数理最適化への招待

東京工業大学情報理工学研究科

数理・計算科学専攻

小島政和

２０１０日本数学会市民講演会

慶應義塾大学日吉キャンパス

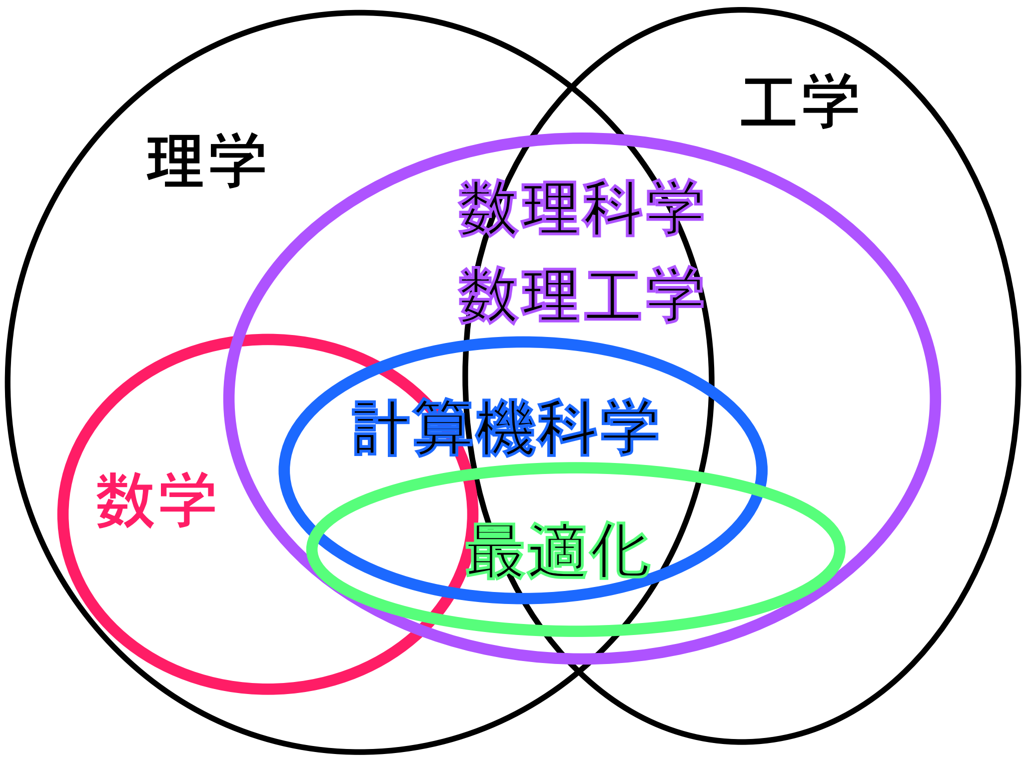
２０１０年3月２８日（日）

- 最適化問題（数理計画問題）は「与えられた制約条件の下でより良い目的を達成するための数理モデル」.
- 現実の問題を最適化問題に定式化し，それを解くアルゴリズム（数値計算手法）までを含めて

最適化 (Optimization)

数理計画法 (Mathematical Programming)

科学技術における最適化の位置づけ



- 主な道具は, 数学, 計算機科学
- 応用は理学，工学，経済，経営 · · ·
- 限られた資源，豊富な情報，複雑な状況で，目的を達成するための必須の科学技術

目次

目次

簡単な最適化問題の数値例

4 本の不等式条件 $x + 2y \leq 6,\ 2x + y \leq 6,\ x \geq 0,\ y \geq 0$ を満たす $x,\ y$ で，$x + y$ を最大にする $x,\ y$ を計算せよ．

この問題を，以下のように書く．

目的： $x + y \ \rightarrow\ $ 最大化

条件： $x + 2y \leq 6,\ 2x + y \leq 6,\ x \geq 0,\ y \geq 0.$

- 2 変数 $x,\ y$ の 線形 最適化問題の例
- $x + y$ — 目的関数
- 以下は，4 変数 x_1, x_2, x_3, x_4 の整数線形最適化問題の例

目的： $3x_1 + 4x_2 + 2x_3 - 2x_4 \ \rightarrow\ $ 最大化

条件： $2x_1 + 3x_2 + 4x_3 + x_4 \leq 10,\ 3x_1 + 2x_2 - x_3 + 6x_4 \leq 8,$

$x_1,\ x_2,\ x_3,\ x_4$: 非負 (0 以上) の整数.

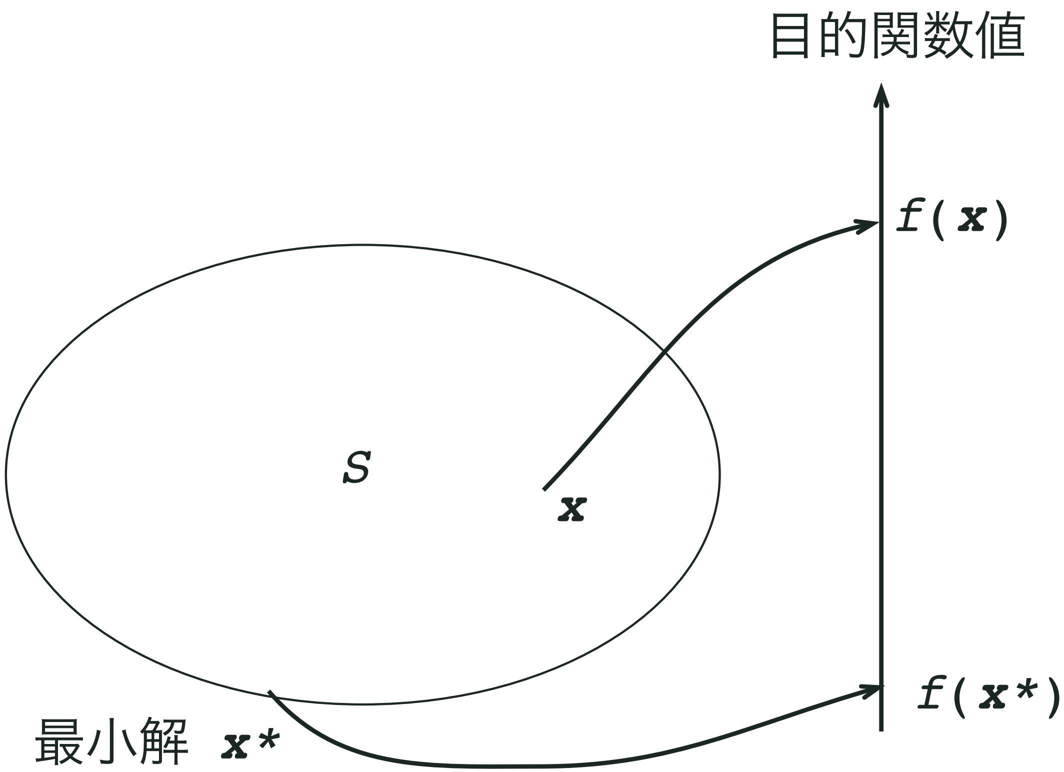
- 変数と条件式が 100, 1000, 10000 個 $\cdots$ 解けるだろうか？
- 実社会で役に立つのか？

一般の最適化問題

$$\boxed{\text{目的: } f(\boldsymbol{x}) \to \text{最小 (or 大) 化, 条件: } \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in S.}$$

ただし, 各 x_j は変数, S : 許容領域, 実行可能領域, 制約集合

$f : \boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n) \to$ 実数値, 目的関数



例 : $n = 2 \Rightarrow$ 2 次元平面,
$S =$ 港北区, $\boldsymbol{x}$ 地点,
$f(\boldsymbol{x})$: 高度
$f(\boldsymbol{x})$: 地価
$f(\boldsymbol{x})$: ここから $\boldsymbol{x}$ までの距離 (最大化)

一般の最適化問題

$$\boxed{\text{目的: } f(\boldsymbol{x}) \to \text{最小 (or 大) 化, 条件: } \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in S.}$$

ただし, 各 x_j は変数, S： 許容領域, 実行可能領域, 制約集合

$$f : \boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n) \to \text{実数値, 目的関数}$$

1.2 最適化問題の難しさ

一般に, 最適化問題を扱うには以下の点に注意：

(a) 解は存在するか.

