計算機支援数理

平成２４年度後期

情報環境学専攻　笹島　和幸
情報環境学専攻　天谷　賢治
数理・計算科学専攻　福田　光浩
数理・計算科学専攻　山下　真

＜講義のねらい＞

近年の計算機の急速な進歩は数理科学の旧来の方法論に変革をもたらしつつあると同時に，他方ではその進歩を有効に活用するための新たな数理計算技術が要請されている．この授業ではそのような数理計算技術の１つである最適化手法を幅広く概説し，その工学への適用事例についても述べる．

＜講義日程＞

10/02 最適化・数理計画法の概要，線形計画問題に対する内点法

10/16 前回の続き，制約なし連続最適化問題に対する数値解法

10/23 前回の続き

10/30 前回の続き，(制約付き) 非線形計画問題に対する数値解法

11/06 前回の続き

11/13 凸錐計画問題

11/20 online software，モデリング言語等

11/27 最近の話題

12/04 工学における最適化問題の実際１ (笹島)

12/11 工学における最適化問題の実際２ (天谷)

12/18 工学における最適化問題の実際３ (天谷)

01/08 組合せ最適化問題に対する計算手法１ (山下)

01/15 組合せ最適化問題に対する計算手法２ (山下)

01/22 組合せ最適化問題に対する計算手法３ (山下)

01/29 組合せ最適化問題に対する計算手法４ (山下)

02/05 期末試験 (予定)

＜履修の条件＞

線形代数，解析に関する基本的な知識があること.

＜成績評価＞

レポートの提出と試験.

Bibliography

[BEN-TAL2001] Ben-Tal, A. and Nemirovski, A. , "Lecture on Modern Convex Optimization: Analysis, Algorithms, and Engineering Applications", SIAM, Philadelphia, 2001.

[BERTSEKAS2003] Bertsekas, D. P. "Nonlinear Programming", 2nd edition, Athena Scientific, Belmont, 2003.

[Bixby2002] Bixby, R. E., "Solving real-world linear programs: A decade and more of progress", *Operations Research* 50 (2002), pp. 3–15.

[小島 2001] 小島政和，土谷隆，水野眞治，矢部博,「内点法」，朝倉書店，2001.

[KOWALIK1968] Kowalik, J. and Osborne, M. R., "Methods for Unconstrained Optimization Problems", Elsevier, New York, 1968.

[NESTEROV1983] Nesterov, Y., "A method of solving a convex programming problem with convergence rate $\mathcal{O}(1/k^2)$", *Soviet Math. Doklady* **27** (1983), pp. 372–376.

[NESTEROV2004] Nesterov, Y., "Introductory Lectures on Convex Optimization: A Basic Course", Kluwer Academic Press, London, 2004.

[NOCEDAL2006] Nocedal, J. and Wright, S. J, "Numerical Optimization", 2nd Edition, Springer, 2006.

[SUN2010] Sun, W. and Yuan, Y.-X., "Optimization Theory and Methods: Nonlinear Programming", Springer, 2010.

[WRIGHT1997] Wright, S. J., "Primal-Dual Interior-Point Methods", SIAM, Philadelphia, 1997.

[矢部2006] 矢部博,「工学基礎 最適化とその応用」，数理工学社，2006.

[YE1994] Ye, Y., Todd, M. J., and Mizuno, S., "An $\mathcal{O}(\sqrt{n}L)$-iteration homonegeous and self-dual linear programming algorithm", *Mathematics of Operations Research* **19** (1994), pp. 53–67.

[YUAN2010] Yuan, Y.-X., "A short note on the Q-linear convergence of the steepest descent method", *Mathematical Programming* **123 (2010), pp. 339–343.**

Chapter 1

最適化(optimization)，数理計画法(mathematical programming)の概要

1.1 最適化問題(optimization problem)，数理計画問題(mathematical programming problem)とは

$$\boxed{\begin{cases} \text{最小化：} & f(x) \\ \text{条件：} & x \in S \end{cases}}$$

ただし，$\mathbb{R}^n$ ： n 次元ユークリッド空間

$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ： 目的関数

$S \subseteq \mathbb{R}^n$ ： 実行可能領域，制約集合

1.2 モデリングと最適化問題

$$\left.\begin{array}{l}\text{工学}\\ \text{社会}\\ \text{自然}\end{array}\right\}\text{の問題} \quad \xrightarrow[\text{数理的な解決策}]{\textbf{OR}} \quad \boxed{\begin{array}{c}\text{数理モデル}\\ \downarrow \\ \text{計算} \\ \downarrow \\ \text{解決策の提案}\end{array}}$$

