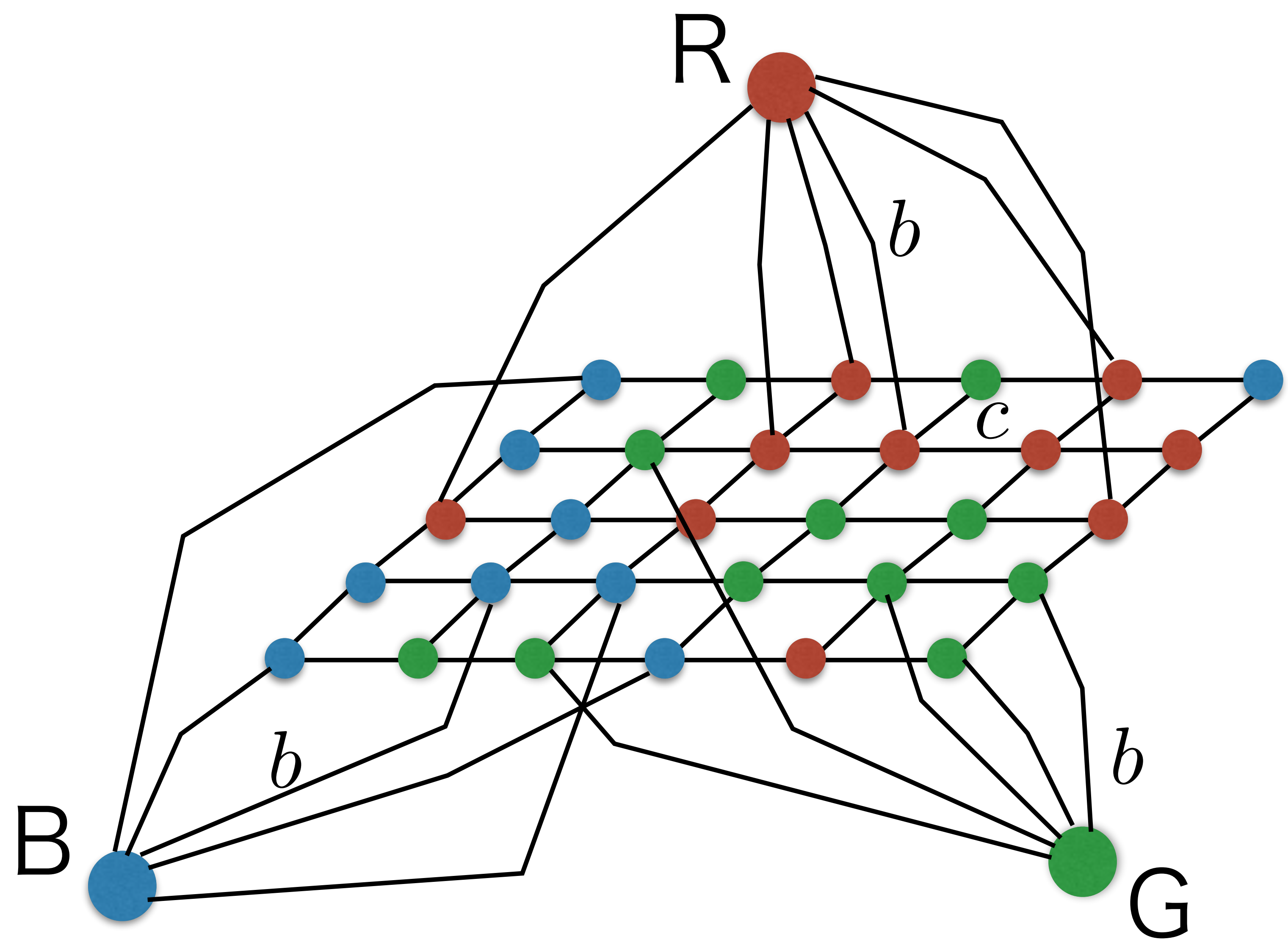


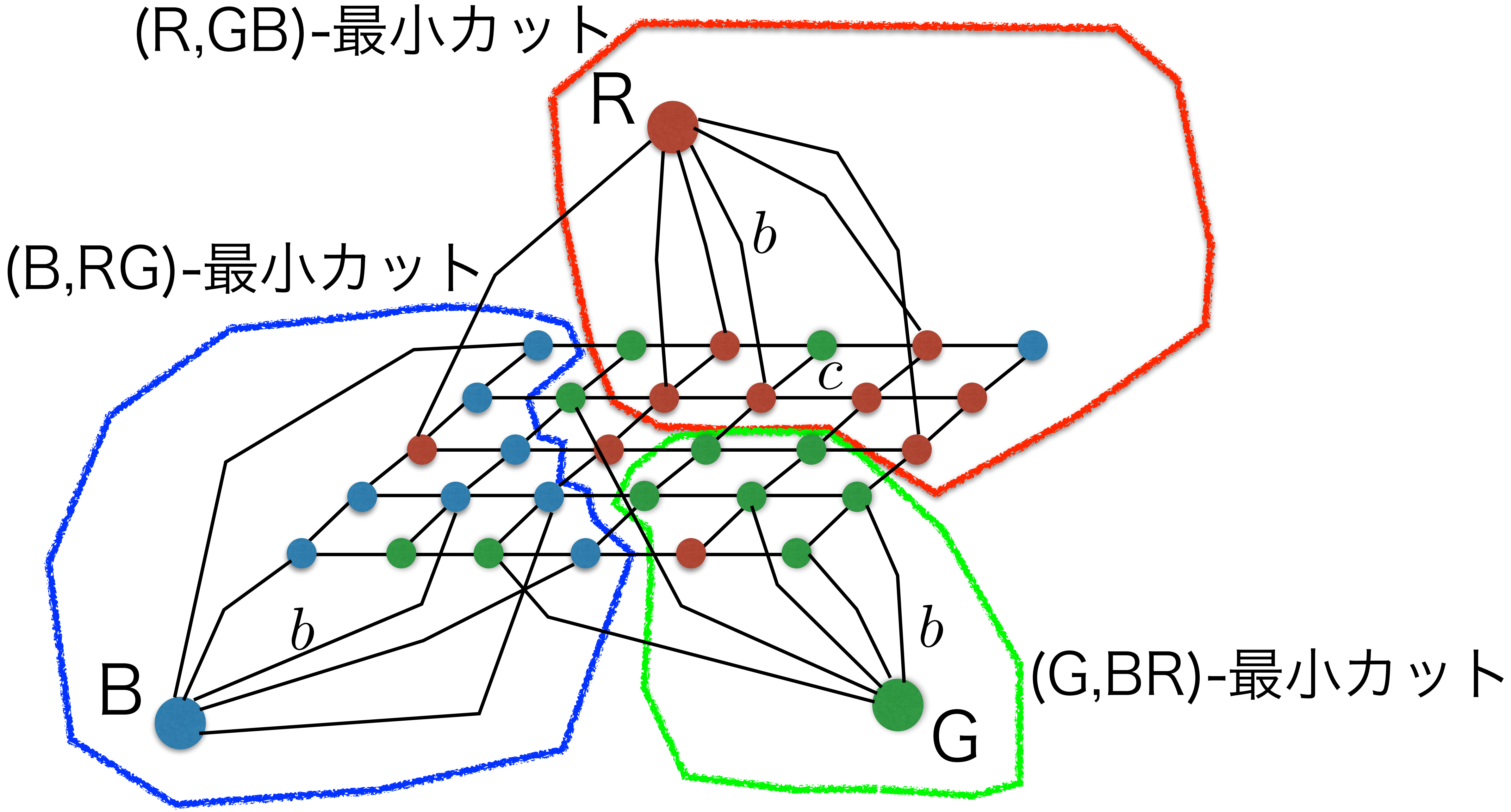
y

3-劣モ最小化，しかもグラフカットで解ける

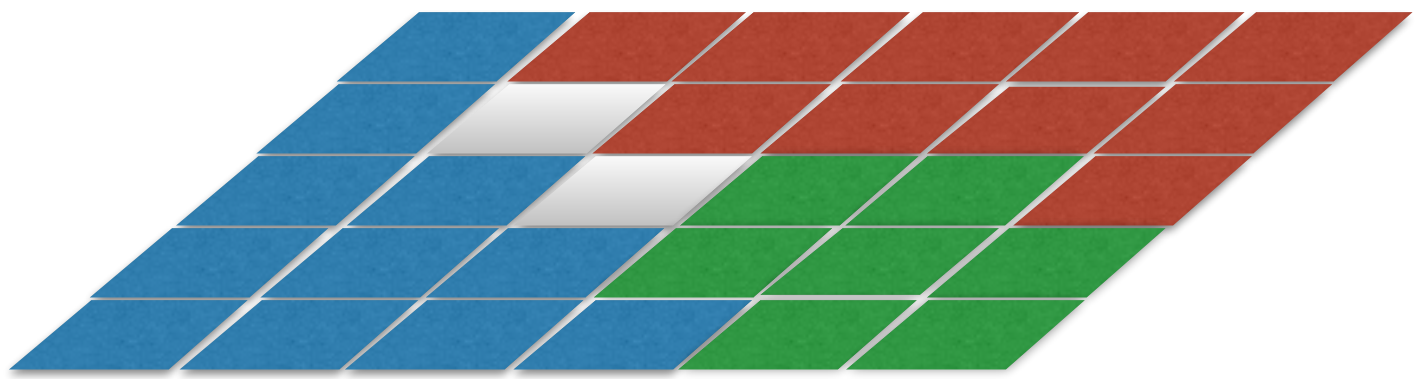

y

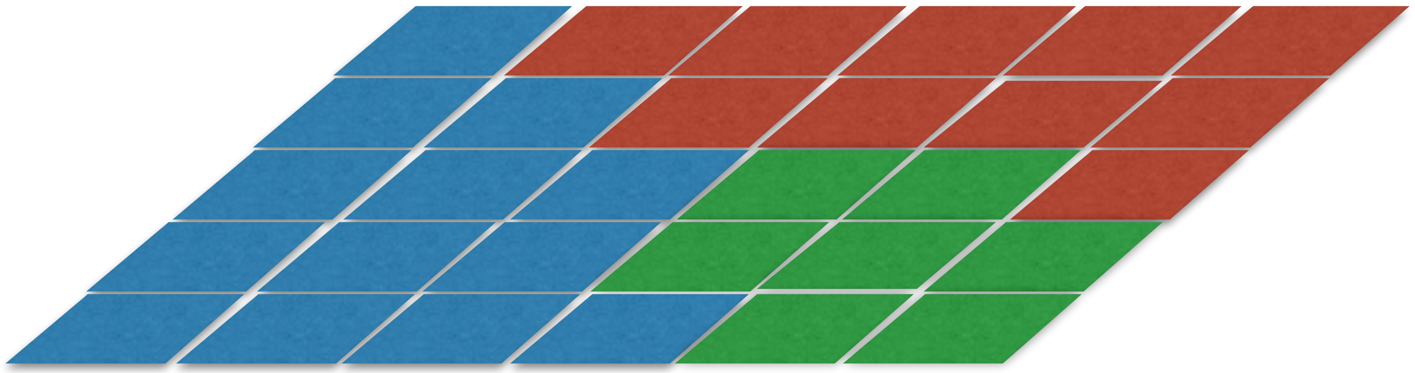



R
b
c
B
b
b
G


(R,GB)-最小カット
R
b
(B,RG)-最小カット
c
b
B
b
(G,BR)-最小カット
G

３色+1緩和問題の大域最小解





０を同じ色で塗ると

３色問題の２-近似解

- 基本k-劣モジュラ関数(Wahlstrom SODA'14)というものはグラフカットで最小化できる（岩田陽一，口答発表 2013）
- 一般のk-劣モジュラ関数が多項式時間で最小化できるかは未解決
- しかし次に述べるValued CSPという問題設定では多項式時間で最小化できる

Valued CSP

D : 有限集合

制約 $(f, \sigma) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} f : D^{k_f} \to \mathbf{R}, \\ \sigma : \{1, 2, \ldots, k_f\} \to \{1, 2, \ldots, n\} \end{cases}$

入力：制約の集合 $\mathcal{C}$

$$\text{Min.} \quad \sum_{(f,\sigma) \in \mathcal{C}} f\left(x_{\sigma(1)}, x_{\sigma(2)}, \ldots, x_{\sigma(k_f)}\right)$$