(b) 解（あるいは近似解）は計算できるか？

(c) 解（あるいは近似解）を効率よく計算するにはどのような手法を用いればよいか？

有限の時間では有限個の点でしか目的関数の値を評価することしか出来ない.

$\Longrightarrow$ 万能手法はない

一般の最適化問題

$$\text{目的: } f(\boldsymbol{x}) \to \text{最小 (or 大) 化, 条件: } \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in S.$$

ただし, 各 x_j は変数, S： 許容領域, 実行可能領域, 制約集合

$$f : \boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n) \to \text{実数値, 目的関数}$$

1.3 数理最適化問題の分類

通常, 許容領域 S は以下の形で与えられる.

$$S = \left\{ \boldsymbol{x} \in R^n \ : \ \begin{array}{l} g_j(\boldsymbol{x}) \leq 0 \ (j = 1, 2, \ldots, p), \\ h_k(\boldsymbol{x}) = 0 \ (k = 1, 2, \ldots, q), \ \text{その他の条件} \end{array} \right\}$$

その他の条件は等式や不等式では表しにくい整数条件や組合せ的な条件を表すために使われる.

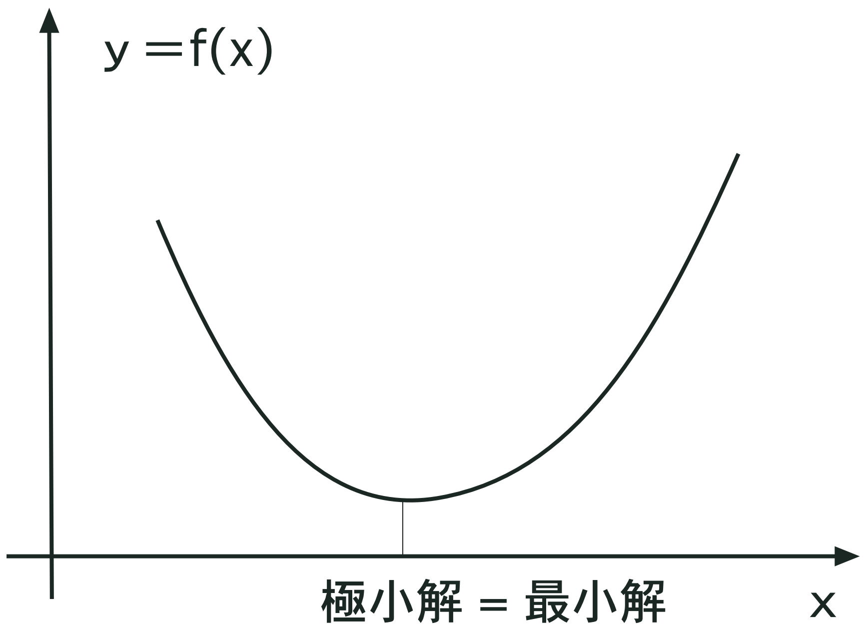
g_j, h_k やその他の条件および目的関数 f の性質で分類；

線形最適化問題, 凸２次最適化問題, 凸最適化問題, $\cdots$
非凸２次最適化問題, 非線形最適化問題, $\cdots$
整数線形最適化問題, 組合せ最適化問題, 離散最適化問題, $\cdots$

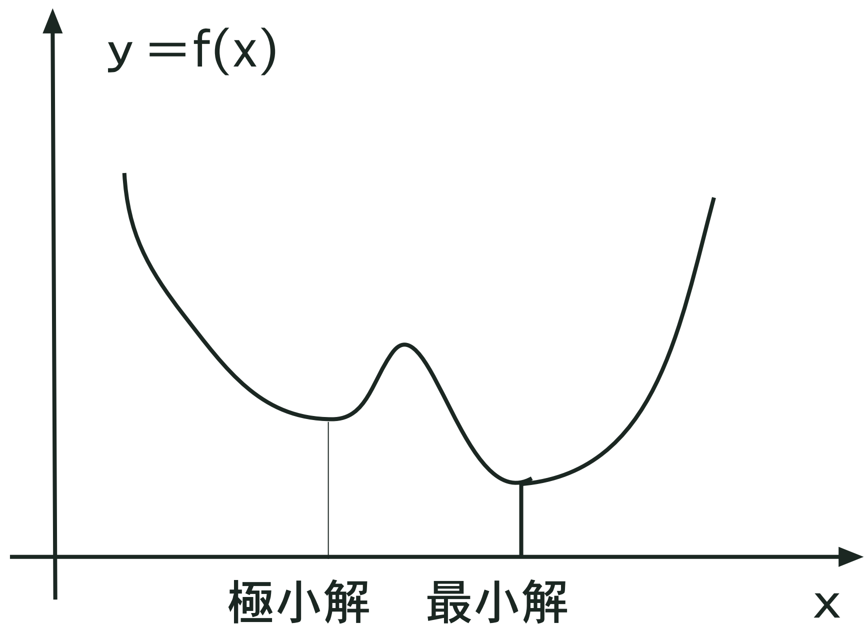
凸性，極小解，(大域的) 最小解

- 凸性のある問題 — 局所的に小さい方向に動くことによって，大域的な最小解に到達出来る問題．目が見えなくても杖を頼りに大域的な最小解に到達出来る問題
- 凸性の無い問題は，理論的にも，数値計算上も，難しい．多くのアルゴリズムは局所的な改善を繰り返す．

凸性のある１次元最小化



凸性の無い１次元最小化



- 特に，線形（一次）は凸

最適化問題の例 (3 変数 x, y, z) — 1

線形最適化 — 最も基本的な問題, (商用) ソフト, 凸性有り

目的： $3x + 4y + 2z \;\rightarrow\;$ 最大化

条件： $2x + 3y + 4z \leq 10,\; 3x + 2y - z \leq 8,$

$x \geq 0,\; y \geq 0, z \geq 0.$

整数線形最適化 — 応用上非常に重要, (商用) ソフト, 凸性無し

目的： $3x + 4y + 2z \;\rightarrow\;$ 最大化

条件： $2x + 3y + 4z \leq 10,\; 3x + 2y - z \leq 8,$

$x,\; y,\; z$: 非負の整数.