- 特に重要なのは，問題の本質を見極め，末端的なことをそぎとった $\boxed{\text{数理モデル}}$ をたてることである．

- しかし，良い数理モデルでも，その（計算による）解を求めることがとてつもなく難しいのが常である．

$$\left.\begin{array}{l}\text{工学}\\ \text{社会}\\ \text{自然}\end{array}\right\}\text{の問題}\quad \begin{array}{c}\text{簡略化}\\ \longrightarrow\\ \\ \longleftarrow\\ \text{本質を}\\ \text{とらえているか}\end{array}\quad \boxed{\text{数理モデル}}$$

- 計算によって得られた結果を解決したい問題の解決策になっているかを評価し，モデルを調節する．

仮定 この講義では，数理モデルの良さや難しさを既に十分に検討し尽くし，解決済みとする．また本来，諸現象のデータの不確実性も考慮しなければならないが，それも起こらないと仮定する．

1.3 最適化問題・数理計画問題の難しさ

ある現実問題を簡略化した数学モデルから最適化問題が得られたとする．本来，この数学モデルの “良さ” や “難しさ” を議論する必要があるが，ここでは解決済みとする．

一般に最適化問題が与えられた時，以下のことに注目しなければならない．

(a) 解は存在するか．

(b) 解を計算することは可能か．

(c) 解を効率良く計算するにはどのような手法を用いればよいか．

(d) 厳密解は難しくとも，近似解で十分か．その場合，近似解は効率良く計算できるか．

$\boxed{\text{万能の手法は存在しない}}$

私の見解では，最適化モデルに取り組んでいる誰もが知っていなければならない（主な）ことは，一般的に最適化問題は解けないということである．

– Yurii Nesterov [NESTEROV2004]

1.4 最適化問題・数理計画問題の分類

$$\boxed{\begin{cases} \text{最小化：} & f(x) \\ \text{条件：} & x \in S \end{cases}}$$

ここで扱う実行可能領域 S は以下の形で与えられているとする．

$$S = \left\{ x \in \mathbb{R}^n : \begin{array}{ll} g_i(x) \leq 0, & i = 1, 2, \ldots, \ell \\ h_j(x) = 0, & j = 1, 2, \ldots, m \\ x \in U & \end{array} \right\}$$

ただし，$U \subseteq \mathbb{R}^n$，$g_i, h_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.
よって，最適化問題は関数 f, g_i, h_j や集合 U, S の性質で分類されている.

- 連続最適化問題
- 組合せ最適化問題

さらに，
- 制約なし連続最適化問題
- （制約付き）連続最適化問題

として便宜上分類する.

1.4.1 制約なし連続最適化問題

$$\begin{cases} \text{最小化：} & f(x) \\ \text{条件：} & x \in \mathbb{R}^n \end{cases}$$

＜考慮すべき要因＞

- 関数は陽な形で与えられているか.
- 関数を一点 x で評価するのにどの程度時間がかかるか.
- 関数は微分可能か，またその計算時間は.

- 微分可能でなければ，劣勾配は存在するか．計算できるか．
- 凸関数であるか，凹関数であるか．

1.4.2 （制約付き）連続最適化問題

$$\begin{cases} \text{最小化：} & f(x) \\ \text{条件：} & g_i(x) \leq 0, \ \ i = 1, 2, \ldots, \ell \\ & h_j(x) = 0, \ \ j = 1, 2, \ldots, m \\ & x \in U \end{cases}$$

＜考慮すべき要因＞ 前述の要因に加えて

- 線形関数か．
- ２次関数か．
- U 集合の性質は．

凸最適化問題 比較的易しい問題であり，ソフトウェアなどが整備されている．
例： 線形計画問題，凸２次計画問題，２次錐計画問題，半正定値計画問題

非凸最適化問題 一般的には難しい問題であり，局所的最適解で妥協をする場合が多い．

1.4.3 組合せ最適化問題

$$\begin{cases} \text{最小化：} & f(x) \\ \text{条件：} & g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, \ell \\ & h_j(x) = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, m \\ & x \in U \end{cases}$$

