

最適化の数理——応用数理の視点

モデルとデータ

室田 一雄

計数工学科 (工学部)

数理情報学専攻 (情報理工学系)

<http://www.misojiro.t.u-tokyo.ac.jp/~murota>

1. 最適化とは...

2. モデルとは...

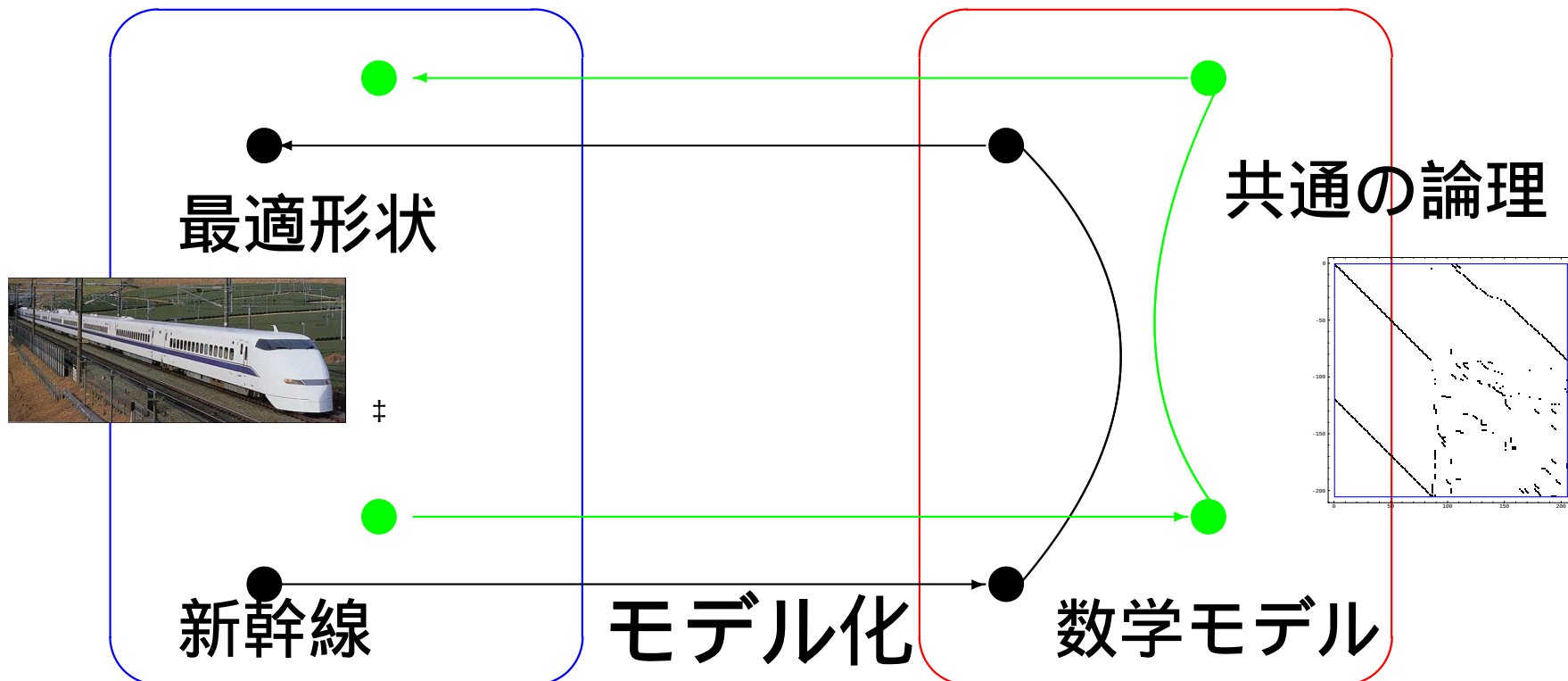
応用数理・数理工学 ― 方法論の学問

物（もの）

現象・現実

理（こと）

数理・論理



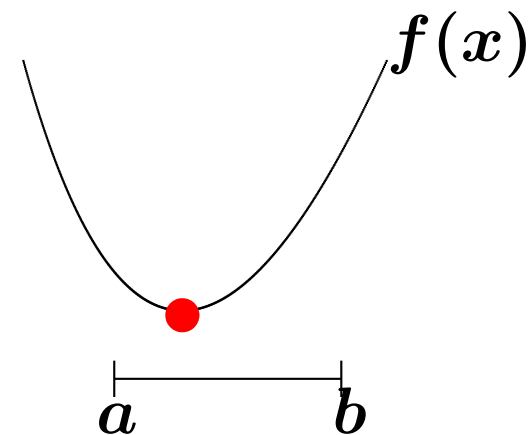
1. 最適化とは...