２次最適化問題 — 一般には凸性無し

目的： $x + 3x^2 - 4xy - 2y + y^2 + 2z^2 + 4z \;\rightarrow\;$ 最小化

条件： $2x + 3xy - 5y + 4z^2 \leq 10,\; 3x + 2y^2 - z \leq 8,$

$x^2 + 3y^2 + 5z^2 \leq 12.$

最適化問題の例 (3 変数 x, y, z) — 2

一般の非線形最適化問題 — (商用) ソフト, 一般には 凸性無し

目的： $3x + 4\cos y + 2\log z \ \rightarrow$ 最大化

条件： $2x + 3y^2 + 4z \leq 10, \ 3e^x + 2y - z \leq 8,$

$x \geq 0, \ y \geq 0, z \geq 0.$

目次

企業の経済活動のさまざまな局面

- 生産計画
- 施設配置，輸送
- 人員配置
- 仕事のスケジューリング
- 投資，金融商品の開発
- ...

工学分野

- 建造物の構造最適化
- LSI の設計
- ...

2.1 生産計画

$$\left.\begin{array}{l}\text{原料}\\ \text{エネルギー}\\ \text{労働力}\\ \cdots\end{array}\right\} \Longrightarrow \left\{\begin{array}{l}\text{製造}\\ \text{在庫}\\ \text{輸送}\\ \cdots\end{array}\right\} \Longrightarrow \text{顧客}$$

基本的，典型的な生産計画モデル — 石油精製，セメントの生産等

m 種類の原材料から n 種類の製品を生産

a_{ij} : 製品 j を 1 単位作るのに必要な原材料 i の量.

c_j : 製品 j 1 単位から得られる利潤. b_i : 原材料 i の利用可能量

x_j : 製品 j の生産量 — 変数.

$$\boxed{\begin{array}{rl}\text{目的:} & c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \text{ (総利潤)} \ \longrightarrow \ \text{最大化}\\ \text{条件:} & a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n \le b_i \ (i = 1, 2, \ldots, m),\\ & x_j \ge 0 \ (j = 1, 2, \ldots, n).\end{array}}$$

線形最適化問題 $\Longrightarrow$ 後述

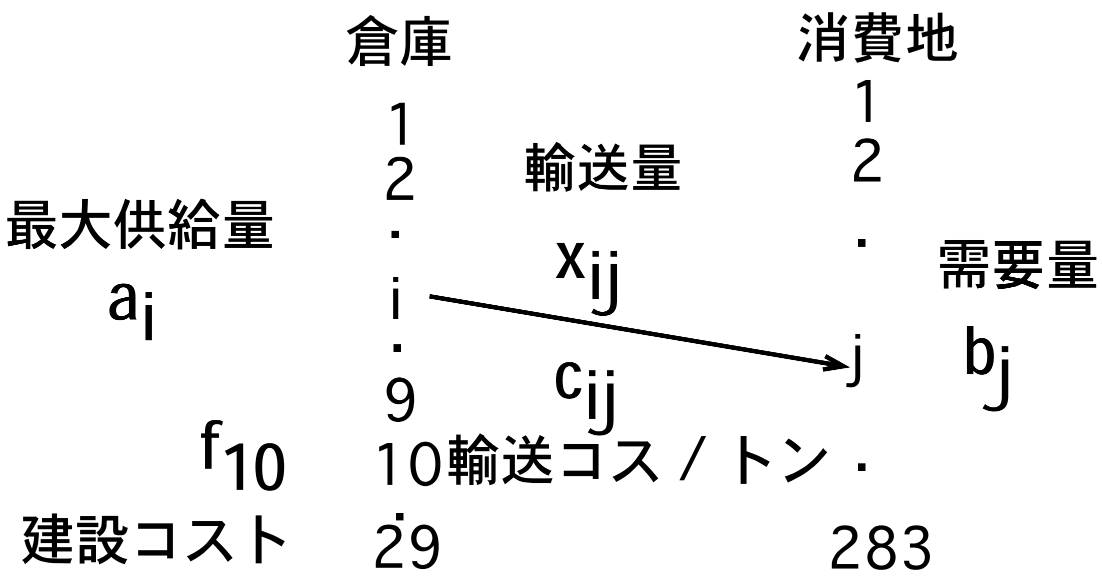
2.2. 施設配置，輸送

全国に倉庫 9，消費地 283．需要増加で 20 の候補地の数カ所に倉庫を建設．需要を満たし，輸送に関わるコストを最小化.

- a_i : 倉庫 i の最大供給量 (トン/日) $(i = 1, 2, \ldots, 29)$
- b_j : 消費地 j での需要量 (トン/日) $(j = 1, 2, \ldots, 283)$
- c_{ij} : 倉庫 i から消費地 j への輸送コスト (千円/トン)
- f_i : 倉庫 i の建設コスト + 維持費 (千円/日)

制御できる変量

- $S \subset \{10, \ldots, 29\}$:建設候補　$\bullet x_{ij}$:$i \to j$ への輸送量 (トン/日)



$\Rightarrow$ 整数線形最適化 (0-1 変数を含む線形最適化) 問題

$$y_i = \begin{cases} 1 & \text{倉庫を建てる} \\ 0 & \text{倉庫を建てない} \end{cases}$$

2.3 人員配置

- 航空会社の乗務員
  考慮すべき要因 — 空港，飛行機，乗務員，フライトスケジュール等
- 病院での医者と看護士のスケジュール
- コンビニ，飲食店等でのアルバイト学生の手配
- ···

