最適化 2 (第 2 回)

番原睦則 (banbara@i.nagoya-u.ac.jp)

名古屋大学情報学研究科

組合せ最適化問題の解法 (再掲)

- **欲張り法**
  - 解を段階的に構築する際に，常にその段階で最善と思われるものを選択する方法 (後のことは考えない).
  - 一般に，最適解が構築できる保証はない.
- **厳密解法**
  - 厳密な最適解を求める方法
  - 例) 分枝限定法，**動的計画法** *
- **近似解法・発見的解法**
  - 広い意味で，厳密解法ではない方法. 最適解を厳密に求めることは諦め，良い近似最適解を比較的短時間で求める方法
  - 例) 局所探索法，メタヒューリスティックス

*Dynamic Programming

動的計画法

- 分枝限定法と同じく，組合せ最適化問題に対する厳密解法であり，効率的な列挙法の一種.
- 様々な問題に対して用いることができる一般的な計算原理.
- 最適性の原理に基づく.

動的計画法の特徴

- 意思決定が段階的になされる.
- 段階ごとの部分問題の解の情報を「表」にして保存する.

巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題 (行商人問題)

節点集合 $V = \{1, 2, \ldots, n\}$ をもつネットワーク $G = (V, E)$ において，各枝 $(i, j) \in E$ の長さが a_{ij} が与えられたとき，すべての節点をちょうど一度ずつ訪問して出発点に戻る**巡回路**のなかで最短のものを見つける問題．

- 枝 (i, j) と枝 (j, i) の長さは常に等しいと仮定
- n 個の節点 $1, 2, \ldots, n$ の最適な並べ換え (順列) を求める問題
- 難しい組合せ最適化問題の代表格
  - 実行可能解の数は $(n-1)!$
  - $n = 20$ のときは，10^{17} 以上

巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題 (行商人問題)‡

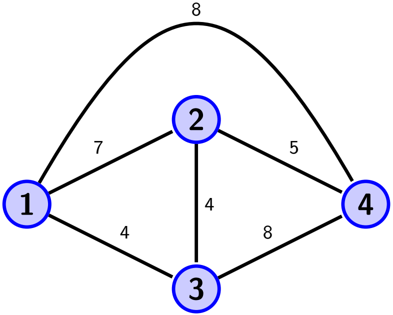
$n \times n$ の行列 (a_{ij}) が与えられたとき，$V = \{1, 2, \ldots, n\}$ から V 上への 1 対 1 写像 (順列) ρ で

$$\sum_{i=1}^{n-1} a_{\rho(i),\rho(i+1)} + a_{\rho(n),\rho(1)}$$

を最小にするものを求める問題.

‡応用数理計画ハンドブック (朝倉書店) より

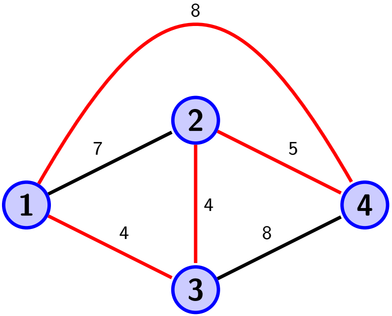
巡回セールスマン問題の例



$$V = \{1, 2, 3, 4\}$$

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 4 & 8 \\ 7 & 0 & 4 & 5 \\ 4 & 4 & 0 & 8 \\ 8 & 5 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$

巡回セールスマン問題の例



$$V = \{1, 2, 3, 4\}$$

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 4 & 8 \\ 7 & 0 & 4 & 5 \\ 4 & 4 & 0 & 8 \\ 8 & 5 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$

- 最適値: 21 (最短巡回路の長さ)
- 最適解: $1 \to 3 \to 2 \to 4 \to 1$

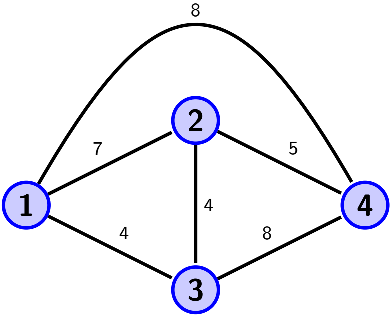
巡回セールスマン問題に対する動的計画法

巡回セールスマン問題に対する動的計画法

$$
\begin{aligned}
&\text{初期　条件:} && f(\{i\}, i) = a_{si} \\
&\text{再帰方程式:} && f(S \cup \{j\}, j) = \min_{i \in S}\{f(S, i) + a_{ij}\}
\end{aligned}
$$