- 集合 U に整数条件や組合せ的条件が含まれている．

- 実用的な問題はほとんど組合せ最適化問題に帰着できる．

  例： ナップザック問題，２次割当問題，巡回セールスマン問題，スケジューリング問題，ビンパッキング問題，施設配置問題

- 汎用的な組合せ最適化問題に対してはソフトウェアが整備されている．

  例： (0-1)(混合)整数計画問題

1.5 大域的最適解と局所的最適解

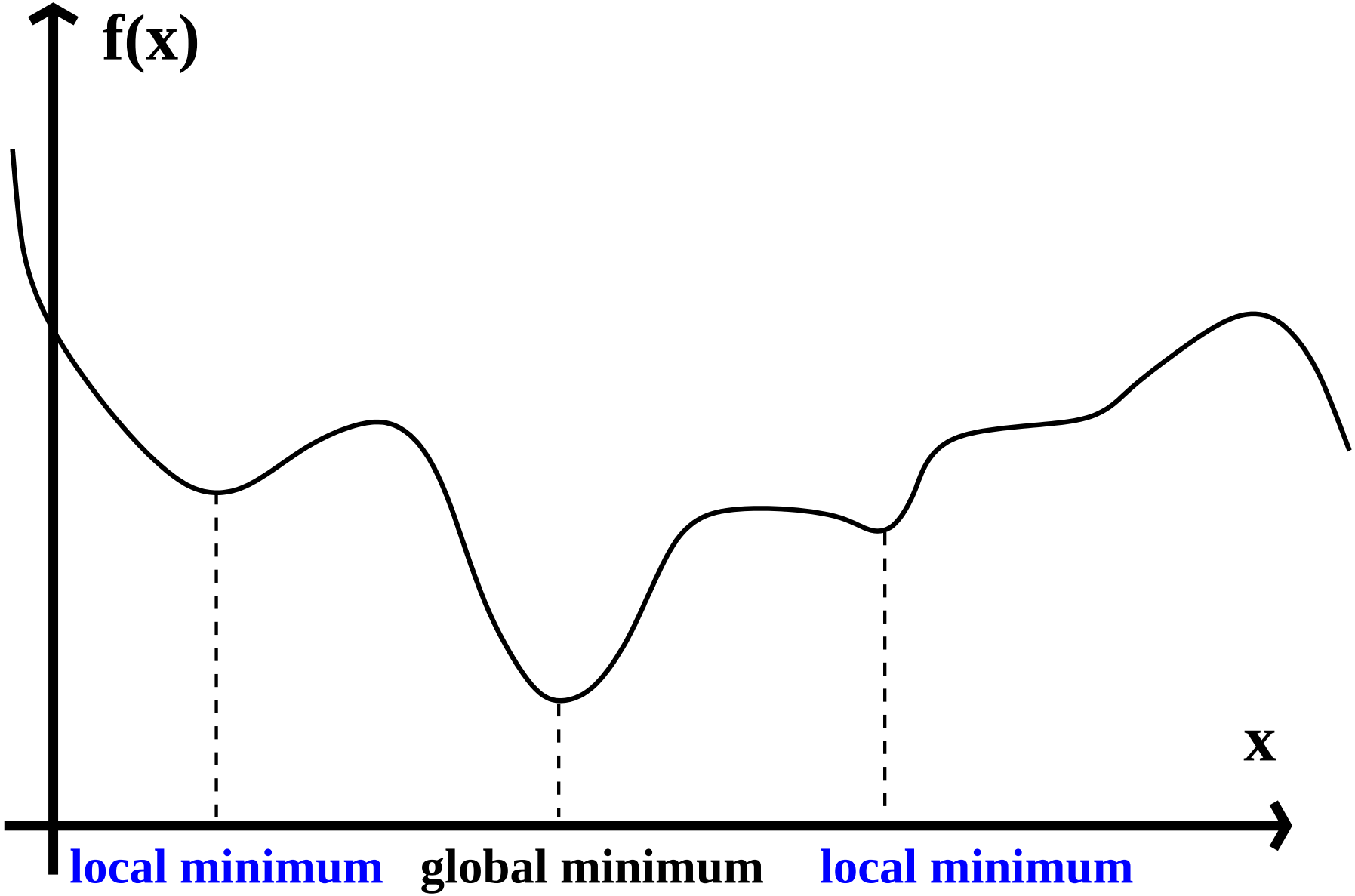
大域的最小解 $\boldsymbol{x}^*$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^*) \leq \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{S}$$