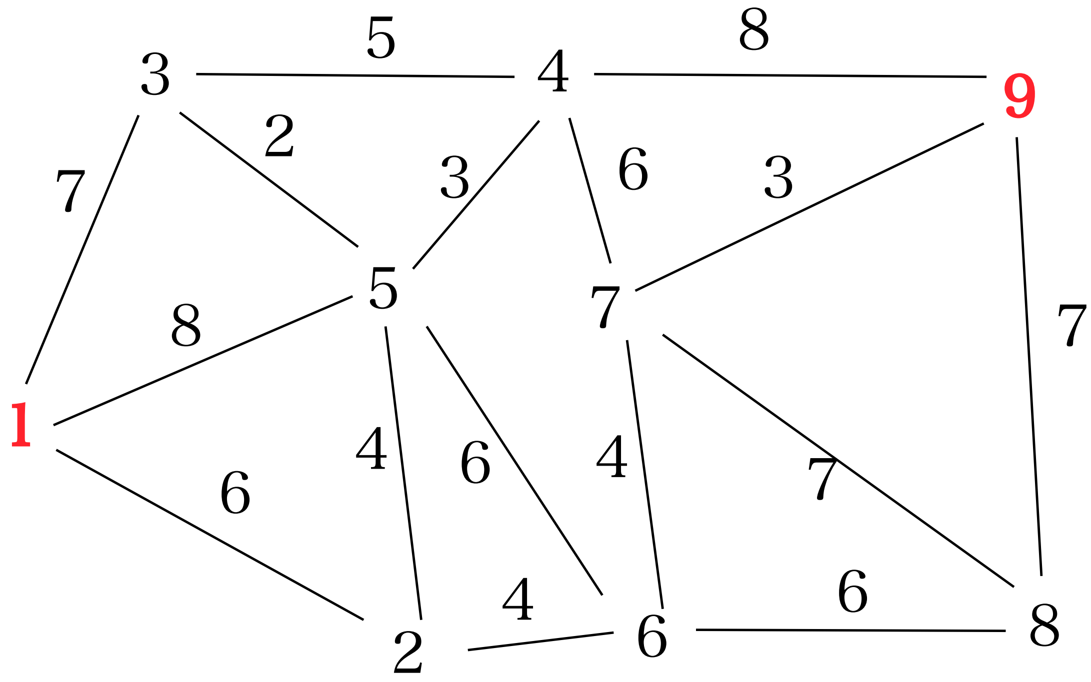
2.4 金融関係 — いわゆる金融工学

- 投資
- 資金の調達
- 金融商品の評価，新商品の開発
- ···

2.5 ネットワーク上の最適化問題の例

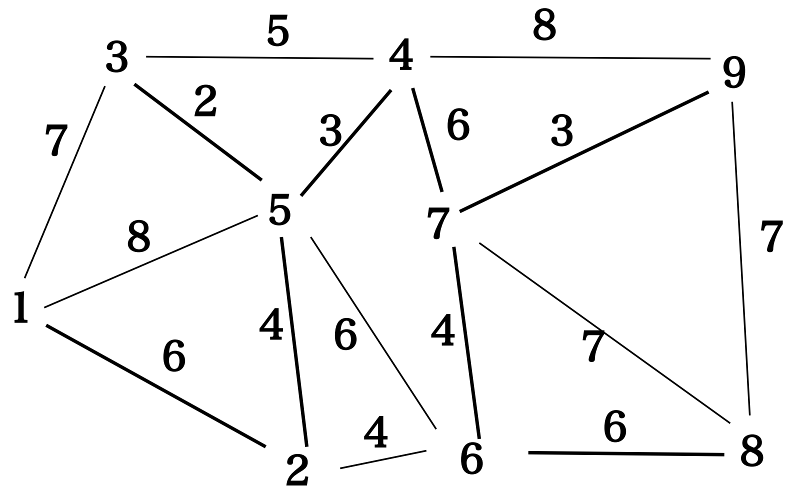
最短路問題 ：

都市 1 から都市 9 への最短（最短時間）路を計算せよ．



- 乗り換え探索はこれを複雑にした問題

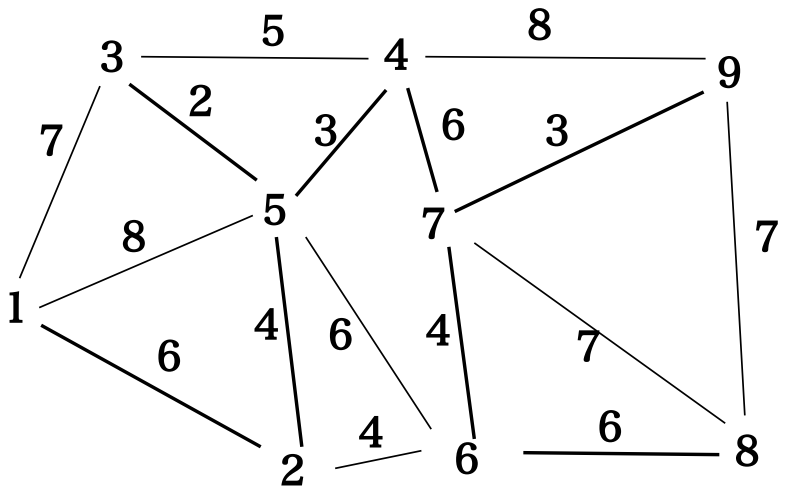
巡回セールスマン問題



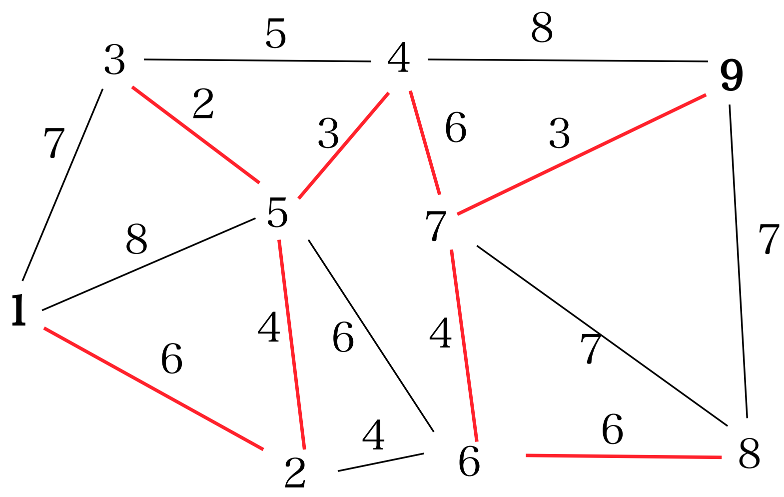
9都市すべてを最短時間で回りたい

- 前述の最短路問題よりはるかかに難しい問題.

最小木問題



９都市すべてを結ぶバス路線網を設計したい．ただし，バスの運転手（複数）の総運転時間を最小にしたい．　　例えば



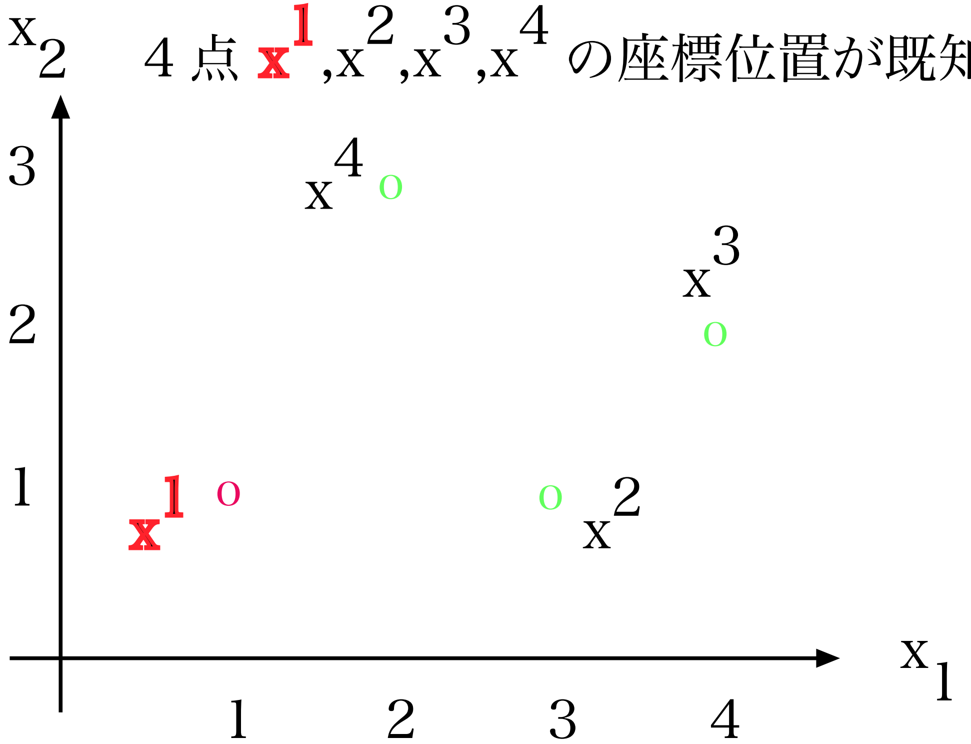
- 簡単に解ける問題

総合運転時間＝ 2+3+3+4+4+4+6+6 = 32

センサネットワークの位置決め問題 — 1

座標位置，距離

4 点 x¹,x²,x³,x⁴ の座標位置が既知 $\Longrightarrow$ 互いの距離



$\|\boldsymbol{x}^i - \boldsymbol{x}^j\| = \boldsymbol{x}^i$ と $\boldsymbol{x}^j$ の距離