- ある始点 s から出発し，点の部分集合 $S \subseteq V$ をすべて経由し，点 $i \in S$ に至る最短路長を $f(S, i)$ と書く．
- 上の初期条件と再帰方程式によって計算された $f(V, s)$ が最短巡回路長である．
- このアルゴリズムの計算量は $O(n^2 2^n)$，必要な記憶容量は $O(n2^n)$
- 適切な情報を保存しておけば，対応する巡回路も計算可能．

計算例: 巡回セールスマン問題に対する動的計画法



$V = \{1, 2, 3, 4\}$

出発点 $s = 1$

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 4 & 8 \\ 7 & 0 & 4 & 5 \\ 4 & 4 & 0 & 8 \\ 8 & 5 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$

- 最短巡回路長は，$f(\{1, 2, 3, 4\}, 1)$ を計算すればよい．

$$f(\{1, 2, 3, 4\}, 1) = \min_{i \in \{2,3,4\}} \{f(\{2, 3, 4\}, i) + a_{i1}\}$$

- 巡回路を計算計算するために，$p(S, i)$ で点 i の直前に訪問した点を記憶する．

反復 1

再帰方程式

$$f(\{i\}, i) = a_{si}$$
$$f(S \cup \{j\}, j) = \min_{i \in S}\{f(S, i) + a_{ij}\}$$

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 4 & 8 \\ 7 & 0 & 4 & 5 \\ 4 & 4 & 0 & 8 \\ 8 & 5 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$

$$f(\{2\}, 2) = a_{12} = 7 \quad p(\{2\}, 2) = 1$$
$$f(\{3\}, 3) = a_{13} = 4 \quad p(\{3\}, 3) = 1$$
$$f(\{4\}, 4) = a_{14} = 8 \quad p(\{4\}, 4) = 1$$

反復 2

再帰方程式

$$f(\{i\}, i) = a_{si}$$
$$f(S \cup \{j\}, j) = \min_{i \in S}\{f(S, i) + a_{ij}\}$$

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 4 & 8 \\ 7 & 0 & 4 & 5 \\ 4 & 4 & 0 & 8 \\ 8 & 5 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
f(\{2,3\},2) &= \min\nolimits_{i\in\{3\}}\{f(\{3\},i) + a_{i2}\} = 8 & p(\{2,3\},2) &= 3 \\
f(\{2,3\},3) &= \min\nolimits_{i\in\{2\}}\{f(\{2\},i) + a_{i3}\} = 11 & p(\{2,3\},3) &= 2 \\
f(\{2,4\},2) &= \min\nolimits_{i\in\{4\}}\{f(\{4\},i) + a_{i2}\} = 13 & p(\{2,4\},2) &= 4 \\
f(\{2,4\},4) &= \min\nolimits_{i\in\{2\}}\{f(\{2\},i) + a_{i4}\} = 12 & p(\{2,4\},4) &= 2 \\
f(\{3,4\},3) &= \min\nolimits_{i\in\{4\}}\{f(\{4\},i) + a_{i3}\} = 16 & p(\{3,4\},3) &= 4 \\
f(\{3,4\},4) &= \min\nolimits_{i\in\{3\}}\{f(\{3\},i) + a_{i4}\} = 12 & p(\{3,4\},4) &= 3
\end{aligned}$$

反復 3

再帰方程式

$$f(\{i\}, i) = a_{si}$$
$$f(S \cup \{j\}, j) = \min_{i \in S}\{f(S, i) + a_{ij}\}$$

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 4 & 8 \\ 7 & 0 & 4 & 5 \\ 4 & 4 & 0 & 8 \\ 8 & 5 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
f(\{2,3,4\},2) &= \min\nolimits_{i\in\{3,4\}}\{f(\{3,4\},i) + a_{i2}\} \\
&= \min\{16+4, 12+5\} = 17 & p(\{2,3,4\},2) = 4 \\
f(\{2,3,4\},3) &= \min\nolimits_{i\in\{2,4\}}\{f(\{2,4\},i) + a_{i3}\} \\
&= \min\{13+4, 12+8\} = 17 & p(\{2,3,4\},3) = 2 \\
f(\{2,3,4\},4) &= \min\nolimits_{i\in\{2,3\}}\{f(\{2,3\},i) + a_{i4}\} \\
&= \min\{8+5, 11+8\} = 13 & p(\{2,3,4\},4) = 2
\end{aligned}$$

反復 4

再帰方程式

$$f(\{i\}, i) = a_{si}$$
$$f(S \cup \{j\}, j) = \min_{i \in S}\{f(S, i) + a_{ij}\}$$

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 4 & 8 \\ 7 & 0 & 4 & 5 \\ 4 & 4 & 0 & 8 \\ 8 & 5 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$