Optimization

最大最小問題

最小化 $f(x)$

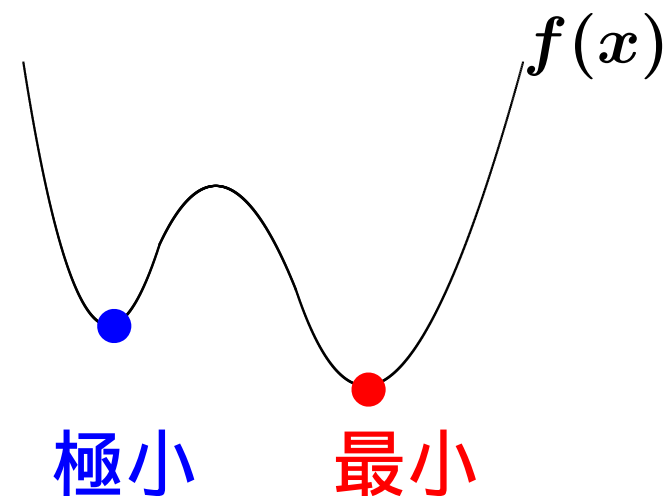
制約条件 $a \leq x \leq b$



最小化 $f(x_1, x_2, \dots)$

制約条件 $(x_1, x_2, \dots) \in S$

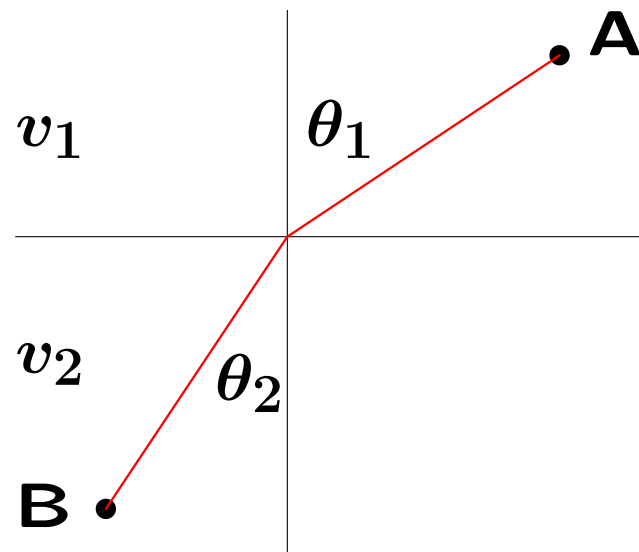
f, S は何？



自然は最適を選ぶ — 変分原理

スネルの法則: $\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{v_1}{v_2}$

- $f'(x) = 0$ の形



フェルマーの原理: 光は最短時間経路を進む

- $f(x) \rightarrow \min$ の形

- 最小作用の原理: 運動経路 = 作用の最小化
- エネルギー原理: 平衡状態 = エネルギーの最小化

変分法

人は最適を選ぶ — 最適設計



+

0系 (1964)



+

300系 (1992)



+

700系 (1999)

工学的な設計 = 性能 ↑ コスト ↓ の最適化

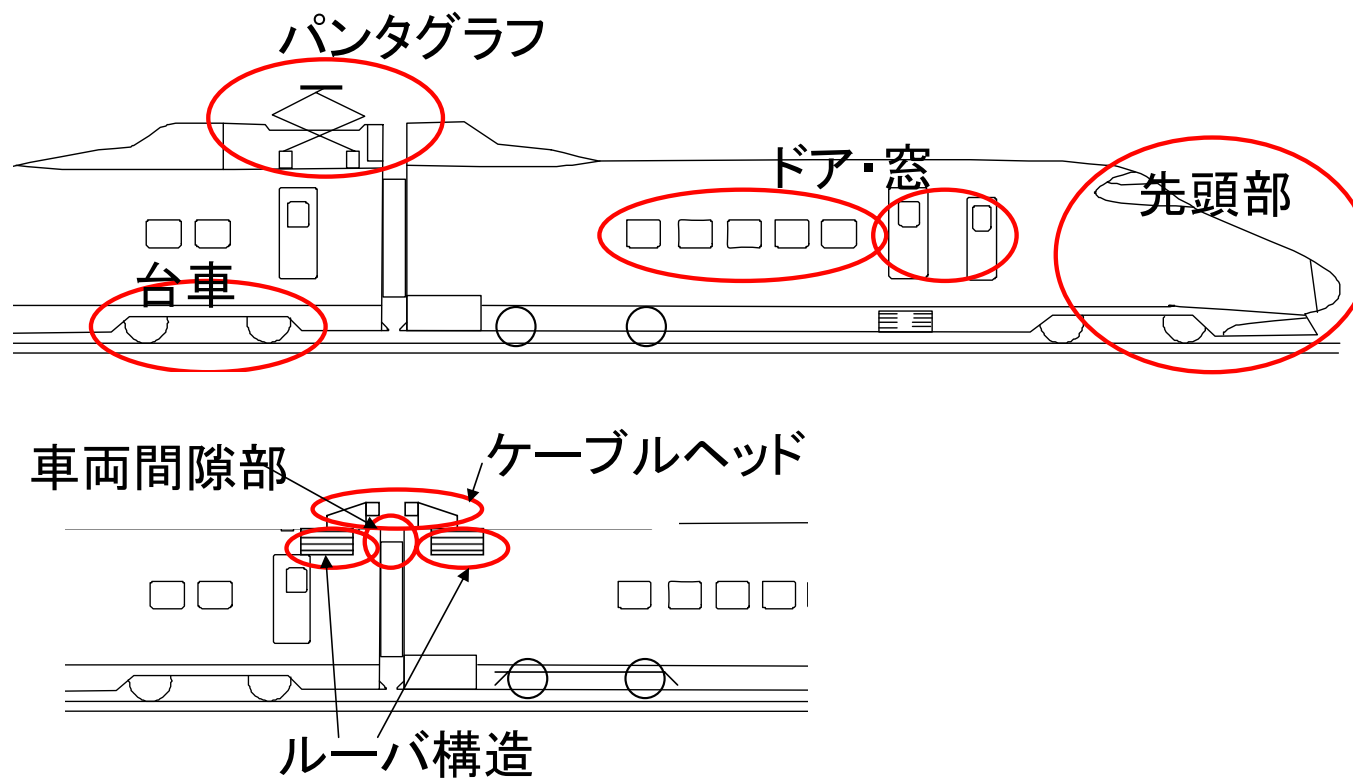
数式に表現する (モデリング)

計算する

実験する

製造する

車両空力音における主な音源個所



†

鉄道総合技術研究所 佐川明朗氏 提供

最適化の世界

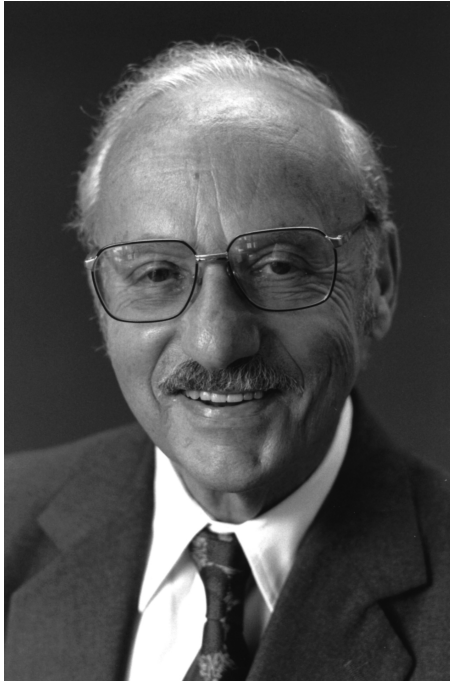
オペレーションズリサーチ (Operations Research)
数理計画法 (Mathematical Programming)