> $\boldsymbol{x}^2, \boldsymbol{x}^3, \boldsymbol{x}^4$ の位置が既知，
> $\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{x}^2, \boldsymbol{x}^3, \boldsymbol{x}^4$ 間の距離が既知
>
> $\Downarrow$
>
> $\boldsymbol{x}^1$ の位置を求めよ

例えば，$\boldsymbol{x}^1 = (x^1_1, x^1_2)$，$\boldsymbol{x}^4 = (x^4_1, x^4_2)$ とすると，

$\boldsymbol{x}^1$ と $\boldsymbol{x}^4$ の距離の 2 乗 $= (x^1_1 - x^4_1)^2 + (x^1_2 - x^4_2)^2 = 1^2 + 2^2 = 5$

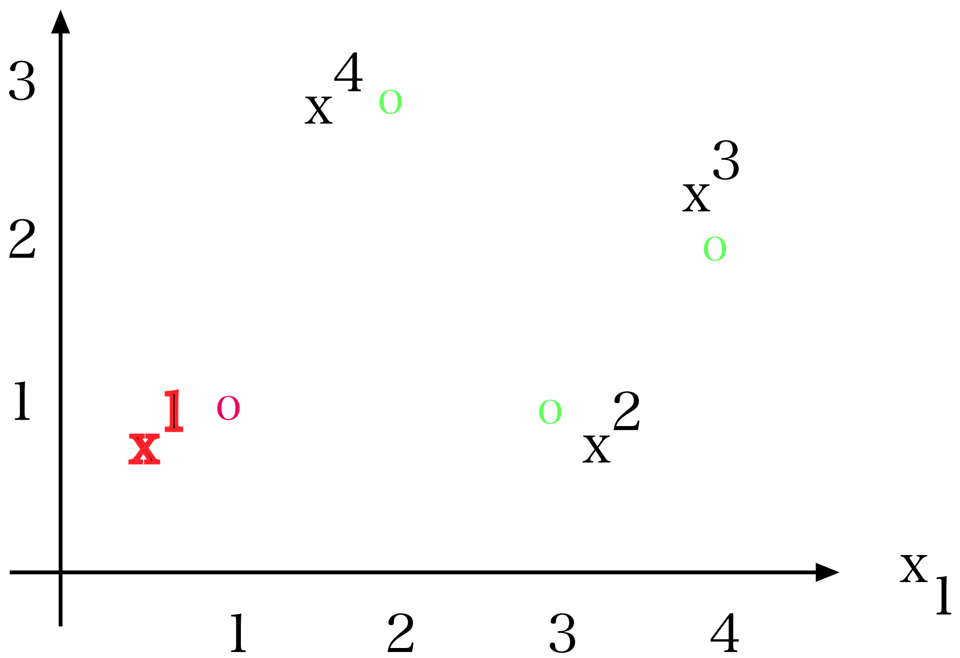
(ピタゴラスの定理)．この例では，

- x^1_1, x^1_2 を変数とする 2 次方程式 3 本．
- コンパスで作図すると解ける．

センサネットワークの位置決め問題 — 1

座標位置，距離

4 点 x^1, x^2, x^3, x^4 の座標位置が既知



$\Longrightarrow$ 互いの距離

$\|\boldsymbol{x}^i - \boldsymbol{x}^j\| = \boldsymbol{x}^i$ と $\boldsymbol{x}^j$ の距離

$\boldsymbol{x}^2, \boldsymbol{x}^3, \boldsymbol{x}^4$ の位置が既知，
$\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{x}^2, \boldsymbol{x}^3, \boldsymbol{x}^4$ 間の距離
が既知

$\Downarrow$

$\boldsymbol{x}^1$ の位置を求めよ

センサネットワークの位置決め問題

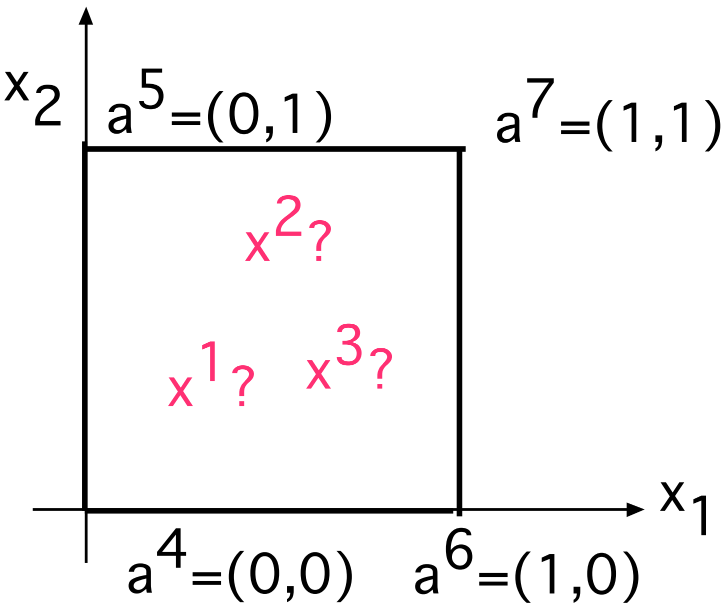
- $n+m$ 個の点（センサ+アンカー）が平面上，あるいは，3 次元空間内に配置されている．
- アンカーと呼ばれる m 個の点の座標は分かっている．
- 各点について，その近くにある点までの距離は分かっている．

このとき，すべてのセンサの座標を求めよ．

センサネットワークの位置決め問題 — 2

例： 距離行列とアンカーの座標位置

	センサ			アンカー			
センサ	1	2	3	4	5	6	7
1		0.44	0.54	0.42			
2	0.44		0.36		0.58		0.58
3	0.54	0.36				0.54	
位置座標	$\boldsymbol{x}^1$?	$\boldsymbol{x}^2$?	$\boldsymbol{x}^3$?	$\boldsymbol{a}^4 =$ (0,0)	$\boldsymbol{a}^5 =$ (0,1)	$\boldsymbol{a}^6 =$ (1,0)	$\boldsymbol{a}^7 =$ (1,1)



$\|\boldsymbol{x}^1 - \boldsymbol{x}^2\|^2 = 0.44^2$ すなわち

$(x_1^1 - x_1^2)^2 + (x_2^1 - x_2^2)^2 = 0.44^2$

$\|\boldsymbol{x}^1 - \boldsymbol{a}^4\|^2 = 0.42^2$ すなわち

$(x_1^1)^2 + (x_2^1)^2 = 0.42^2$

$\cdots\cdots\cdots \Rightarrow$ 多変数２次方程式系

センサネットワークの位置決め問題 — 3

例： 距離行列とアンカーの座標位置

	センサ			アンカー			
センサ	1	2	3	4	5	6	7
1		0.44	0.54	0.42			
2	0.44		0.36		0.58		0.58
3	0.54	0.36				0.54	
位置座標	$\boldsymbol{x}^1$?	$\boldsymbol{x}^2$?	$\boldsymbol{x}^3$?	$\boldsymbol{a}^4 =$ (0,0)	$\boldsymbol{a}^5 =$ (0,1)	$\boldsymbol{a}^6 =$ (1,0)	$\boldsymbol{a}^7 =$ (1,1)

多変数２次方程式系 $\Rightarrow$ 多項式最適化問題（後述）

$\|\boldsymbol{x}^1 - \boldsymbol{x}^2\|^2 = 0.44^2$ すなわち $(x^1_1 - x^2_1)^2 + (x^1_2 - x^2_2)^2 = 0.44^2$,

$\|\boldsymbol{x}^1 - \boldsymbol{x}^3\|^2 = 0.54^2$, $\|\boldsymbol{x}^2 - \boldsymbol{x}^3\|^2 = 0.36^2$, $\|\boldsymbol{x}^1 - \boldsymbol{a}^4\|^2 = 0.42^2$,

$\|\boldsymbol{x}^2 - \boldsymbol{a}^5\|^2 = 0.58^2$, $\|\boldsymbol{x}^2 - \boldsymbol{a}^7\|^2 = 0.58^2$, $\|\boldsymbol{x}^3 - \boldsymbol{a}^6\|^2 = 0.54^2$.