$$\text{s.t.} \quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in D^n$$

- 例： $\mathcal{C} = (f,(5,2)),(g,(4,1,1)),(g,(2,1,3))$

  $$\text{Min.}\quad f(x_5,x_2)+g(x_4,x_1,x_1)+g(x_2,x_1,x_3)$$

- f は $\underbrace{D \times D \times \cdots \times D}_{k_f}$ のテーブルで保持
- 今までの問題はVCSPと見るのが自然
- VCSPは，0-1整数計画としてかける
- Basic LP: そのLP緩和

定理 [Thapper-Zivny FOCS'12]

$\mathcal{C}$ が＊＊＊＊＊な分数的ポリモルフィズムを持つとBasic LPは厳密，VCSPは多項式時間で解ける.

定理 [Thapper-Zivny FOCS'12]

$\mathcal{C}$ が＊＊＊＊＊な分数的ポリモルフィズムを持つとBasic LPは厳密，VCSPは多項式時間で解ける.

分数的ポリモルフィズム

$\Leftrightarrow$ D 上の２項演算の凸結合 $\sum_j \alpha_i \odot_j$ ：

$$(f(x) + f(y))/2 \geq \sum_j \alpha_j f(x \odot_j y) \quad (\forall f \in \mathcal{C}, \forall x, y)$$