モデリング + 理論 + アルゴリズム
第1回 第2回 第3回

Beautiful and Useful
美しい数学 役に立つ数学

数理計画法の誕生

1947年 線形計画法



‡

G. Dantzig
(1914~2005)



‡

J. von Neumann
(1903~1957)



‡

L. V. Kantorovich
(1912~1986)

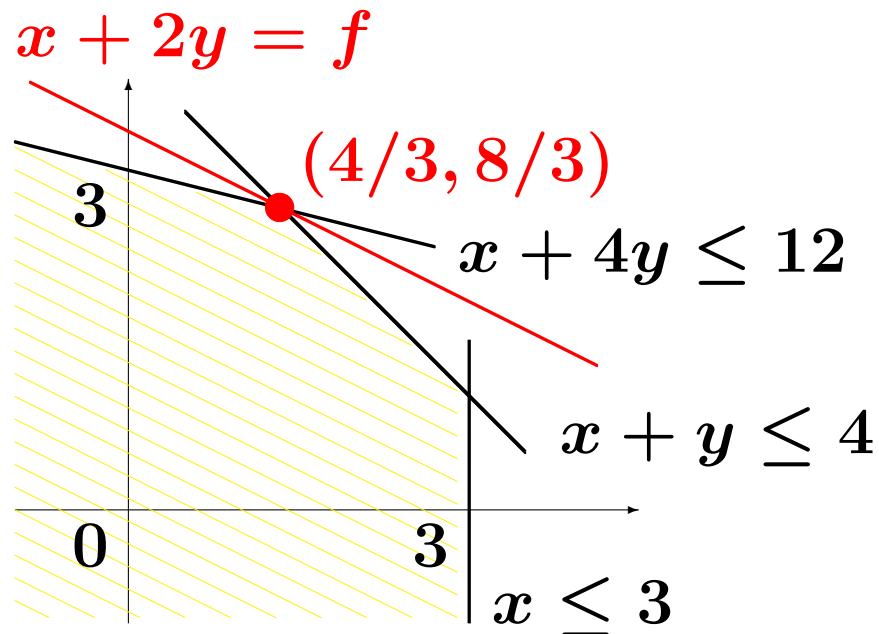
<http://www2.informs.org/Press/GeorgeDantzig.jpg>

<http://phil.elte.hu/redei/Utrecht/UtrechtNeumann.html>

<http://www.matematycy.interklasa.pl/images/matematycy/kantorovich.jpg>

2変数の線形計画問題

$$\begin{array}{ll}\text{Maximize} & x + 2y =: f \\ \text{subject to} & x + 4y \leq 12 \\ & x + y \leq 4 \\ & x \leq 3\end{array}$$



最適解 $(x, y) = \left(\frac{4}{3}, \frac{8}{3}\right)$

最適値 $f = \frac{4}{3} + 2 \cdot \frac{8}{3} = \frac{20}{3}$

線形計画の一般形

Maximize $c^\top x$
subject to $Ax \leq b$

Max. $x_1 + 2x_2$
s.t. $x_1 + 4x_2 \leq 12$
 $x_1 + x_2 \leq 4$
 $x_1 \leq 3$

モデリング : 線形近似でも実用上有用

理論 : 双対定理

アルゴリズム : 単体法

産業社会への応用

生産計画

工学的な線形代数学

大規模計算

行列のイメージ

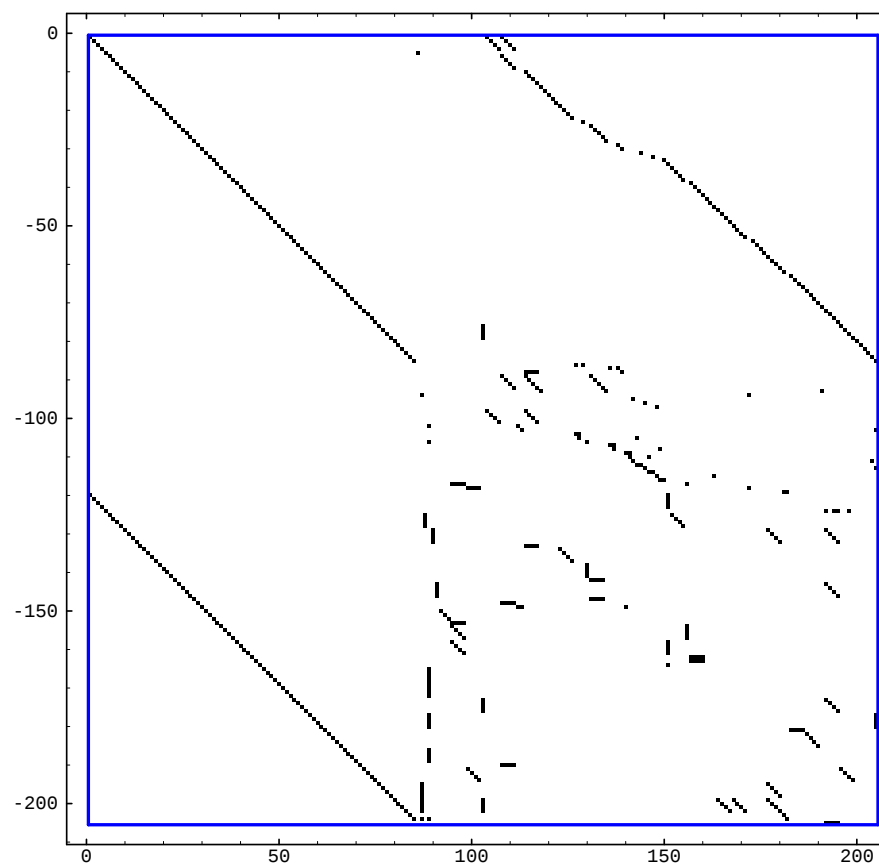
数学の教科書

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 2 \end{bmatrix}$$

白いところは0

大規模・疎行列

工学の問題



線形計画法の双対性 — 転置行列の意味

主問題

$$\begin{array}{ll}\text{Max.} & c^\top x \\ \text{s.t.} & Ax \leq b\end{array}$$