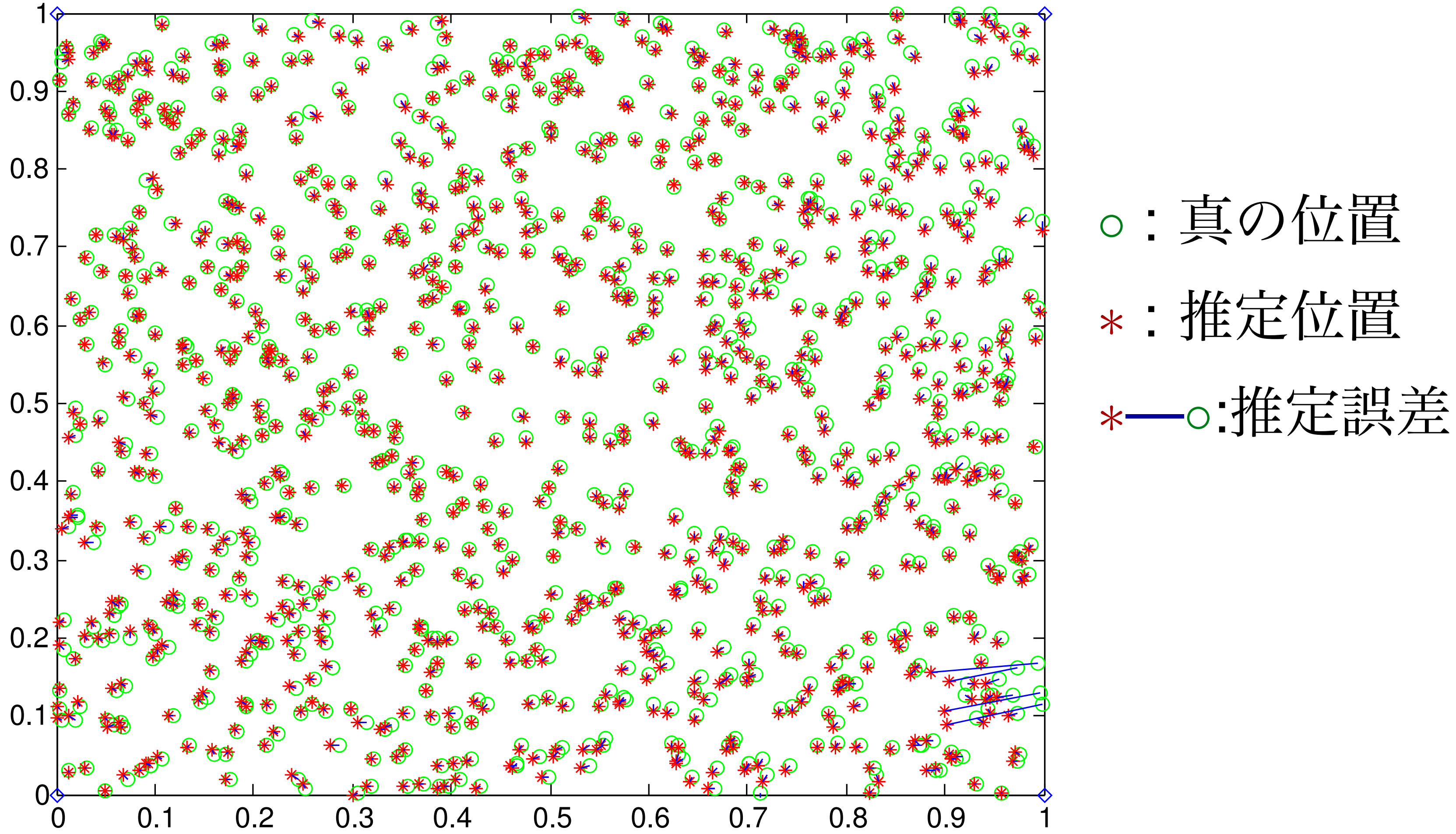
- この方程式系を解くことにより，$\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{x}^2, \boldsymbol{x}^3$ を計算する．
- 測定距離に誤差 $\Rightarrow$ 右辺と左辺の差の絶対値の和
  $\left|\|\boldsymbol{x}^1 - \boldsymbol{x}^2\|^2 - 0.44^2\right| + \cdots + \left|\|\boldsymbol{x}^3 - \boldsymbol{a}^6\|^2 - 0.54^2\right|$ の最小化