定理 [Thapper-Zivny FOCS'12]

$\mathcal{C}$ が＊＊＊＊＊な分数的ポリモルフィズムを持つとBasic LPは厳密，VCSPは多項式時間で解ける.

半束演算を項として持つ

分数的ポリモルフィズム

$\Leftrightarrow$ D 上の２項演算の凸結合 $\sum_j \alpha_i \odot_j$ ：

$$(f(x) + f(y))/2 \geq \sum_j \alpha_j f(x \odot_j y) \quad (\forall f \in \mathcal{C}, \forall x, y)$$

- 例：劣モジュラな制約

$\Leftrightarrow$ $\frac{1}{2}\wedge + \frac{1}{2}\vee$ がポリモルフィズム

- $\wedge, \vee, \sqcap$ は半束演算

- 系：k-劣モジュラなVCSPは多項式時間で解ける

グラフ上のL凸関数(H. 2012~)

動機・問題意識

- 最小ゼロ拡張，メトリックラベリング
- 多品種フロー版 最大フロー最小カット
- 整数格子＝グリッドグラフと見るとき L凸関数が定義できるグラフは何か？

最小ゼロ拡張問題(Karzanov 98)

$$\text{Min.} \quad \sum_{i,k} b_{ik}\, d_\Gamma(x_i, y_k) + \sum_{i,j} c_{ij}\, d_\Gamma(x_i, x_j)$$

$$\text{s.t.} \quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in (V_\Gamma)^n$$