双対問題

$$\begin{array}{ll}\text{Min.} & b^\top y \\ \text{s.t.} & A^\top y = c \\ & y \geq 0\end{array}$$

$$\begin{array}{ll}\text{Max.} & x_1 + 2x_2 \\ \text{s.t.} & x_1 + 4x_2 \leq 12 \\ & x_1 + x_2 \leq 4 \\ & x_1 \leq 3\end{array}$$

$$\begin{array}{ll}\text{Min.} & 12y_1 + 4y_2 + 3y_3 \\ \text{s.t.} & y_1 + y_2 + y_3 = 1 \\ & 4y_1 + y_2 = 2 \\ & y_1, y_2, y_3 \geq 0\end{array}$$

双対定理： 主問題の最大値＝双対問題の最小値

双対問題を解いてみる

$$(u, v, w) = (y_1, y_2, y_3)$$

$$\begin{array}{ll} \text{Minimize} & 12u + 4v + 3w =: g \cdots (1) \\ \text{subject to} & u + v + w = 1 \cdots (2) \\ & 4u + v = 2 \cdots (3) \\ & u, v, w \geq 0 \cdots (4) \end{array}$$

$$(3) \rightarrow v = 2 - 4u \geq 0$$

$$(2) \rightarrow w = 1 - u - v = -1 + 3u \geq 0$$

$$(1) \rightarrow g = 12u + 4(2 - 4u) + 3(-1 + 3u) = \boxed{5 + 5u}$$

$$(4) \rightarrow \boxed{1/3 \leq u \leq 1/2}$$

$$\text{最適解} \quad (u, v, w) = \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\right) \quad \text{最適値} \quad g = 5 + 5 \cdot \frac{1}{3} = \frac{20}{3}$$

$$\boxed{\text{主問題の最大値} = 20/3 = \text{双対問題の最小値}}$$

最適化の発展 (連続変数)

1947年	線形計画	Dantzig
1960年	非線形計画, ニュートン法	Powell, Fletcher
1970年	凸解析・双対理論	Rockafellar
1979年	楕円体法	Khachiyan
1984年	内点法	Karmarkar
1995年	半正定値計画	Alizadeh, Nesterov, Nemirovski

理論： 線形 / 凸 / 非線形

環境： 計算パワーの増大

半正定値計画 (現代の線形計画)

線形計画(LP)

$$\text{Min. } c \cdot x$$

$$\text{s.t. } a_i \cdot x = b_i \\ (i = 1, \dots, m)$$

$$x \geq 0$$

x ベクトル

$c \cdot x$ ベクトルの内積

$x \geq 0$ 非負ベクトル

半正定値計画(SDP)

$$\text{Min. } C \bullet X$$

$$\text{s.t. } A_i \bullet X = b_i \\ (i = 1, \dots, m)$$

$$X \succeq O$$

X 対称行列

$$C \bullet X = \text{Tr}(CX)$$

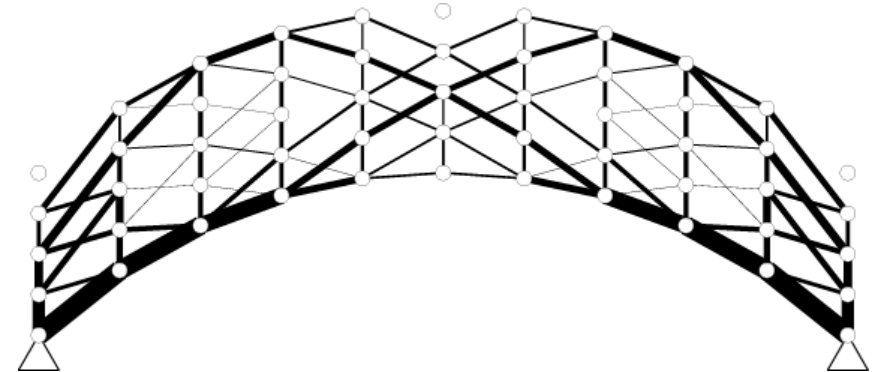
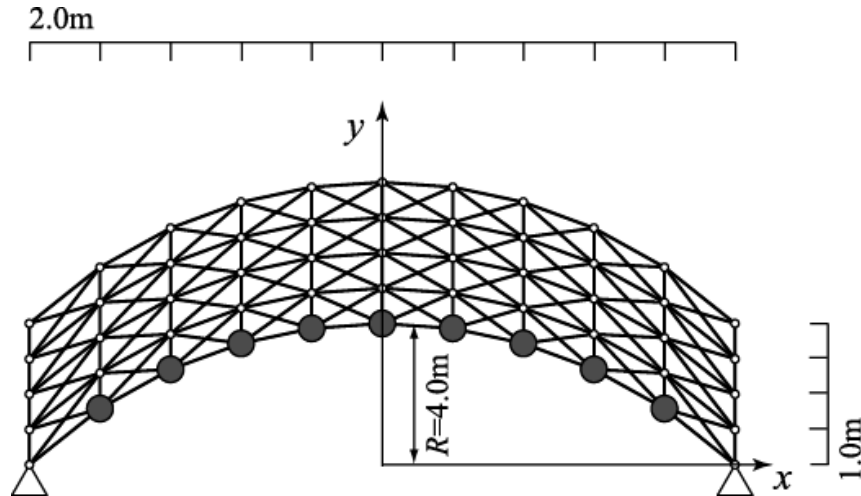
$X \succeq O$ 半正定値

$$(\iff z^\top X z \geq 0, \forall z)$$

半正定値計画法 による 最適設計

アーチ状平面トラス †

(計数工学科 寒野善博 講師)



問題：「固有振動数 $\geq$ 所与の α 」の下で 重量最小化

(地震と共振しない条件: $\alpha = 4$ 程度)