局所的最小解 $\boldsymbol{x}^*$

開近傍 $\boldsymbol{V}$ が存在し，

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^*) \leq \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{S} \cap \boldsymbol{V}$$


f(x)
x
local minimum
global minimum
local minimum

1.6 その他の最適化問題，関連分野

- 多目的最適化問題，ベクトル最適化問題
- 均衡制約をもつ数理計画問題 (MPEC)
- 抽象的な空間での最適化問題
- ゲーム理論
- 最適制御

1.6.1 多目的最適化問題，ベクトル最適化問題

$$\boxed{\begin{cases} \text{最小化：} & (f_1(x), f_2(x), \ldots, f_m(x))^T \\ \text{条件：} & g_i(x) \leq 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, \ell \\ & h_j(x) = 0, \qquad j = 1, 2, \ldots, m \\ & x \in U \end{cases}}$$

- 一般に $f_1(x), \ldots, f_m(x)$ を同時に最小化することはできないので，ここで “最小化” が意味することをはっきりさせる必要がある．$\longrightarrow$ **Pareto 最適性**

1.6.2 均衡制約をもつ数理計画問題 (MPEC)

実数値関数 $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$，空でない集合 $Z \subseteq \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$，そしてベクトル値関数 $F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$，点-集合写像 $Y : \mathbb{R}^n \to 2^{\mathbb{R}^m}$ が与えられた時，均衡制約をもつ数理計画問題 (Mathematical Program with Equilibrium Constraints – MPEC) は以下のような問題である．

$$\boxed{\begin{cases} \text{最小化：} & f(x,y) \\ \text{条件：} & (x,y) \in Z \\ & y \in \{u \in \mathbb{R}^m \ : \ \langle F(x,u), z-u \rangle \geq 0, \ \forall z \in Y(x)\} \end{cases}}$$

1.6.3 抽象的な空間での最適化問題

$$\boxed{\begin{cases} \text{最小化：} & f(x) \\ \text{条件：} & g_i(x) \leq 0, \ \ i = 1,2,\ldots,\ell \\ & h_j(x) = 0, \ \ j = 1,2,\ldots,m \\ & x \in U \end{cases}}$$

- ただし，U はヒルベルト空間やバナッハ空間の部分集合である．

1.6.4　ゲーム理論

- 意志決定が複数人で競合する．経済学で数理モデルとして用いられる．
- 最適化では，多目的問題であっても，意志決定者は一人．

例：　２人零和ゲーム

プレーヤーが２人いて，それぞれ A,B,C 戦略と 1,2 戦略をとった時にそれぞれの損得が次の表で与えられているとする．

	A	B	C
1	30,-30	-10,10	20,-20
2	10,-10	20,-20	-20,20

この時，ぞれぞれどのような戦略をとることがベストであるか．

1.6.5　最適制御

$$\begin{cases} \text{最小化：} & f(x) \\ \text{条件：} & x \in F \end{cases}$$

ただし，F は微分方程式などで記述された時間関数によって定義された集合である．

Chapter 2

線形計画問題 (Linear Programming, LP)