Γ：グラフ

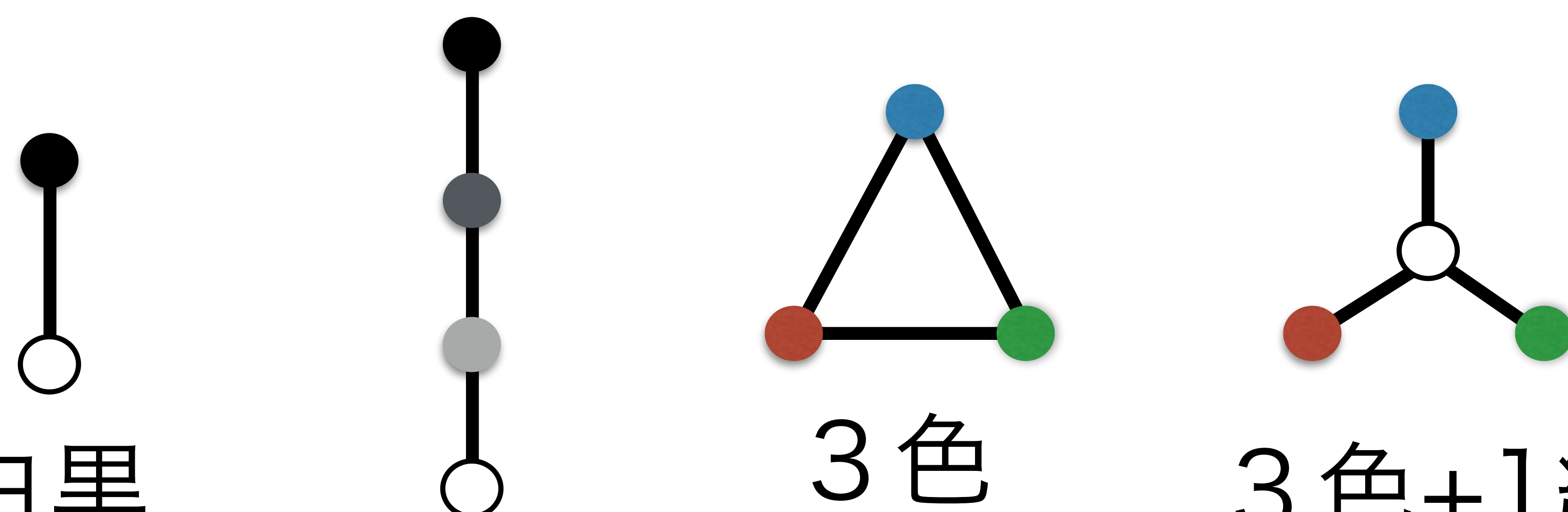
最小ゼロ拡張問題(Karzanov 98)

〜 カラー画像のノイズ除去

$$\text{Min.} \quad \sum_{i,k} b_{ik}\, d_\Gamma(x_i, y_k) + \sum_{i,j} c_{ij}\, d_\Gamma(x_i, x_j)$$

$$\text{s.t.} \quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in (V_\Gamma)^n$$

Γ : グラフ 〜 色のなす距離空間



最小ゼロ拡張問題(Karzanov 98)

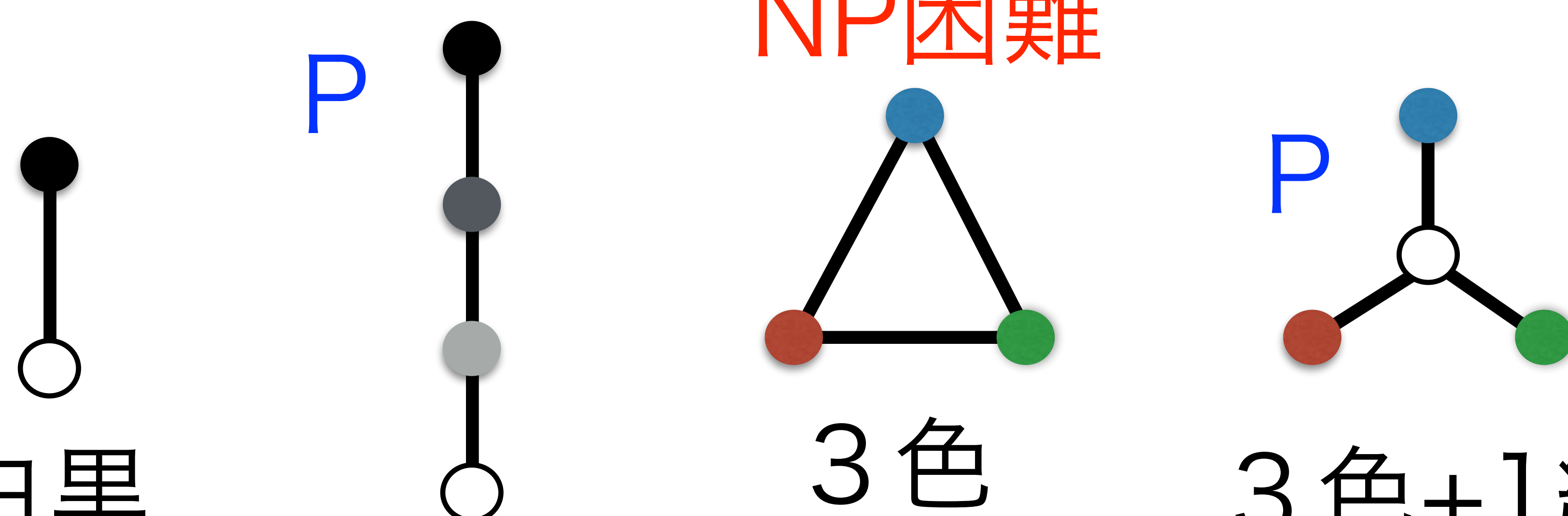
〜 カラー画像のノイズ除去

$$\text{Min.} \quad \sum_{i,k} b_{ik}\, d_\Gamma(x_i, y_k) + \sum_{i,j} c_{ij}\, d_\Gamma(x_i, x_j)$$

$$\text{s.t.} \quad x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in (V_\Gamma)^n$$

Γ : グラフ 〜 色のなす距離空間

P　P　NP困難　P



白黒　グレースケール　３色　３色+1緩和

Karzanov 98

どんなグラフなら最小ゼロ拡張問題は
多項式時間で解けるか？

Karzanov 98

どんなグラフなら最小ゼロ拡張問題は
多項式時間で解けるか？

定理 [Karzanov 98]
Γ が向き付け可能モジュラグラフでないなら
最小ゼロ拡張問題はNP困難.