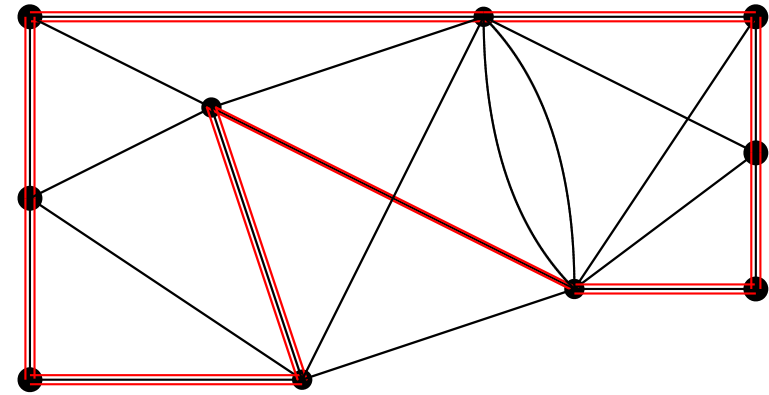
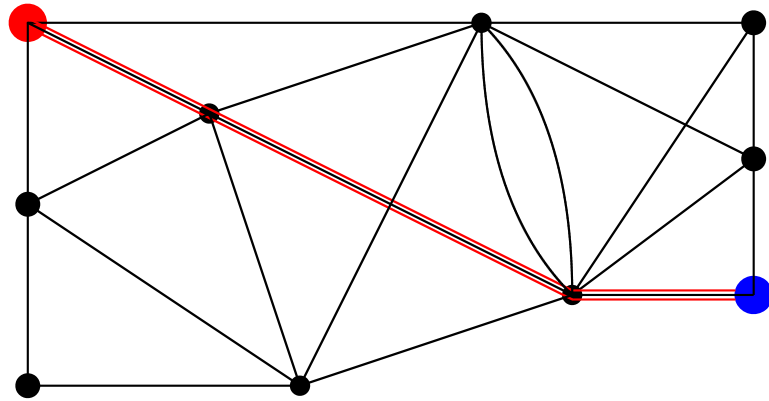
数理的ポイント：

- ・ 固有振動数 $\iff$ 行列の一般化固有値 $Kx = \lambda Mx$
- ・ 任意の固有値 $\lambda \geq \alpha \iff K - \alpha M$ が半正定値

