最適化 2 (第 1 回)

番原睦則 (banbara@i.nagoya-u.ac.jp)

名古屋大学情報学研究科

最適化 2 の概要

目的

- 数理計画のいくつかの基本的な問題とその解法アルゴリズムについて学ぶ.
- 最適化 1 の続き

- **教科書**
  - 新版 数理計画入門 福島雅夫 著 (朝倉書店)
- **成績評価**
  - 演習課題 30 %, 期末試験 70 %
  - 100 点満点で 60 点以上を合格とする.
- **担当教員**
  - 番原睦則
  - `http://kaminari.cspsat.css.i.nagoya-u.ac.jp/banbara-jp.html`

分枝限定法の計算手順 (再掲)

0. 適当な方法で元の問題 $\mathcal{P}_0$ の近似解を求め，それを暫定解とする．その目的関数値を暫定値 z^* とする．$\mathcal{P}_0$ からいくつかの部分問題 $\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \dots, \mathcal{P}_m$ を生成し，$\mathcal{A} := \{\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, \dots, \mathcal{P}_m\}$ とおく．
1. 集合 $\mathcal{A}$ から部分問題 $\mathcal{P}_i$ を一つ選ぶ．
   - a. $\mathcal{P}_i$ が実行可能解をもたなければ，直ちに $\mathcal{P}_i$ を終端．$\mathcal{A} := \mathcal{A} \backslash \{\mathcal{P}_i\}$ としてステップ (3) へ．
   - b. $\mathcal{P}_i$ の最適解が得られ，その目的関数値 z_i が $z_i \leq z^*$ ならば，直ちに $\mathcal{P}_i$ を終端．$z_i > z^*$ ならば，$z^* := z_i$ とおき，暫定解を更新して $\mathcal{P}_i$ を終端．$\mathcal{A} := \mathcal{A} \backslash \{\mathcal{P}_i\}$ としてステップ (3) へ．
   - c. $\mathcal{P}_i$ の上界値 $\overline{z_i}$ が得られ，$\overline{z_i} \leq z^*$ ならば，直ちに $\mathcal{P}_i$ を終端．$\mathcal{A} := \mathcal{A} \backslash \{\mathcal{P}_i\}$ としてステップ (3) へ．$\overline{z_i} > z^*$ ならば，ステップ (2) へ．
2. $\mathcal{P}_i$ からいくつかの部分問題 $\mathcal{P}_j, \dots, \mathcal{P}_k$ を生成し，$\mathcal{A} := \mathcal{A} \cup \{\mathcal{P}_j, \dots, \mathcal{P}_k\} \backslash \{\mathcal{P}_i\}$ とおく．ステップ (1) へ戻る．
3. $\mathcal{A} = \emptyset$ ならば計算終了．このとき，暫定解は元の問題 $\mathcal{P}_0$ の最適解．$\mathcal{A} \neq \emptyset$ ならば，ステップ (1) へ戻る．

深さ優先探索法を用いた分枝限定法の計算例

元の問題: $\mathcal{P}(\emptyset, \emptyset)$

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

[反復 0]

- $\mathcal{P}(\emptyset, \emptyset)$ の実数最適解 $\boldsymbol{x}_0 = (1, \frac{2}{5}, 0, 0)^T$ を修正して得られる近似解 $\boldsymbol{x} = (1, 0, 1, 0)^T$ を暫定解とする.
- 目的関数値 8 を暫定値 z^* とする.
- 自由変数 x_1 を選んで, $\mathcal{P}(\emptyset, \emptyset)$ に分枝操作を施し, 部分問題 $\mathcal{P}(\{1\}, \emptyset)$ と $\mathcal{P}(\emptyset, \{1\})$ を生成する.
- $\mathcal{A} = \{\mathcal{P}(\{1\}, \emptyset), \mathcal{P}(\emptyset, \{1\})\}$ とおく.

反復 1: 部分問題 $\mathcal{P}(\{1\}, \emptyset)$ を選ぶ.

部分問題 $\mathcal{P}(\{1\}, \emptyset)$

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

- $\mathcal{P}(\{1\}, \emptyset)$ の実数最適解は $(x_2, x_3, x_4)^T = (1, 1, 0)^T$
- この解は 0-1 条件を満たすので，$\mathcal{P}(\{1\}, \emptyset)$ は終端できる.
- 目的関数値 9 は暫定値 8 より大きいので，以下のように更新.
  - 暫定解: $\boldsymbol{x} = (0, 1, 1, 0)^T$
  - 暫定値: $z^* = 9$
- $\mathcal{A} = \{\mathcal{P}(\emptyset, \{1\})\}$ に更新

反復 2: 部分集合 $\mathcal{P}(\emptyset, \{1\})$ を選ぶ.