Karzanov 98

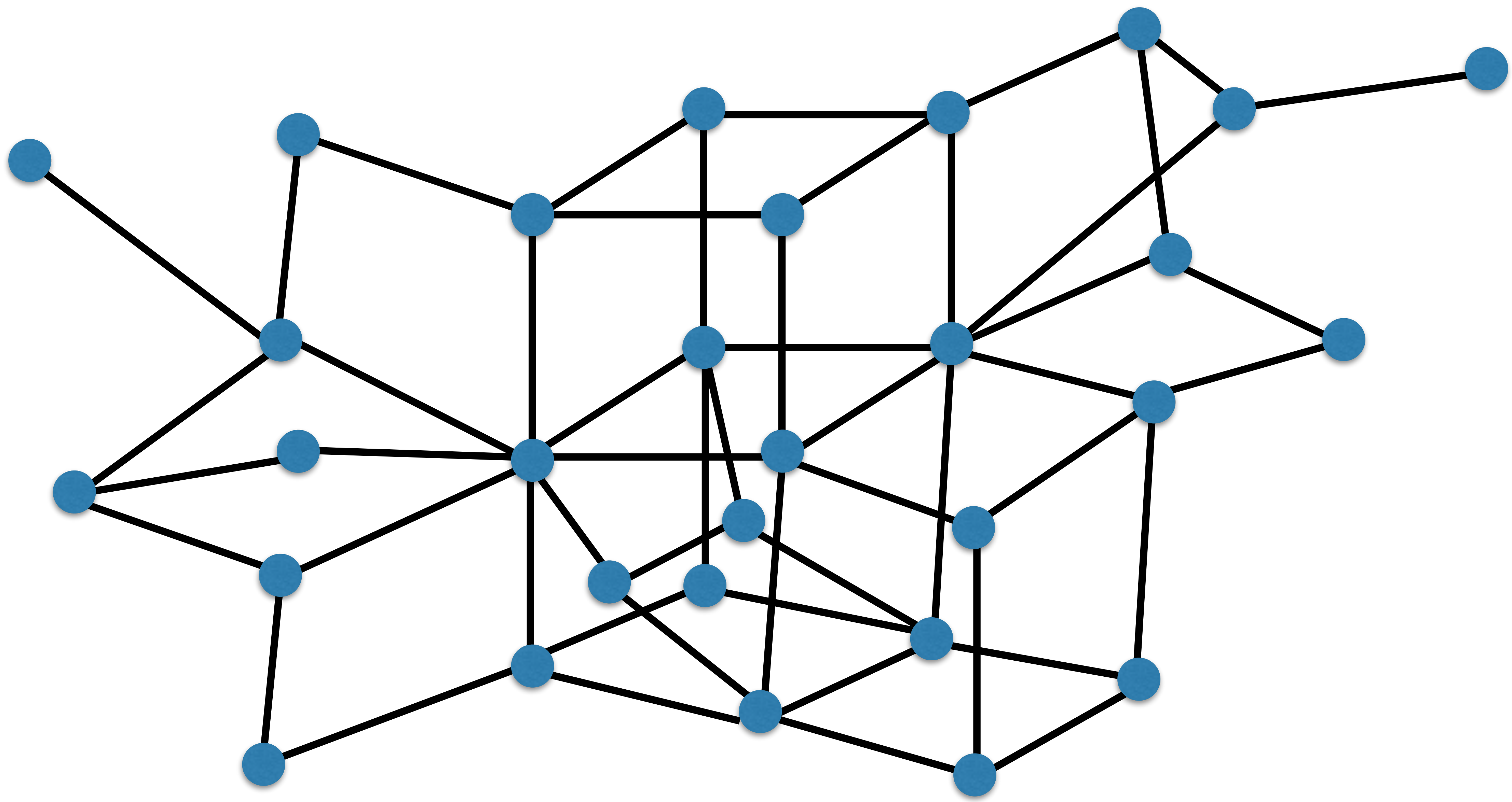
どんなグラフなら最小ゼロ拡張問題は
多項式時間で解けるか？

定理 [Karzanov 98]
Γ が向き付け可能モジュラグラフでないなら
最小ゼロ拡張問題はNP困難.

定理 [H. SODA'13]
Γ が向き付け可能モジュラグラフなら
最小ゼロ拡張問題は多項式時間で解ける.

向き付け可能モジュラグラフとは

例：パス，木，超立方体，グリッドグラフ，モジュラ束，メディアングラフ，それらの直積や貼り合わせ



新しい離散凸関数の提案

- モジュラ半束上の劣モジュラ関数

  VCSPが解ける (TZ定理の応用)

- 有向モジュラグラフ上のL凸関数

  最適性+降下方向 ⇒ 劣モ最小化

- $$\sum_{i,k} b_{ik}\, d_\Gamma(x_i, y_k) + \sum_{i,j} c_{ij}\, d_\Gamma(x_i, x_j)$$

  は, $\mathit{\Gamma} \times \mathit{\Gamma} \times \cdots \times \mathit{\Gamma}$ 上のL凸