センサネットワークの位置決め問題 — 4

計算実験

正方形上にランダムに 1000 センサ，4 隅に 4 アンカー．

0.1 以下の近さにあれば距離が分かる．平均 10%の距離測定誤差



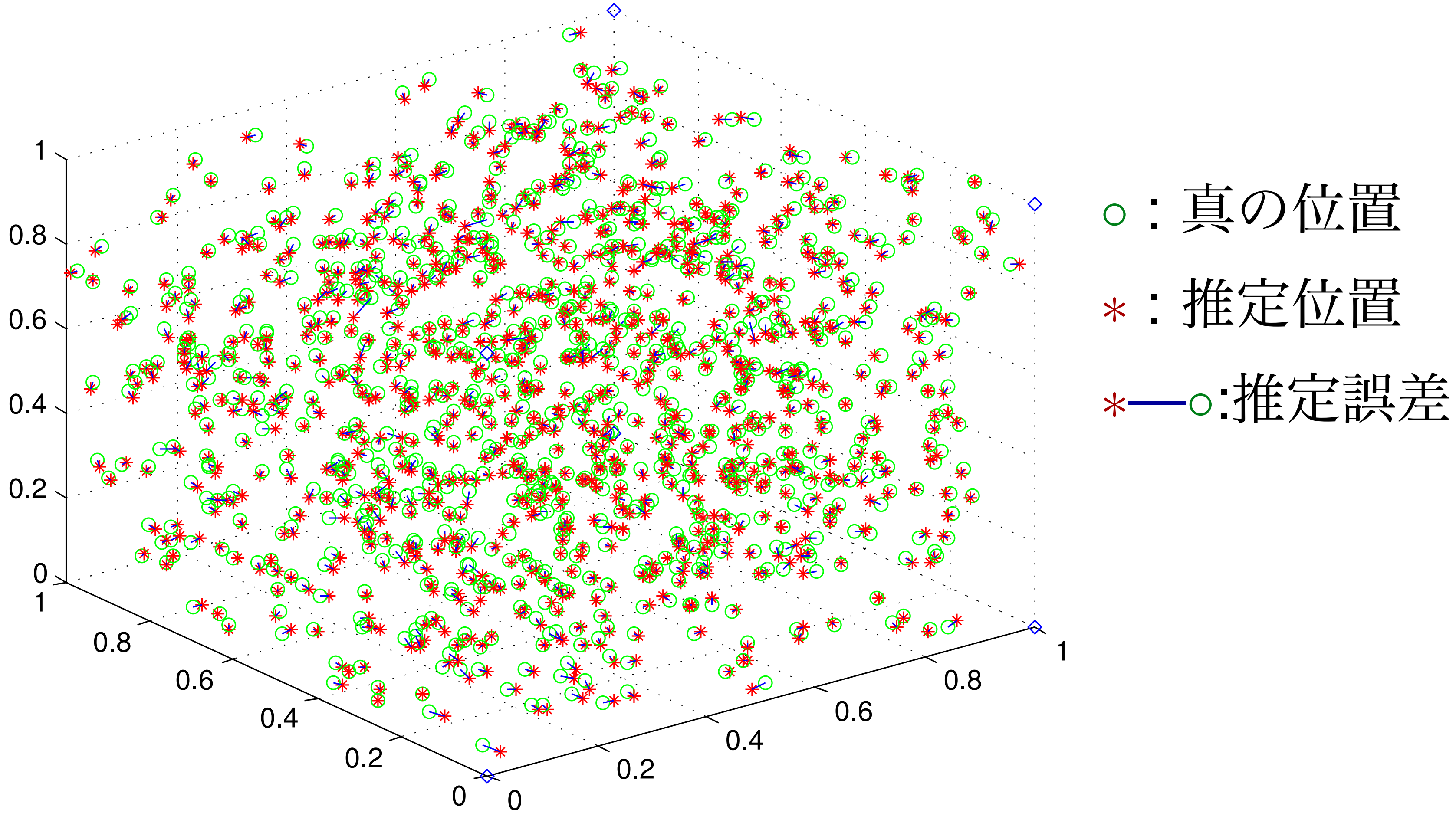
計算時間：約 30 秒

センサネットワークの位置決め問題 — 5

計算実験

立方体上にランダムに 1000 センサ， 8 隅に 8 アンカー．

0.3 以下の近さにあれば距離が分かる． 平均 10%の距離測定誤差



計算時間 : 約 60 秒

目次

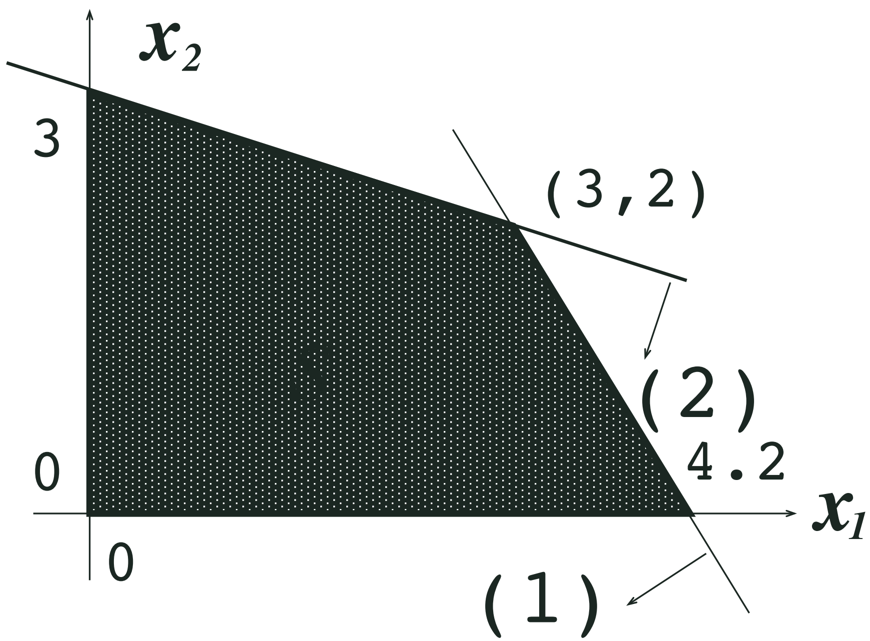
線形最適化問題 (Linear Program, LP と略) の例

$$
\begin{array}{llll}
\text{目的：} & 4x_1 + 7x_2 & \to & \text{最大化} \\
\text{条件：} & 5x_1 + 3x_2 & \leq 21 & -- \ (\mathbf{1}) \\
 & x_1 + 3x_2 & \leq 9 & -- \ (\mathbf{2}) \\
 & x_1 \geq 0, & x_2 \geq 0. &
\end{array}
$$

- 一般には n 個の変数に関する一次式を合計で m 個の一次等式・一次不等式条件の元で最大化あるいは最小化する問題. 上述の問題は $n = 2$, $m = 4$.
- 最適化の中核をなしており，他の最適化問題を解くのにも使われる．実用上も最も重要．大規模な問題 ($n,\ m \geq 10,000$) を解く商用ソフトウェア.
- 計算実験結果は後述

線形最適化問題 (Linear Program, LP と略) の例

$$\begin{array}{llll} \text{目的：} & 4x_1 + 7x_2 & \to & \text{最大化} \\ \text{条件：} & 5x_1 + 3x_2 & \leq 21 & --\ (\mathbf{1}) \\ & x_1 + 3x_2 & \leq 9 & --\ (\mathbf{2}) \\ & \multicolumn{3}{l}{x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0.} \end{array}$$

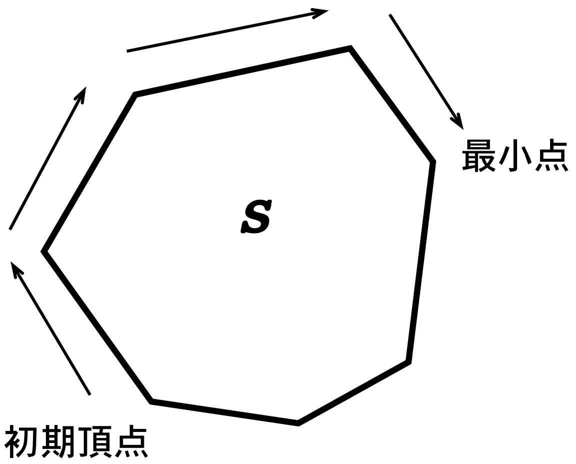


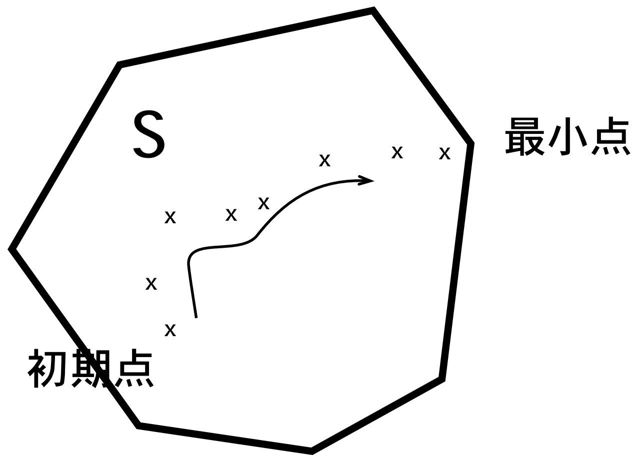
(a) 許容領域 S は直線で囲まれた多角形 $\Longrightarrow$ 有限個の頂点

(b) 最大は頂点で達成 $\Rightarrow$ 有限回の演算で計算可能

$\Longrightarrow$ シンプレックス法（Dantzig, 1947 年)

3.2 “シンプレックス”(1947)　対　“内点法”(1984)





頂点を辿りながら目的関数値を改善して，最適な頂点に到達

なるべく境界から離れながら，最適解に近づく

- シンプレックス法 は，有限回で最適解を計算することが保証されているが，多項式オーダの（変数の個数，制約条件の個数の多項式の回数で計算が終了することが保証されている) 方法ではない．
- 内点法は多項式オーダ
- 超大規模な線形最適化問題では，シンプレックス法より，内点法が速い

3.3 計算実験結果

線形最適化問題 (n 変数 $x_1, \ldots, x_n$, m 個の線形等式・不等式)

目的: $c_1 x_1 + \cdots + c_n x_n \rightarrow$ 最小化

条件: $a_{i1} x_1 + \cdots + a_{in} x_n \geq b_i$ or $= b_i$ $(i = 1, \ldots, \boldsymbol{m})$.