部分集合 $\mathcal{P}(\emptyset, \{1\})$

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

- $\mathcal{P}(\emptyset, \{1\})$ の実数最適解は $(x_2, x_3, x_4)^T = (\frac{2}{5}, 0, 0)^T$
- 目的関数値は $7 + \frac{16}{5} = 10.2$ なので，この部分問題の上界値は 10 となる.
- $10 > z^* = 9$ (暫定値) なので，$\mathcal{P}(\emptyset, \{1\})$ は終端できない.
- $\mathcal{P}(\emptyset, \{1\})$ から，部分問題 $\mathcal{P}(\{2\}, \{1\})$ と $\mathcal{P}(\emptyset, \{1, 2\})$ を生成する.
- $\mathcal{A} = \{\mathcal{P}(\{2\}, \{1\}), \mathcal{P}(\emptyset, \{1, 2\})\}$ に更新

反復 3: 部分問題 $\mathcal{P}(\{2\},\{1\})$ を選ぶ.

部分問題 $\mathcal{P}(\{2\},\{1\})$

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

- $\mathcal{P}(\{2\},\{1\})$ の実数最適解は $(x_3, x_4)^T = (1, \frac{1}{3})^T$
- 目的関数値は $7 + 1 + \frac{2}{3} \cong 8.7$ なので，この部分問題の上界値は 8 となる.
- $8 < z^* = 9$ (暫定値) なので，この部分問題が最適値を与える可能性はない．この部分問題は終端できる.
- $\mathcal{A} = \{\mathcal{P}(\emptyset, \{1, 2\})\}$ に更新

反復 4: 部分問題 $\mathcal{P}(\emptyset, \{1,2\})$ を選ぶ．

部分問題 $\mathcal{P}(\emptyset, \{1,2\})$

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

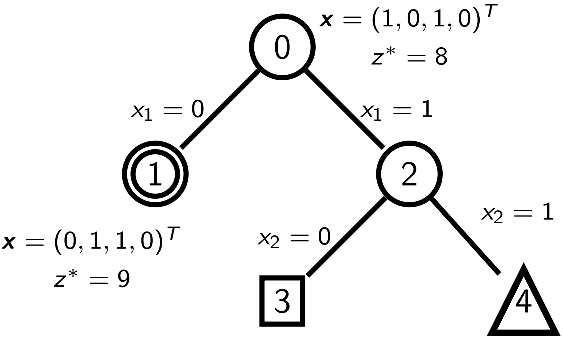
- この部分問題は明らかに実行可能解をもたないので，直ちに終端できる．
- $\mathcal{A} = \emptyset$ に更新

反復 5: 計算終了

- $\mathcal{A} = \emptyset$ となったので，計算終了．
- 現時点の暫定解が最適解である．
  - 最適解: $\boldsymbol{x} = (0, 1, 1, 0)^T$
  - 最適値: $z^* = 9$

今回の例では，全部で 16 個ある部分問題のうち，4 個を解くことで元の問題の最適解を得ている．

分枝限定法の探索木



- ◎: 実行可能解が得られ，暫定解を更新した部分問題
- □: 上界値が暫定値以下だったため終端した部分問題
- △: 実行可能解をもたないため終端した部分問題

分枝限定法のまとめ

- 組合せ最適化問題に対する厳密解法の一つ．
- 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．

分枝限定法の基本操作

1. **分枝操作**: 変数の値を固定するなどして場合分けを行い，部分問題を生成する．
2. **限定操作**: 部分問題に対して，(元の問題の) 最適解を与える可能性があるか調べ，ないと判定された場合は，その部分問題を解くことを止める．

- 実際に分枝限定法を適用する場合，対象とする問題に応じて，**効果的な上界値の計算法や活性部分問題の探索法を工夫**することが重要

演習 1

以下の 0-1 ナップサック問題を分枝限定法を用いて解け.

$$
\begin{aligned}
\text{目的:}\quad & 28x_1 + 33x_2 + 10x_3 + 45x_4 + 32x_5 \longrightarrow \text{最大} \\
\text{制約:}\quad & 2x_1 + 3x_2 + x_3 + 5x_4 + 4x_5 \leq 7 \\
& x_i = 0, 1\,(i = 1, 2, 3, 4, 5)
\end{aligned}
$$

演習 2

以下の 0-1 ナップサック問題を分枝限定法を用いて解け.