- 劣モ，k-劣モ，L凸などを含む枠組み
- 多品種フローとの関連：

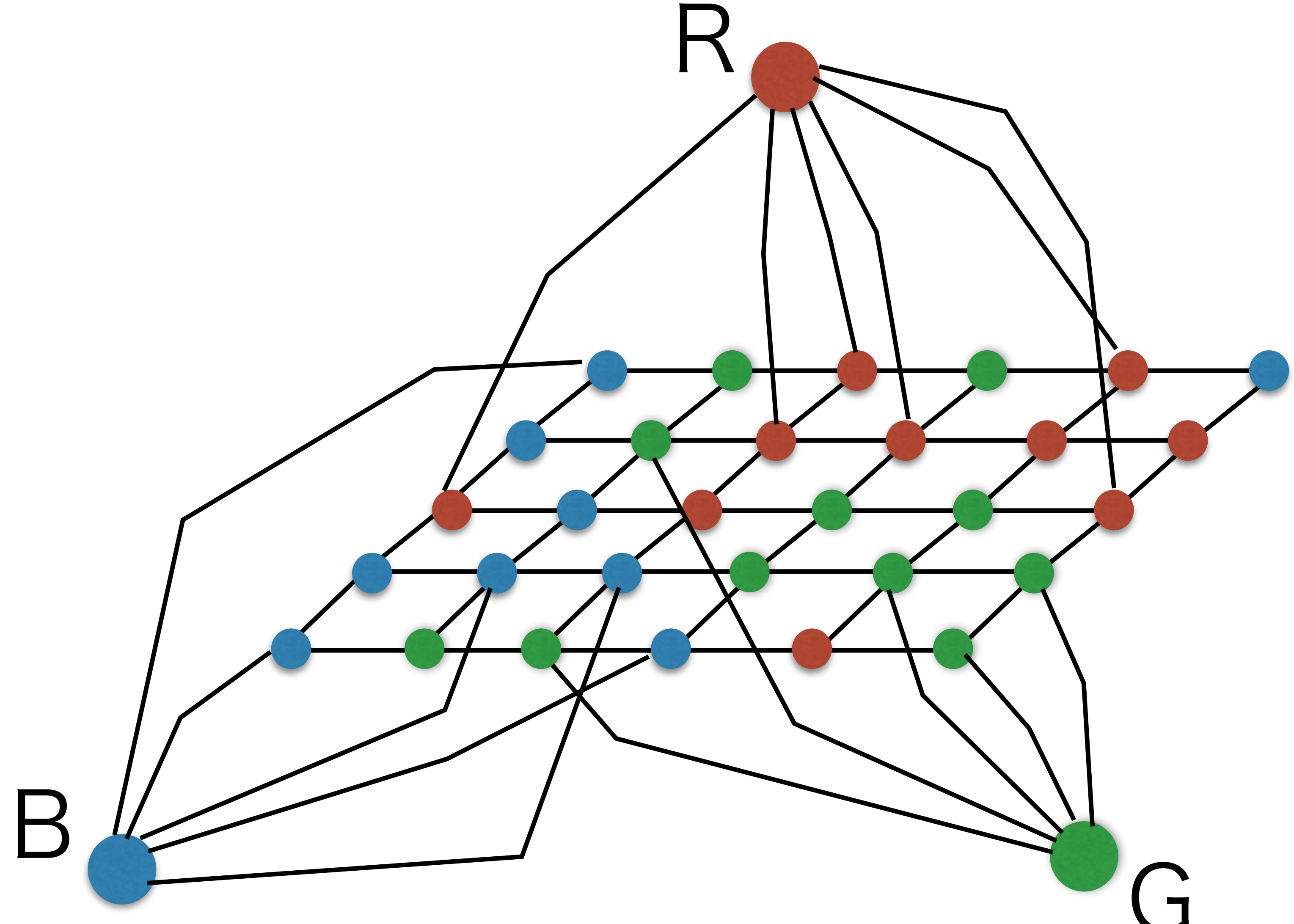
  最大多品種フロー = 最小 ＊＊＊＊＊

- 劣モ，k-劣モ，L凸などを含む枠組み
- 多品種フローとの関連：　　　新L凸最小化

最大多品種フロー = 最小 ＊＊＊＊＊

- 劣モ，k-劣モ，L凸などを含む枠組み
- 多品種フローとの関連：

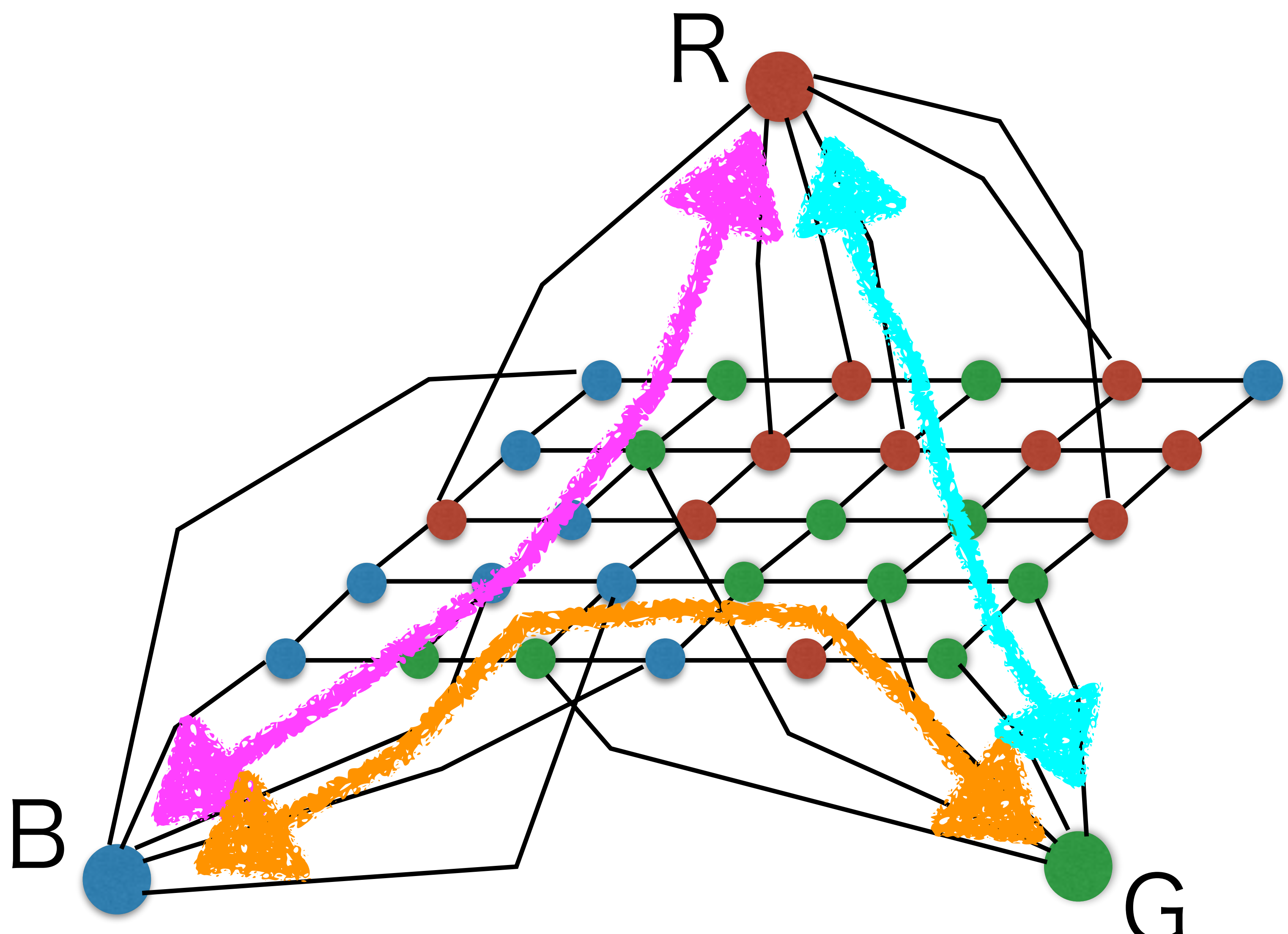