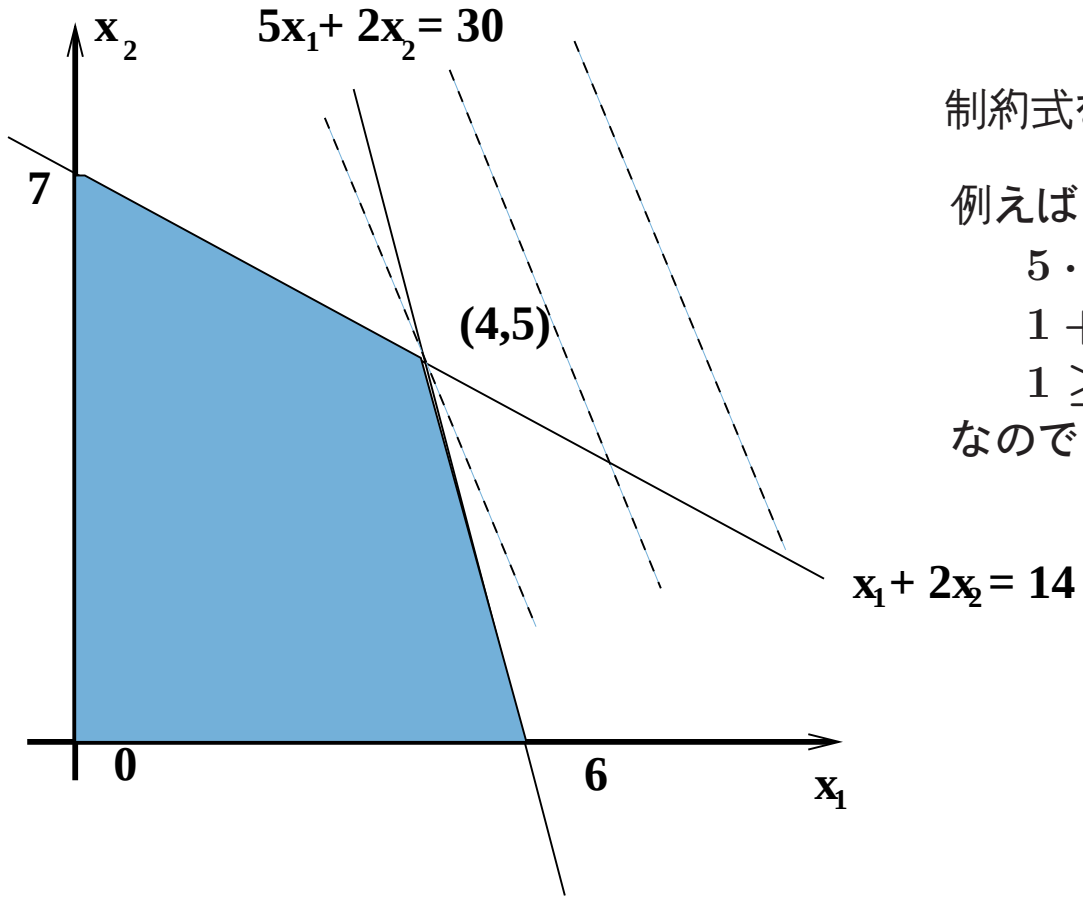
2.1 定式化，用語定義，標準形

$$
\begin{cases}
\text{最小化:} & -5\mathrm{x}_1 - 4\mathrm{x}_2 \\
\text{条件:} & 5x_1 + 2x_2 \leq 30 \\
 & x_1 + 2x_2 \leq 14 \\
 & x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
\text{最小化:} & -5x_1 - 4x_2 \\
\text{条件:} & 5x_1 + 2x_2 \le 30 \\
 & x_1 + 2x_2 \le 14 \\
 & x_1 \ge 0,\ x_2 \ge 0
\end{cases}
$$

$\}$ x_1, x_2 に対する目的関数

制約式



制約式を満たす解を実行可能解と呼ぶ.

例えば, $x_1 = 1,\ x_2 = 1$ は

$$5 \cdot 1 + 2 \cdot 1 = 7 \le 30,$$
$$1 + 2 \cdot 1 = 3 \le 14,$$
$$1 \ge 0,\ 1 \ge 0,$$

なので実行可能解になる.

- $(x_1, x_2)^T = (4, 5)^T$ 最適解　$-5 \cdot 4 - 4 \cdot 5 = -40$ 最適値

- 次元が大きくなると幾何学的な解法は困難
  $\Rightarrow$ 線形代数を用いた解法 $\Rightarrow$ 計算機を用いた解法

- 系統的な解法 $\Rightarrow$ 線形計画問題の標準形

$$\begin{cases} \text{最小化:} & -5x_1 - 4x_2 \\ \text{条件:} & 5x_1 + 2x_2 \leq 30 \\ & x_1 + 2x_2 \leq 14 \\ & x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{最小化:} & -5x_1 - 4x_2 + 0x_3 + 0x_4 \\ \text{条件:} & 5x_1 + 2x_2 + 1x_3 + 0x_4 = 30 \\ & x_1 + 2x_2 + 0x_3 + 1x_4 = 14 \\ & x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0,\ x_3 \geq 0,\ x_4 \geq 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \text{最小化:} & c_1x_1 + \cdots + c_nx_n \\ \text{条件:} & a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ & a_{21}x_1 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ & \vdots \\ & a_{m1}x_1 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \\ & x_1 \geq 0, \ldots, x_n \geq 0 \end{cases} \Rightarrow$$