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

ナンバーリンク †

1	2	3								
			5	4		2	1			
								3	4	5

問題例

ナンバーリンクのルール (ニコリによる)

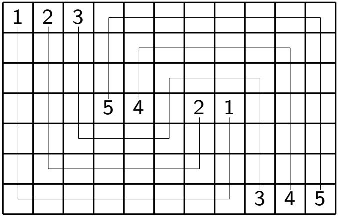
1. 同じ数字どうしを線でつなげます．
2. 線はタテヨコに引き，マスの中央を通ります．
3. 線は 1 マスに 1 本だけ通過できます．線をワクの外に出したり，交差や枝分かれさせてはいけません．また，線は数字が入っているマスを通過してもいけません．

† ナンバーリンクはニコリ社の登録商標．回路の配線問題と親和性が高い．

ナンバーリンク †

1	2	3								
			5	4		2	1			
								3	4	5

問題例



問題例の解

ナンバーリンクのルール (ニコリによる)

1. 同じ数字どうしを線でつなげます.
2. 線はタテヨコに引き，マスの中央を通ります.
3. 線は 1 マスに 1 本だけ通過できます．線をワクの外に出したり，交差や枝分かれさせてはいけません．また，線は数字が入っているマスを通過してもいけません.

† ナンバーリンクはニコリ社の登録商標．回路の配線問題と親和性が高い.

演習&議論: ナンバーリンク

問題

1. ナンバーリンクに対する欲張り法について議論せよ.
2. ナンバーリンクを組合せ問題として定式化せよ.
   - 目的関数は無視して考えよ[‡].
   - 論理積 ($\wedge$), 論理和 ($\vee$) などの論理演算を使ってもよい.
   - 等号否定 ($\neq$) などの算術演算を使ってもよい.

[‡]実際には, 曲がる回数最小化など色々ある

演習 1: 反復 0

$\mathcal{P}(\emptyset, \emptyset)$

$$
\begin{array}{ll}
\text{目的:} & 28x_1 + 33x_2 + 10x_3 + 45x_4 + 32x_5 \longrightarrow \text{最大} \\
\text{制約:} & 2x_1 + 3x_2 + x_3 + 5x_4 + 4x_5 \leq 7 \\
 & x_i = 0, 1 \, (i = 1, 2, 3, 4, 5)
\end{array}
$$

- $\mathcal{P}(\emptyset, \emptyset)$ の実数最適解 $\boldsymbol{x}_0 = (1, 1, 1, \frac{1}{5}, 0)^T$ を修正して得られる近似解 $\boldsymbol{x} = (1, 1, 1, 0, 0)^T$ を暫定解とする．
- 目的関数値 71 を暫定値 z^* とする．
- 自由変数 x_4 を選んで*，$\mathcal{P}(\emptyset, \emptyset)$ に分枝操作を施し，部分問題 $\mathcal{P}(\{4\}, \emptyset)$ と $\mathcal{P}(\emptyset, \{4\})$ を生成する．
- $\mathcal{A} = \{\mathcal{P}(\{4\}, \emptyset), \mathcal{P}(\emptyset, \{4\})\}$ とおく．

*実数最適解において，0-1 条件を満たさない変数を選択

演習 1: 反復 1

$\mathcal{P}(\{4\}, \emptyset)$

$$\begin{array}{ll} \text{目的:} & 28x_1 + 33x_2 + 10x_3 + 0 + 32x_5 \longrightarrow \text{最大} \\ \text{制約:} & 2x_1 + 3x_2 + x_3 + 0 + 4x_5 \leq 7 \\ & x_i = 0, 1\,(i = 1, 2, 3, 5) \end{array}$$

- 実数最適解は $(x_1, x_2, x_3, x_5)^T = (1, 1, 1, \frac{1}{4})^T$
- 目的関数値は 79 (この部分問題の上界値)
- $79 > z^* = 71$ (暫定値) なので終端できない.
- $\mathcal{P}(\{4\}, \emptyset)$ から，部分問題 $\mathcal{P}(\{4, 5\}, \emptyset)$ と $\mathcal{P}(\{4\}, \{5\})$ を生成
- $\mathcal{A} = \{\mathcal{P}(\{4, 5\}, \emptyset), \mathcal{P}(\{4\}, \{5\}), \mathcal{P}(\emptyset, \{4\})\}$ に更新