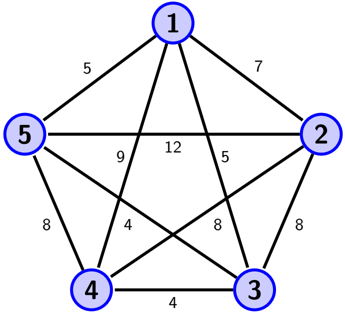
$$f(\{1,2,3,4\},1) = \min_{i\in\{2,3,4\}}\{f(\{2,3,4\},i) + a_{i1}\}$$
$$= \min\{f(\{2,3,4\},2) + a_{21}, f(\{2,3,4\},3) + a_{31}, f(\{2,3,4\},4) + a_{41}\}$$
$$= \min\{17+7, 17+4, 13+8\} = 21$$

- 最短巡回路の長さは 21
- 最短巡回路: $1 \to 3 \to 2 \to 4 \to 1$ (or $1 \to 4 \to 2 \to 3 \to 1$)

演習 1

問題

次の巡回セールスマン問題を動的計画法を用いて解け.



$$V = \{1, 2, 3, 4, 5\}$$

出発点 $s = 1$

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 5 & 9 & 5 \\ 7 & 0 & 8 & 8 & 12 \\ 5 & 8 & 0 & 4 & 4 \\ 9 & 8 & 4 & 0 & 8 \\ 5 & 12 & 4 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$

演習 2

問題

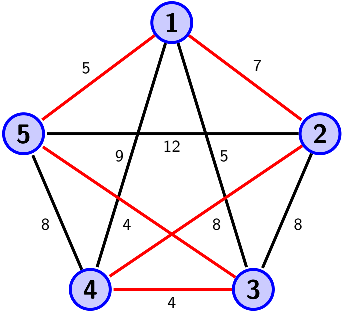
次の 0-1 ナップサック問題を動的計画法を用いて解け.

$$
\begin{aligned}
\text{目的:}\quad & 7x_1 + 8x_2 + x_3 + 2x_4 \longrightarrow \text{最大} \\
\text{制約:}\quad & 4x_1 + 5x_2 + x_3 + 3x_4 \leq 6 \\
& x_i = 0, 1 \,(i = 1, 2, 3, 4)
\end{aligned}
$$

演習 1

答え

- 最適値: 28 (最短巡回路の長さ)
- 最適解: $1 \to 5 \to 3 \to 4 \to 2 \to 1$ (or この逆)



$$V = \{1, 2, 3, 4, 5\}$$

出発点 $s = 1$

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 7 & 5 & 9 & 5 \\ 7 & 0 & 8 & 8 & 12 \\ 5 & 8 & 0 & 4 & 4 \\ 9 & 8 & 4 & 0 & 8 \\ 5 & 12 & 4 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$

0-1 ナップサック問題に対する動的計画法

0-1 ナップサック問題

目的: $\displaystyle\sum_{i=1}^{n} c_i x_i \longrightarrow$ 最大

制約: $\displaystyle\sum_{i=1}^{n} a_i x_i \leq b$

$x_i \in \{0,1\} \qquad (i = 1, 2, \ldots, n)$

部分問題 $J(k, \theta)$

目的: $\displaystyle\sum_{i=1}^{k} c_i x_i \longrightarrow$ 最大

制約: $\displaystyle\sum_{i=1}^{k} a_i x_i \leq \theta$

$x_i \in \{0,1\} \qquad (i = 1, 2, \ldots, k)$

- この部分問題は，品物を k 番目までに限定したとき，重さの上限が θ 以下で価値の総和が最大のものを求める問題
- 元の問題の最適値は $J(n, b)$

0-1 ナップサック問題に対する動的計画法

0-1 ナップサック問題に対する動的計画法

- 初期条件

$$J(1,\theta) = \begin{cases} 0 & 0 \leq \theta < a_1 \\ c_1 & a_1 \leq \theta \leq b \end{cases}$$

- 再帰方程式

$$J(k,\theta) = \begin{cases} J(k-1,\theta) & 0 \leq \theta < a_k \\ \max\{J(k-1,\theta), c_k + J(k-1,\theta-a_k)\} & a_k \leq \theta \end{cases}$$

- 上の初期条件と再帰方程式によって計算された $J(n,b)$ が最適解となる.
- このアルゴリズムの計算量は $O(nb)$

演習 2: 反復 1

目的関数: $7x_1 + 8x_2 + x_3 + 2x_4 \longrightarrow$ 最大
制約条件: $4x_1 + 5x_2 + x_3 + 3x_4 \le 6, \qquad x_i = 0, 1\,(i = 1, 2, 3, 4)$

$$J(1, \theta) = \begin{cases} 0 & 0 \le \theta < a_1 \\ c_1 & a_1 \le \theta \le b \end{cases}$$

$$\begin{array}{ll} J(1,0) = 0 & \{\} \\ J(1,1) = 0 & \{\} \\ J(1,2) = 0 & \{\} \\ J(1,3) = 0 & \{\} \\ J(1,4) = 7 & \{1\} \\ J(1,5) = 7 & \{1\} \\ J(1,6) = 7 & \{1\} \end{array}$$