問題	n: 変数	m:等式, 不等式	非ゼロの係数 ⇒ 疎
cont1	$40,398$	$160,793$	$399,991$
rail4284	$1,092,610$	$4,284$	$12,372,358$
spal004	$321,696$	$10,203$	$46,167,908$

疎 — ほとんどの a_{ij} はゼロ

計算時間 (秒)

	内点法		シンプレックス法	
	CPLEX	xpress-mp	CPLEX	xpress-mp
cont1	952	2,389	2,174	2,229
rail4284	239	411	5,235	8,928
spal004	4,669	$>$ 200,000		

目次

多項式最適化問題の例：globallib からのベンチマーク問題

$$
\begin{aligned}
\text{目的:}\quad & -6.3x_5x_8 + 5.04x_2 + 0.35x_3 + x_4 + 3.36x_6 \to \text{最小化} \\
\text{条件:}\quad & -0.820x_2 + x_5 - 0.820x_6 = 0, \\
& 0.98x_4 - x_7(0.01x_5x_{10} + x_4) = 0,\ x_1x_{11} - 3x_8 = -1.33, \\
& -x_2x_9 + 10x_3 + x_6 = 0,\ x_{10}x_{14} + 22.2x_{11} = 35.82, \\
& x_5x_{12} - x_2(1.12 + 0.132x_9 - 0.0067x_9^2) = 0, \\
& x_8x_{13} - 0.01x_9(1.098 - 0.038x_9) - 0.325x_7 = 0.574, \\
& \mathsf{lbd}_i \le x_i \le \mathsf{ubd}_i\ (i = 1, 2, \ldots, 14).
\end{aligned}
$$

- 一般には変数 $x_1, \ldots, x_n$ に関する多項式等式・不等式条件の下で，多項式を最小化する問題．上の問題は $n = 14$.
- センサネットワーク問題は多項式最適化問題.
- 凸性はない！ 局所的な改良では大域的な最小解に到達できない．制約条件を満たす $x_1, \ldots, x_n$ を求めることすら困難！
- 凸性のある問題で近似して解く — 最近のホットな分野の 1 つ
- 多項式最適化問題を解く計算手法 $\Leftarrow$ 最近発展した Sum of Squares of Polynomials と多項式の疎性)

多項式最適化問題の例：globallib からのベンチマーク問題

目的: $-6.3x_5x_8 + 5.04x_2 + 0.35x_3 + x_4 + 3.36x_6 \to$ 最小化

条件: $-0.820x_2 + x_5 - 0.820x_6 = 0,$

$0.98x_4 - x_7(0.01x_5x_{10} + x_4) = 0,\ x_1x_{11} - 3x_8 = -1.33,$

$-x_2x_9 + 10x_3 + x_6 = 0,\ x_{10}x_{14} + 22.2x_{11} = 35.82,$

$x_5x_{12} - x_2(1.12 + 0.132x_9 - 0.0067x_9^2) = 0,$

$x_8x_{13} - 0.01x_9(1.098 - 0.038x_9) - 0.325x_7 = 0.574,$

$\mathrm{lbd}_i \le x_i \le \mathrm{ubd}_i\ (i = 1, 2, \ldots, 14).$

- 各多項式がすべての 14 変数を含んではいない. — 疎性

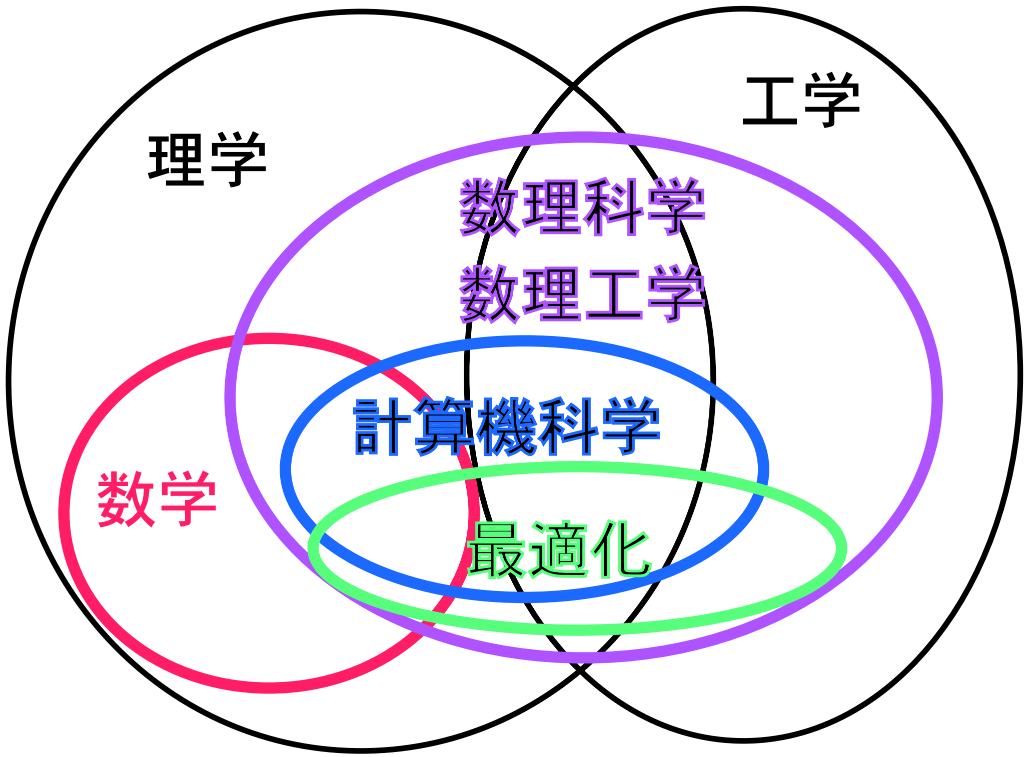
疎性を利用			疎性を利用しない		
ϵ_{obj}	ϵ_{feas}	計算秒	ϵ_{obj}	ϵ_{feas}	計算秒
5.6e-10	2.0e-08	23.0	記憶容量不足		

$$\epsilon_{\mathrm{obj}} = \frac{|\text{最小値の下界} - \text{近似最小解}|}{\max\{1, |\text{最小値の下界}|\}}\ \text{(相対誤差)}$$

$$\epsilon_{\mathrm{feas}} = \text{等式制約の誤差}$$

まとめ

科学技術における最適化の位置づけ



- 最適化 $\Longleftarrow$ 数学と計算機科学 (例えば，並列計算)
- さまざまな分野への応用
- 限られた資源でよりよく目的を達成する
  $\Longrightarrow$ 必須の科学技術，今後，ますます重要

ご清聴ありがとうございました．