最大多品種フロー = 最小 ＊＊＊＊＊



- 劣モ，k-劣モ，L凸などを含む枠組み
- 多品種フローとの関連：

新L凸最小化

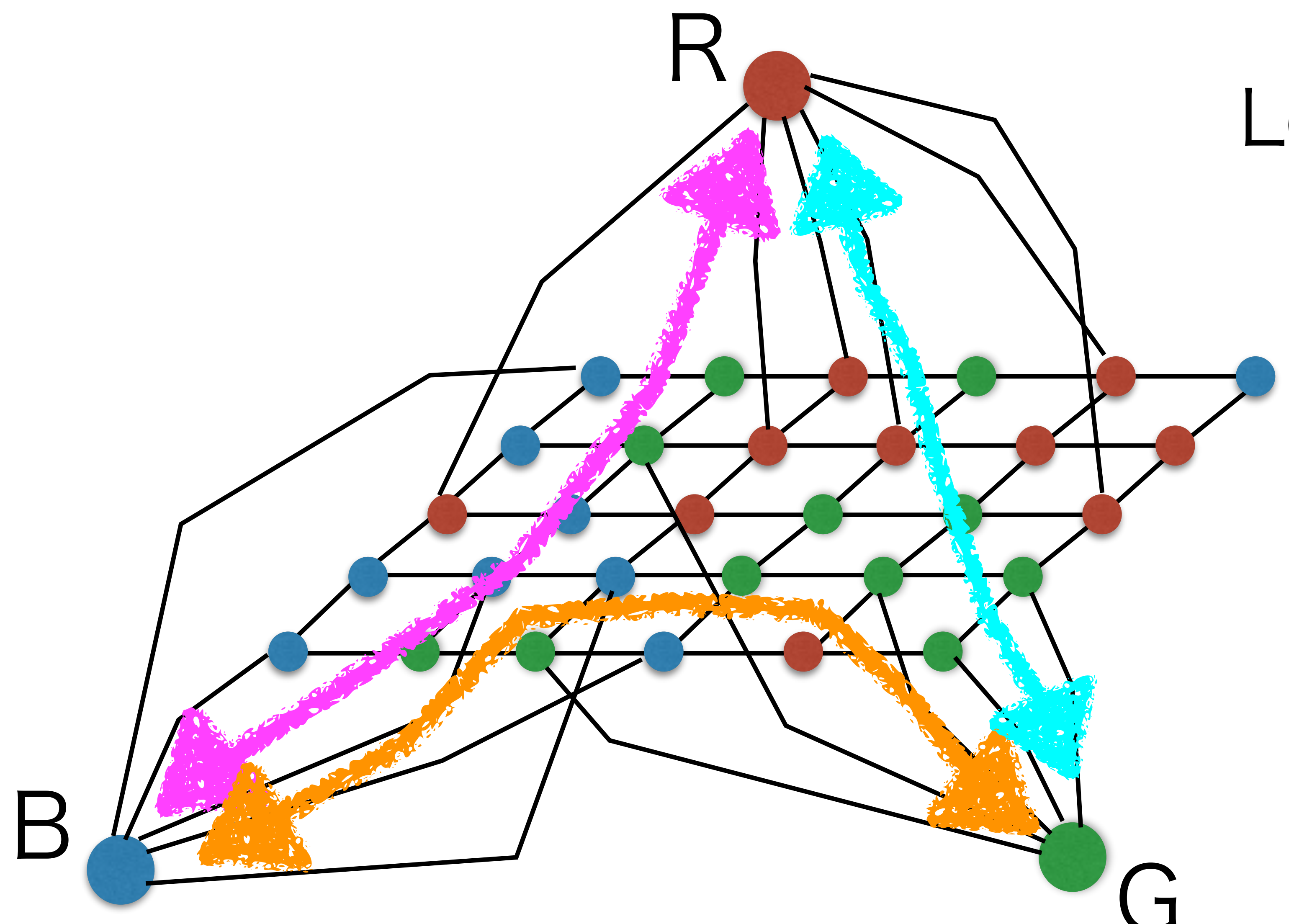
最大多品種フロー = 最小 ＊＊＊＊＊



- 劣モ，k-劣モ，L凸などを含む枠組み
- 多品種フローとの関連：

新L凸最小化

最大多品種フロー = 最小 ＊＊＊＊＊



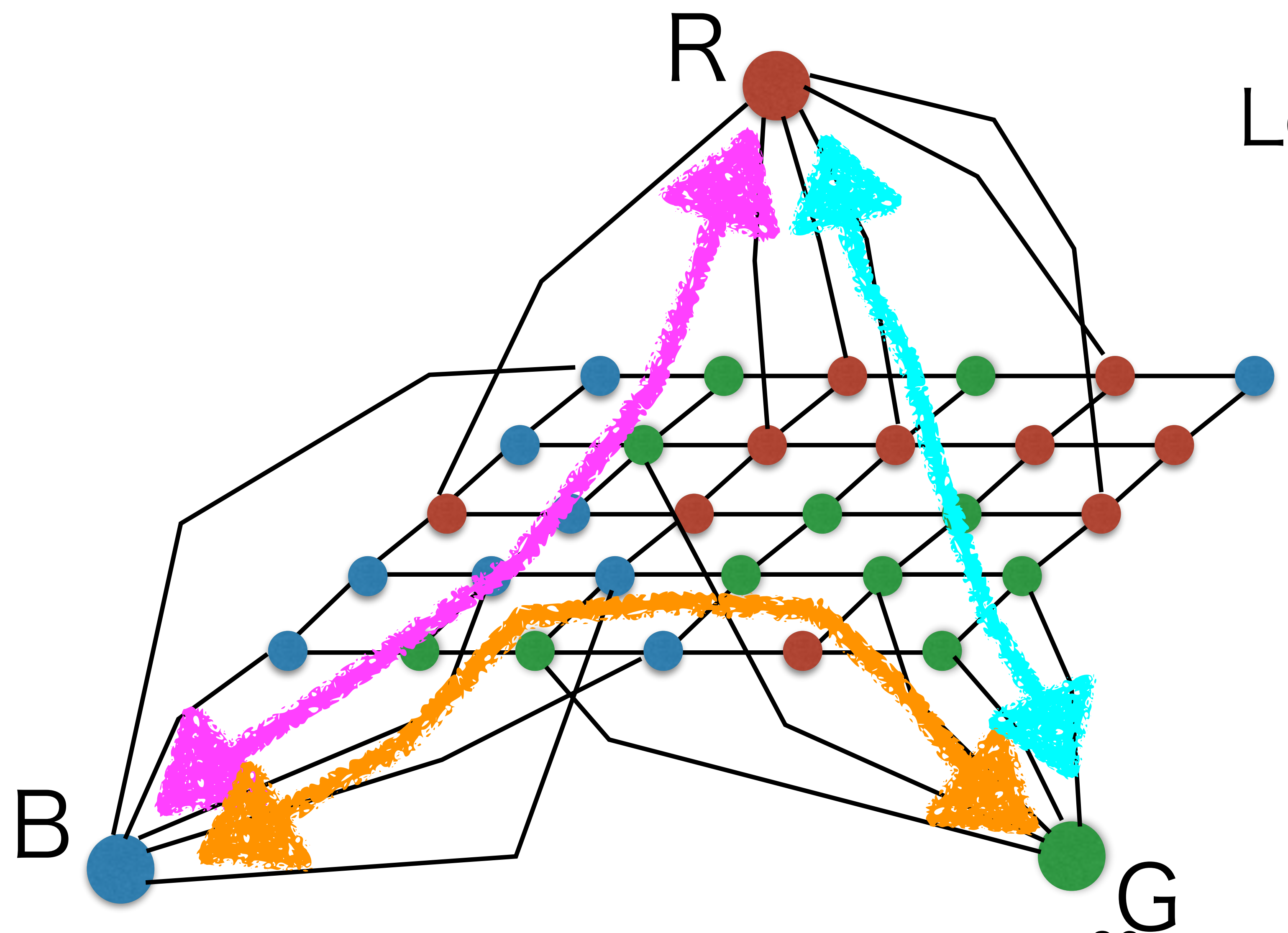
Lovasz-Cherkasskyの定理

Max.（R,B)-フロー
+ (B,G)-フロー
+ (R,G)-フロー
= Min. 3色+1緩和

- 劣モ，k-劣モ，L凸などを含む枠組み
- 多品種フローとの関連：

新L凸最小化

最大多品種フロー = 最小 ＊＊＊＊＊



Lovasz-Cherkasskyの定理

Max.（R,B)-フロー

+ (B,G)-フロー

+ (R,G)-フロー

= Min. 3色+1緩和

k-劣モ

ご静聴ありがとうございました.