演習 2: 反復 2

$$\text{目的関数:} \quad 7x_1 + 8x_2 + x_3 + 2x_4 \longrightarrow \text{最大}$$
$$\text{制約条件:} \quad 4x_1 + 5x_2 + x_3 + 3x_4 \leq 6, \qquad x_i = 0, 1\,(i = 1, 2, 3, 4)$$

$$J(k, \theta) = \begin{cases} J(k-1, \theta) & 0 \leq \theta < a_k \\ \max\{J(k-1, \theta), c_k + J(k-1, \theta - a_k)\} & a_k \leq \theta \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
J(2,0) &= J(1,0) = 0 & \{\} \\
J(2,1) &= J(1,1) = 0 & \{\} \\
J(2,2) &= J(1,2) = 0 & \{\} \\
J(2,3) &= J(1,3) = 0 & \{\} \\
J(2,4) &= J(1,4) = 7 & \{1\} \\
J(2,5) &= \max\{J(1,5), 8 + J(1,0)\} = 8 & \{2\} \\
J(2,6) &= \max\{J(1,6), 8 + J(1,1)\} = 8 & \{2\}
\end{aligned}$$

演習 2: 反復 3

$$
\begin{array}{ll}
\text{目的関数:} & 7x_1 + 8x_2 + x_3 + 2x_4 \longrightarrow \text{最大} \\
\text{制約条件:} & 4x_1 + 5x_2 + x_3 + 3x_4 \leq 6, \qquad x_i = 0, 1\,(i = 1, 2, 3, 4)
\end{array}
$$

$$
J(k, \theta) = \begin{cases} J(k-1, \theta) & 0 \leq \theta < a_k \\ \max\{J(k-1, \theta), c_k + J(k-1, \theta - a_k)\} & a_k \leq \theta \end{cases}
$$

$$
\begin{array}{lr}
J(3,0) = J(2,0) = 0 & \{\} \\
J(3,1) = \max\{J(2,1), 1 + J(2,0)\} = 1 & \{3\} \\
J(3,2) = \max\{J(2,2), 1 + J(2,1)\} = 1 & \{3\} \\
J(3,3) = \max\{J(2,3), 1 + J(2,2)\} = 1 & \{3\} \\
J(3,4) = \max\{J(2,4), 1 + J(2,3)\} = 7 & \{1\} \\
J(3,5) = \max\{J(2,5), 1 + J(2,4)\} = 8 & \{2\} or \{1,3\} \\
J(3,6) = \max\{J(2,6), 1 + J(2,5)\} = 9 & \{2,3\}
\end{array}
$$

演習 2: 反復 4

$$
\begin{array}{ll}
\text{目的関数:} & 7x_1 + 8x_2 + x_3 + 2x_4 \longrightarrow \text{最大} \\
\text{制約条件:} & 4x_1 + 5x_2 + x_3 + 3x_4 \leq 6, \qquad x_i = 0, 1\,(i = 1, 2, 3, 4)
\end{array}
$$

$$
J(k,\theta) = \begin{cases} J(k-1,\theta) & 0 \leq \theta < a_k \\ \max\{J(k-1,\theta), c_k + J(k-1,\theta - a_k)\} & a_k \leq \theta \end{cases}
$$

$$
\begin{array}{lr}
J(4,0) = J(3,0) = 0 & \{\} \\
J(4,1) = J(3,1) = 1 & \{3\} \\
J(4,2) = J(3,2) = 1 & \{3\} \\
J(4,3) = \max\{J(3,3), 2 + J(3,0)\} = 2 & \{4\} \\
J(4,4) = \max\{J(3,4), 2 + J(3,1)\} = 7 & \{1\} \\
J(4,5) = \max\{J(3,5), 2 + J(3,2)\} = 8 & \{2\} or \{1,3\} \\
J(4,6) = \max\{J(3,6), 2 + J(3,3)\} = 9 & \{2,3\}
\end{array}
$$

演習 2: 表

目的関数: $7x_1 + 8x_2 + x_3 + 2x_4 \longrightarrow$ 最大

制約条件: $4x_1 + 5x_2 + x_3 + 3x_4 \leq 6, \qquad x_i = 0, 1\,(i = 1, 2, 3, 4)$

$J(4, 6) = 9$ (最適値), $\{2, 3\}$ (最適解)

$k \backslash \theta$	0	1	2	3	4	5	6
1	0	0	0	0	7	7	7
2	0	0	0	0	7	8	8
3	0	1	1	1	7	8	9
4	0	1	1	2	7	8	**9**