線形計画問題の標準形

$$\boxed{\begin{cases} \text{最小化：} & c^T x \\ \text{条件：} & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{cases} \quad \text{ただし，} c \in \mathbb{R}^n,\ A \in \mathbb{R}^{m \times n},\ b \in \mathbb{R}^m}$$

- さらなる例題

$$\begin{cases} \text{最大化:} & -3x_1 + 7x_2 \\ \text{条件:} & x_1 - 4x_2 \geq 23 \\ & 3x_1 + 2x_2 \leq 9 \\ & x_2 \geq 0 \end{cases}$$

- 符号の制約がない変数は二つの非負の変数の差として表す．$(x_1 = x_5 - x_6)$
- 目的関数の符号をかえて最大化問題を最小化問題に変換．
- 線形不等式に補助変数を加えて（差し引いて）等式に変換する．

$$\begin{cases} \text{最小化:} & +3x_5 - 3x_6 - 7x_2 + 0x_3 + 0x_4 \\ \text{条件:} & x_5 - x_6 - 4x_2 - 1x_3 + 0x_4 = 23 \\ & 3x_5 - 3x_6 + 2x_2 + 0x_3 + 1x_4 = 9 \\ & x_2 \geq 0,\ x_3 \geq 0,\ x_4 \geq 0,\ x_5 \geq 0, x_6 \geq 0 \end{cases}$$

$$\boxed{\begin{cases} \text{最小化：} & c^T x \\ \text{条件：} & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{cases}}$$

線形計画問題の標準形

2.2 応用例： Tschebyshev近似

- $A = \begin{pmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \vdots \\ a_M^T \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{M \times N}$, $b \in \mathbb{R}^M$ に対して次の問題を考える

$$\boxed{\min_{x \in \mathbb{R}^N} \|Ax - b\|_\infty}$$

ただし，$\|Ax - b\|_\infty = \max_{i=1,2,\ldots,M} |a_i^T x - b_i|$.

この問題は一見非線形であるが，線形計画問題として定式化できる.

$$\boxed{\begin{cases} \text{最小化：} & t \\ \text{条件：} & a_i^T x - b_i - t \leq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, M \\ & -a_i^T x + b_i - t \leq 0, \quad i = 1, 2, \ldots, M \end{cases}}$$

- 応用として区間 $[0,1]$ で定義された関数 $\beta(t)$ を既知の関数 $\{\alpha_j(t)\}_{j=1}^N$ の線形結合 $\sum_{j=1}^N x_j\alpha_j(t)$ で近似することを考える．
- 近似は $\beta(\cdot)$ 関数と $\sum_{j=1}^N x_j\alpha_j(\cdot)$ 関数の一様距離を最小化するように考える

$$\min_{x\in\mathbb{R}^N} \|\beta - \sum_{j=1}^N x_j\alpha_j\|_\infty = \min_{x\in\mathbb{R}^N} \sup_{0\le t\le 1} |\beta(t) - \sum_{j=1}^N x_j\alpha_j(t)|$$

定義域 $[0,1]$ を M 個の小区間 $[(i-1)/M, i/M]$，$i=1,2,\ldots,M$ に分割して，上記の問題を先程の線形計画問題に近似的に帰着できる．

$$\boxed{\min_{x\in\mathbb{R}^N} \max_{i=1,2,\ldots,M} |\beta(t_i) - \sum_{j=1}^N x_j\alpha_j(t_i)|}$$

ただし，$t_i \in [(i-1)/M, i/M]$，$i=1,2,\ldots,M$ は定数．

2.3 歴史的背景

1947年 Dantzigは軍事的なロジステックスやスケジュリング問題の自動解法として単体法を考案

- 様々な応用があり、オペレーションズ・リサーチと最適化の幕明けとされる
- 単体法は多項式時間アルゴリズムであるか?

1972年 Klee-Minty による例題

- 単体法は多項式時間アルゴリズムでないことが分かるが、実用的な問題ではそのような病的な例はほとんど存在しない
- 線形計画問題を解く多項式時間アルゴリズムは存在するか?

1979年 Kachiyan により多項式時間アルゴリズムである楕円体法による解法が発表される

- しかし理論と実用とのギャップが判明する
- 実用的な多項式アルゴリズムは存在するか?

1984年 Karmarkar により射影変換法が発表される

- 内点法の幕開けになり、世界中の研究者が競って研究に取り組む

1987年 小島-水野-吉瀬、Megiddo, 田邉らにより主双対内点法が発表される

- 現在実装されている方法の一つ