離散最適化

連続 / 離散

離散最適化



最短路問題

巡回セールスマン問題

簡単に解ける (経験的事実) なかなか解けない
Dijkstra法 (アルゴリズム理論) NP 困難

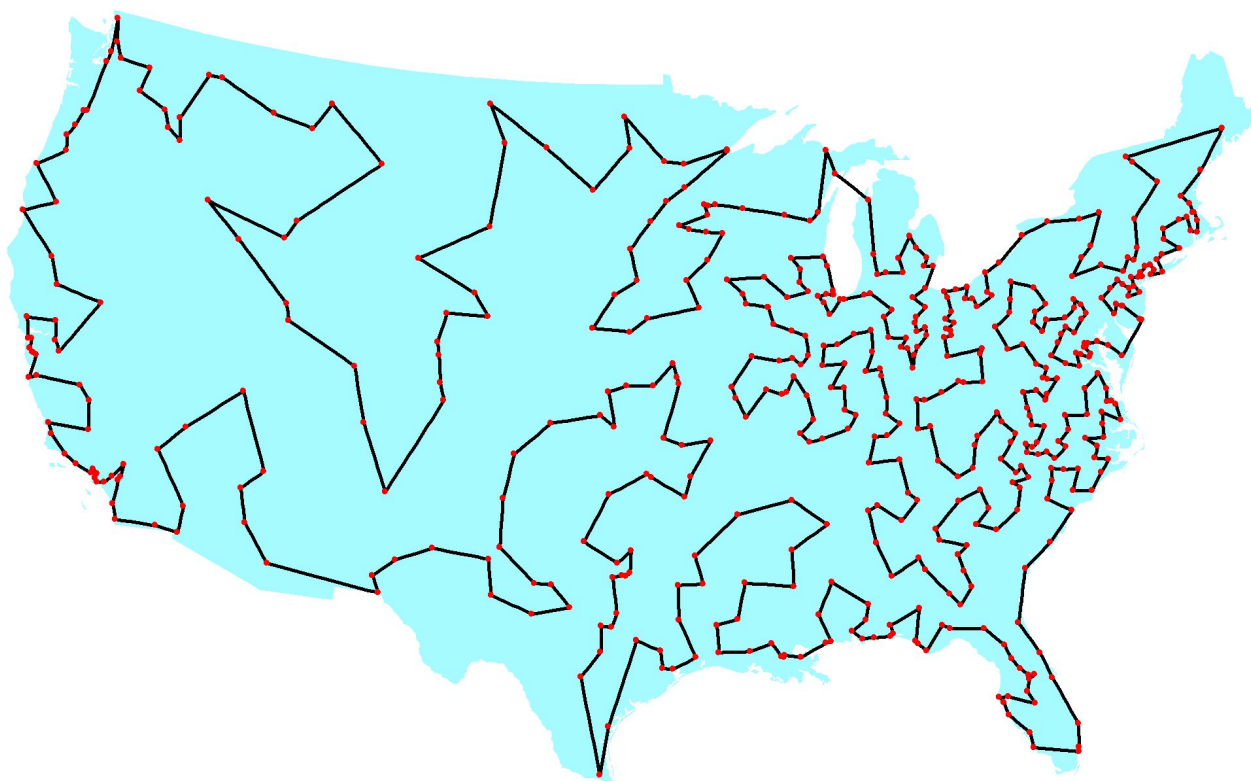
最 短 路 問 題

簡単に解ける

巡回セールスマン問題

なかなか解けない

⇒ デモ（計数工学科 土村展之氏作成）

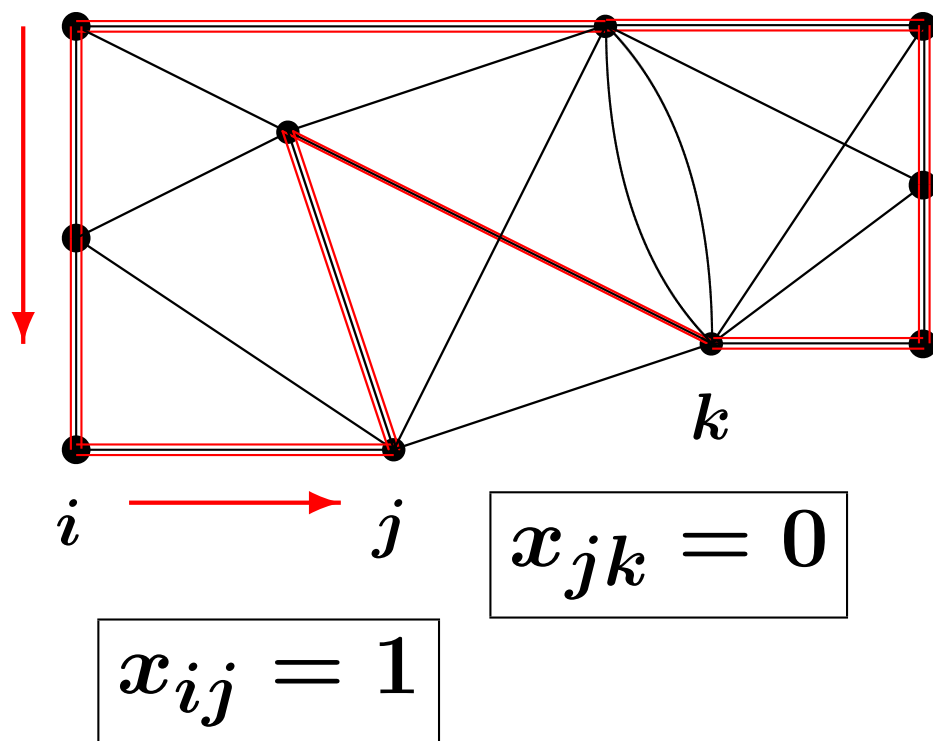


532 cities, M. Padberg–G. Rinaldi (1987) ‡

<http://www.tsp.gatech.edu/history/pictorial/att532.html>

TSPの数式表現

(整数計画法)

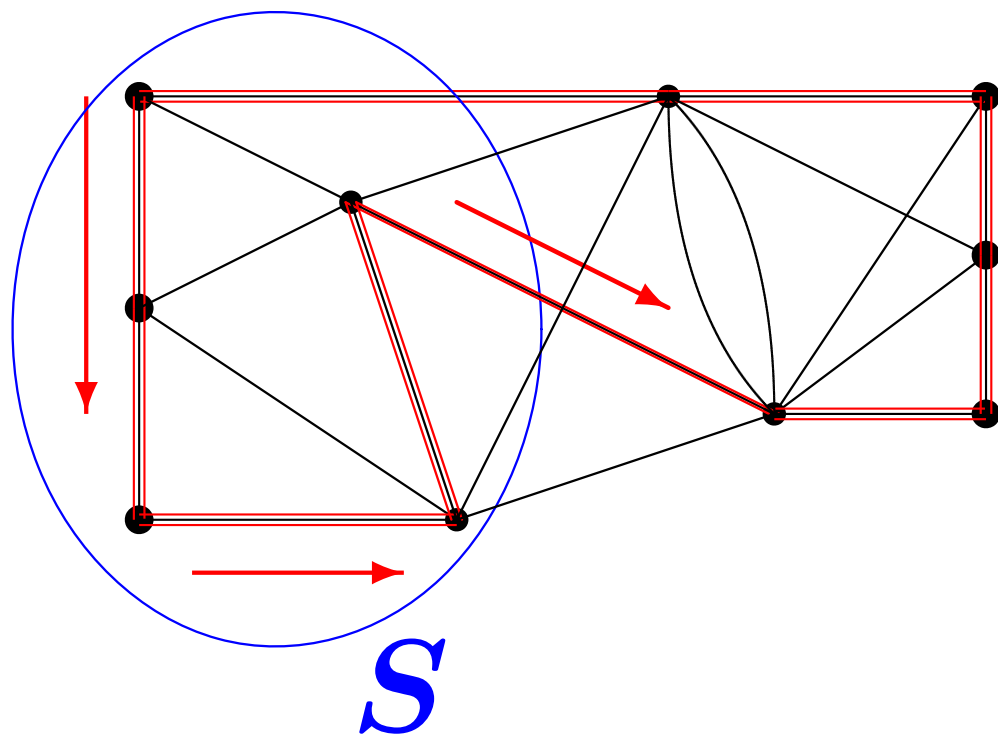


$$\begin{aligned} \text{Min.} \quad & \sum_i \sum_j d_{ij} x_{ij} \\ \text{s.t.} \quad & \sum_j x_{ij} = 1 \\ & \sum_i x_{ij} = 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \forall S : \quad & \sum_{i \in S} \sum_{j \in \bar{S}} x_{ij} \geq 1 \\ & x_{ij} \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

TSPの数式表現

(整数計画法)



$$\begin{aligned} \text{Min.} \quad & \sum_i \sum_j d_{ij} x_{ij} \\ \text{s.t.} \quad & \sum_j x_{ij} = 1 \\ & \sum_i x_{ij} = 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \forall S : \quad & \sum_{i \in S} \sum_{j \in \bar{S}} x_{ij} \geq 1 \\ & x_{ij} \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

離散最適化理論の発展

1935年	● マトロイド	Whitney
1947年	線形計画法 (単体法)	Dantzig
1956年	ネットワーク・フロー	Ford, Fulkerson
1960年	整数計画法 (切除平面法)	Gomory
1970年	● NP 完全性	Cook, Levin
	● グラフ・アルゴリズム	Tarjan
	劣モジュラ関数	Edmonds
1980年	楕円体法	Khachiyan
1995年	近似アルゴリズム	Goemans, Williamson
2000年	離散凸解析	Murota