演習 1: 反復 2

$\mathcal{P}(\{4,5\},\emptyset)$

$$\begin{array}{rl} \text{目的:} & 28x_1 + 33x_2 + 10x_3 + 0 + 0 \longrightarrow \text{最大} \\ \text{制約:} & 2x_1 + 3x_2 + x_3 + 0 + 0 \leq 7 \\ & x_i = 0, 1 \, (i = 1, 2, 3) \end{array}$$

- 実数最適解は $(x_1, x_2, x_3)^T = (1, 1, 1)^T$
- 目的関数値は 71
- この解は 0-1 条件を満たすので終端できる．
- $71 \leq z^* = 71$ なので，暫定値・暫定解の更新はなし
- $\mathcal{A} = \{\mathcal{P}(\{4\},\{5\}), \mathcal{P}(\emptyset,\{4\})\}$ に更新

演習 1: 反復 3

$\mathcal{P}(\{4\},\{5\})$

$$
\begin{aligned}
\text{目的:} \quad & 28x_1 + 33x_2 + 10x_3 + 0 + 32 \longrightarrow \text{最大} \\
\text{制約:} \quad & 2x_1 + 3x_2 + x_3 + 0 + 4 \leq 7 \\
& x_i = 0, 1 \, (i = 1, 2, 3)
\end{aligned}
$$

- 実数最適解は $(x_1, x_2, x_3)^T = (1, \frac{1}{3}, 0)^T$
- 目的関数値は 71 (この部分問題の上界値)
- $71 \leq z^* = 71$ (暫定値) なので終端できる.
- $\mathcal{A} = \{\mathcal{P}(\emptyset, \{4\})\}$ に更新

演習 1: 反復 4

$\mathcal{P}(\emptyset, \{4\})$

$$\begin{array}{ll} \text{目的:} & 28x_1 + 33x_2 + 10x_3 + 45 + 32x_5 \longrightarrow \text{最大} \\ \text{制約:} & 2x_1 + 3x_2 + x_3 + 5 + 4x_5 \leq 7 \\ & x_i = 0, 1 \, (i = 1, 2, 3, 5) \end{array}$$

- 実数最適解は $(x_1, x_2, x_3, x_5)^T = (1, 0, 0, 0)^T$
- 目的関数値は 73
- この解は 0-1 条件を満たすので終端できる．
- $73 > z^* = 71$ なので，暫定値・暫定解を更新
  - 暫定解: $\boldsymbol{x} = (1, 0, 0, 1, 0)^T$
  - 暫定値: $z^* = 73$
- $\mathcal{A} = \emptyset$ に更新

演習 1: 反復 5

- $\mathcal{A} = \emptyset$ となったので，計算終了.
- 現時点の暫定解が最適解である.
  - 最適解: $\boldsymbol{x} = (1, 0, 0, 1, 0)^T$
  - 最適値: $z^* = 73$

この問題では，全部で 32 個ある部分問題のうち，4 個を解くことで元の問題の最適解を得ている.

解答例: ナンバーリンク (1/2)

線を結ぶ条件

- 各マス (i, j) から下のマスへの線の有無を変数 s_{ij} で，右のマスへの線の有無を変数 e_{ij} で表す*.

$$s_{ij},\ e_{ij} \in \{0, 1\}$$

- 数が記入されている数字マスからは 1 本だけ線が出る.

$$s_{(i-1)j} + e_{i(j-1)} + s_{ij} + e_{ij} = 1$$

- 空白の白マスからは 2 本または 0 本の線が出る.

$$s_{(i-1)j} + e_{i(j-1)} + s_{ij} + e_{ij} \leq 2$$
$$s_{(i-1)j} + e_{i(j-1)} + s_{ij} + e_{ij} \neq 1$$

*盤外への辺は 0 と考える.

解答例: ナンバーリンク (2/2)

同じ数字同士を線を結ぶ条件

- 各マスがどの数字と結ばれているかを変数 x_{ij} で表す.

$$x_{ij} \in \{1, 2, \ldots, m\} \qquad (m \text{ は最大の数字})$$

- 数字マスの場合は，記入されている値 a に等しい.

$$x_{ij} = a$$

- 線で結ばれているマス同士は同じ値を取る.

$$(s_{ij} = 1) \Rightarrow (x_{ij} = x_{(i+1)j})$$
$$(e_{ij} = 1) \Rightarrow (x_{ij} = x_{i(j+1)})$$