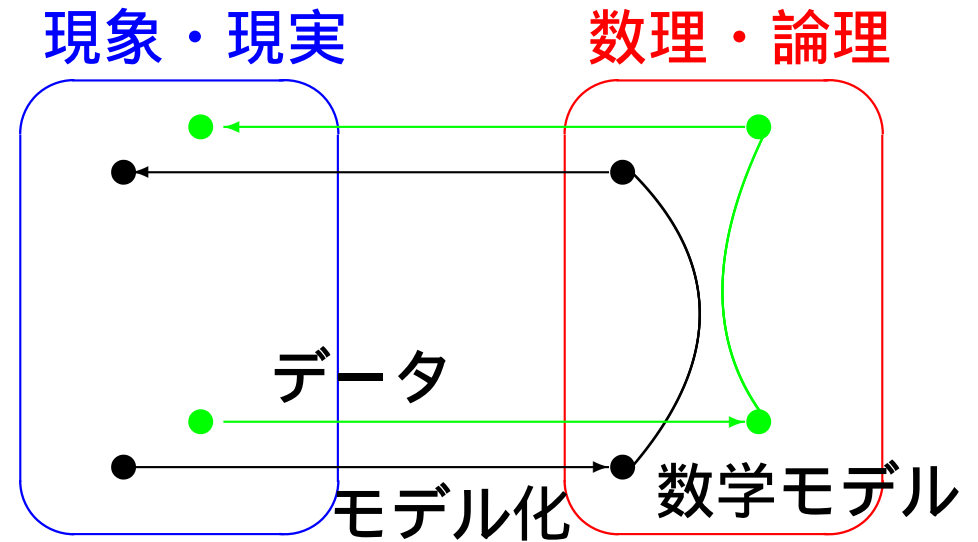
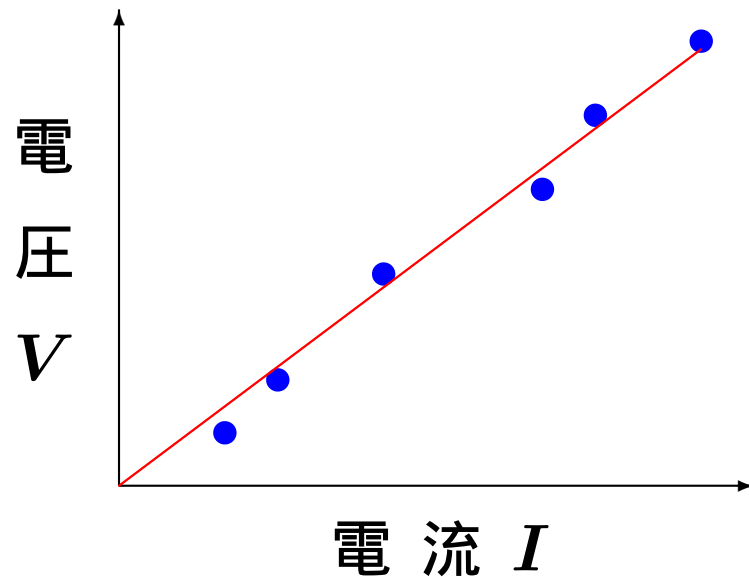
2. モデルとは...

Mathematical Model

データとモデル

実験式

$$V = RI \text{ or } V = RI^2$$

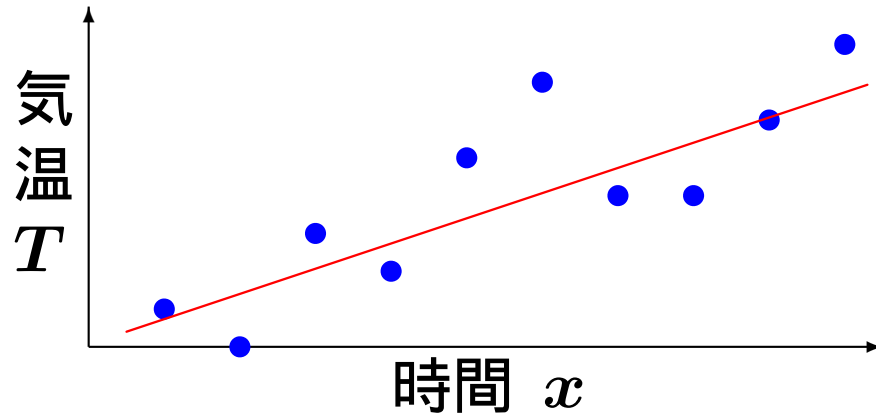


観測データを用いて
真のモデルを求める

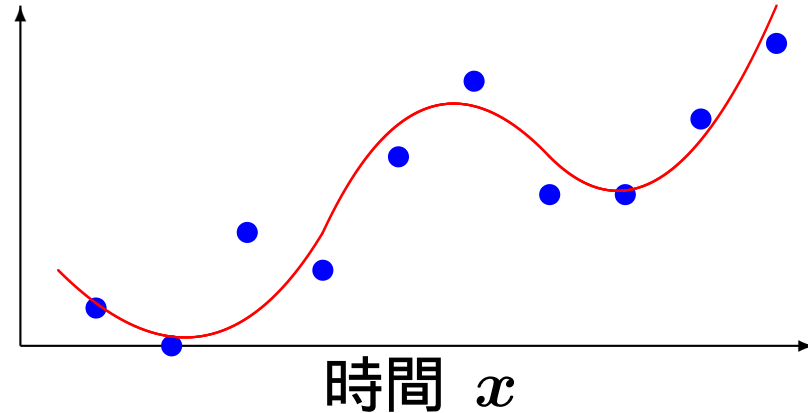
最小2乗法: $f(R) = \sum_i (V_i - RI_i)^2 \rightarrow \min$

モデルの適切さ

1 次式 $T = ax + b$



4 次式 $T = ax^4 + bx^3 + \dots$



複雑なモデルは

- データに適合する (過去の説明)
- 誤差に弱く不安定 (将来の予測)

データへの適合性 ———— モデルの単純性



情報量規準

赤池情報量規準 (Akaike Information Criterion)

(データへの適合性) (モデルの単純性)

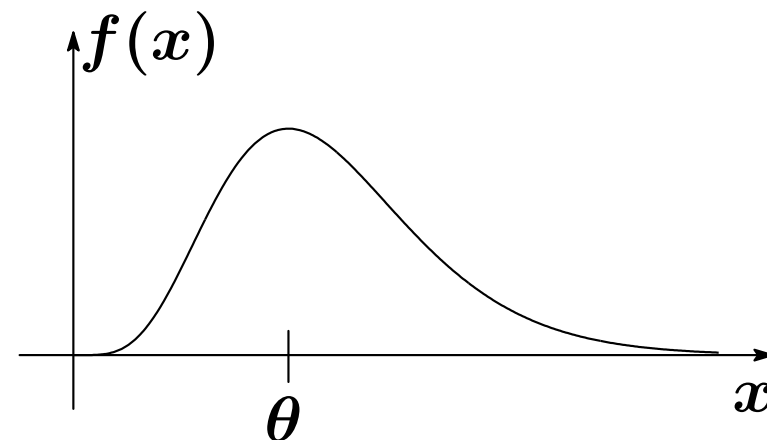
$$AIC = -2(\text{対数尤度}) + 2(\text{パラメータ数})$$

1974年 赤池弘次

対数尤度

確率密度: $f(x; \theta)$

データ: $x_1, x_2, \dots, x_n$



尤度 (ゆうど): $L(\theta) = f(x_1; \theta) \times f(x_2; \theta) \times \dots \times f(x_n; \theta)$

対数尤度: $\log L(\theta)$

尤度 $L(\theta)$ の最大化 $\rightarrow$ パラメータ θ の推定値 $\hat{\theta}$

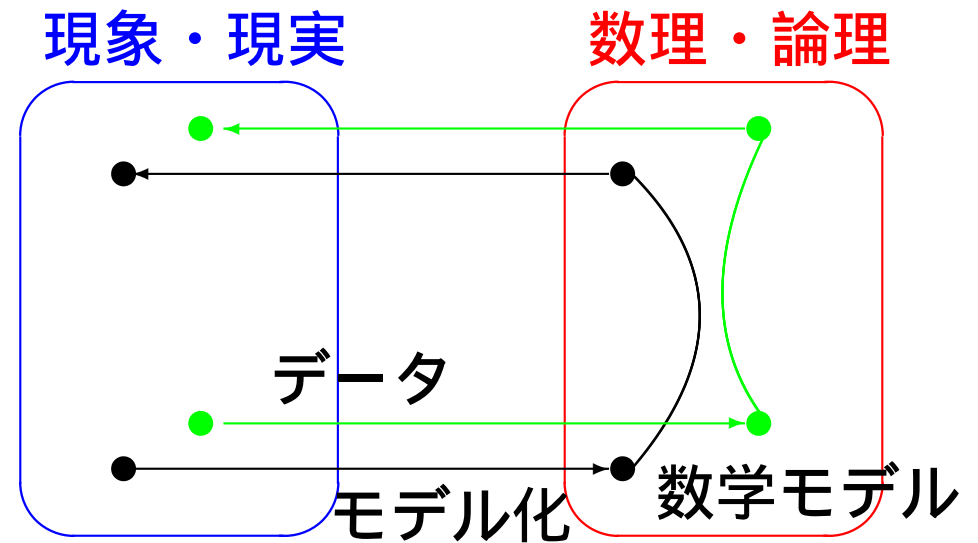
AIC = $-2(\text{対数尤度}) + 2(\text{パラメータ数})$

$$= -2 \log L(\hat{\theta}) + 2 \dim \theta$$

モデルの意味

モデルは

- 現実と数理の架け橋
- 一意に決まらない



自然科学(理学)：

真のモデル

自然の真の姿の正しい記述

技術科学(工学)：

適切なモデル

目的を実現するための道具

モデリングの科学

データの質的变化

今まで

実験・観察で作り出す

農業試験

実験計画法（データ取得法）

分散分析（データ分析法）

今（ネット時代）

何処からか集めてくる

検索エンジン

（Yahoo! Google）

分散的蓄積（情報爆発）

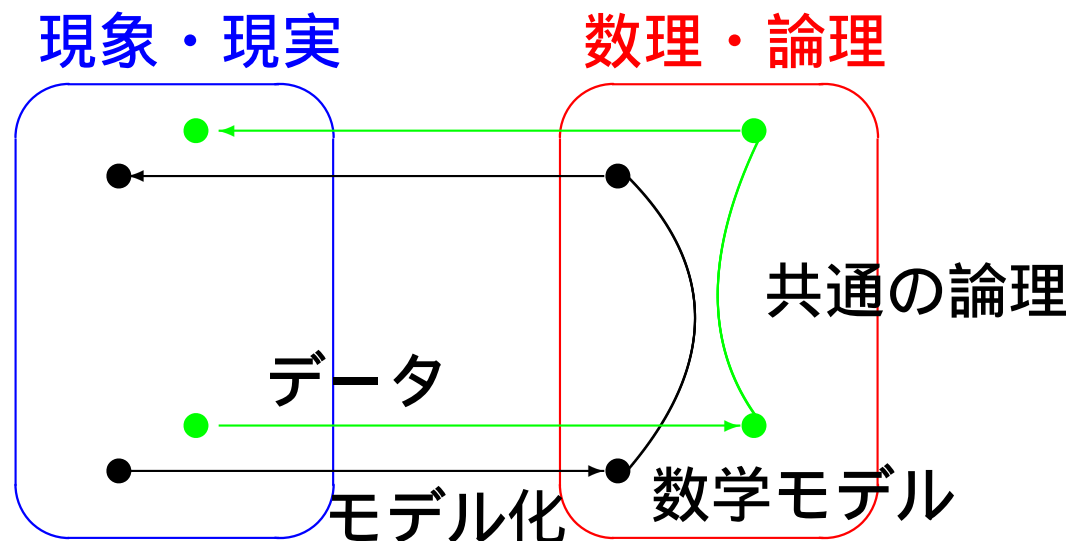
データマイニング

基礎数理：線形代数（固有値）、確率の考え方...

最適化の世界

連続 / 離散

線形 / 凸 / 非線形



モデリング + 理論 + アルゴリズム

Beautiful and Useful

美しい数学

役に立つ数学