現代技術：情報技術論（第７回） 2012-05-28

最適化の数理

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

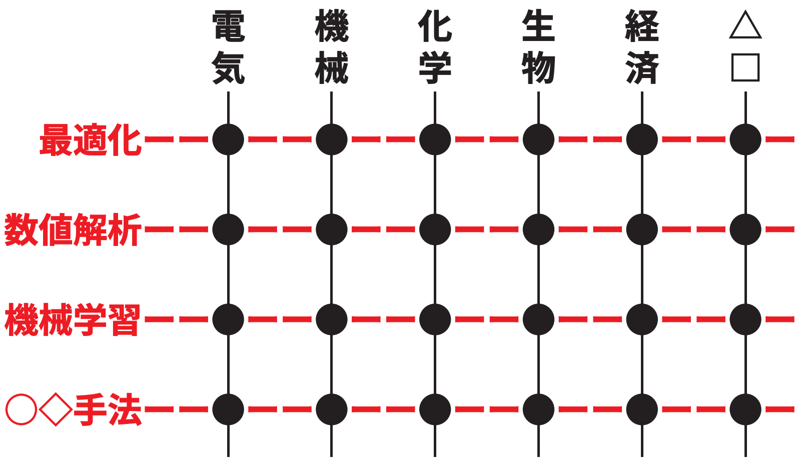
モデル化の数理

1. モデル化と抽象化
2. モデルとデータ
3. 技術の科学

最適化の数理

1. 最適化とは
2. 概念と抽象化
3. 凸という概念

抽象化と 手法の分野横断性（復習）



技術の科学 ⇒ 情報技術（復習）

計算 (computation)

- 計算とは何か　　Gödel, Türing
- 計算機の原理　　von Neumann

情報 (information)

- 情報の定量的扱い　　Shannon
- サイバネティックス　　Wiener

計画・決定 (planning/decision)

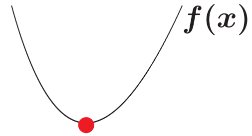
- 線形計画法　　Dantzig
- ゲーム理論　　von Neumann, Morgenstern

⇒ 最適化理論，制御理論，意思決定論（OR）

1. 最適化とは

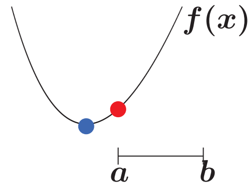
最大最小問題

最小化　$f(x)$　$\boxed{\Rightarrow \quad f'(x) = 0}$



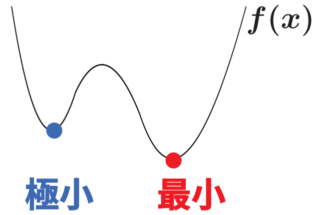
最小化　$f(x)$

制約条件　$a \le x \le b$



最小化　$f(x_1, x_2, \ldots)$

制約条件　$(x_1, x_2, \ldots) \in S$



自然は最適を選ぶ　変分原理

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

● $\boxed{f'(x) = 0 \text{ の形}}$

フェルマーの原理：光は最短時間経路を進む

● $\boxed{f(x) \to \min \text{ の形}}$

- 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

人は最適を選ぶ　最適意思決定

本郷から駒場まで
どう歩こうか？

(13.7 km)

Goo 地図

人は最適を選ぶ　最適設計

0系 (1964)

300系 (1992)

700系 (1999)

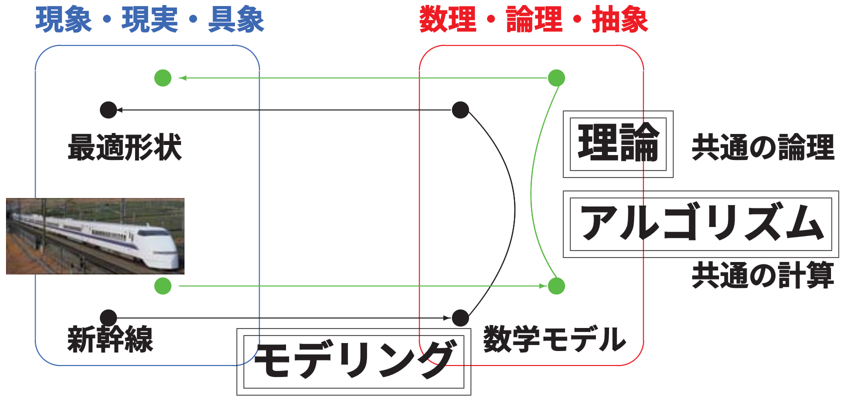
工学的な設計＝ 性能↑ コスト↓ の最適化

数式に表現する (モデリング)

⇒ 計算する ⇒ 実験する ⇒ 製造する

最適化の世界　　数理計画法

モデリング ＋ 理論 ＋ アルゴリズム



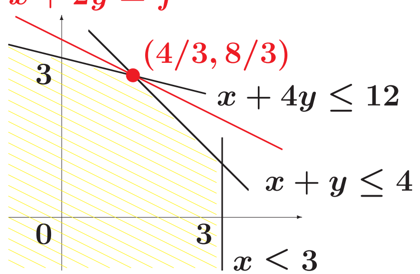
数理計画法の誕生　　1947年 線形計画法

G. Dantzig	J. von Neumann	L. V. Kantorovich
(1914～2005)	(1903～1957)	(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

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



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

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

線形計画の一般形

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

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

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 ⇔ **線形代数の新展開**
生産計画　大規模計算

線形計画法の双対性 — 転置行列の意味

主 問 題
Max. $c^\top x$
s.t. $Ax \le b$

双 対 問 題
Min. $b^\top y$
s.t. $A^\top y = c$
$y \ge 0$

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

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

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

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

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

(3) → $v = 2 - 4u \qquad \ge 0$

(2) → $w = 1 - u - v = -1 + 3u \qquad \ge 0$

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

(4) → $\boxed{1/3 \le u \le 1/2}$

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

主問題の最大値 ＝ 20/3 ＝ 双対問題の最小値

最適化の発展

1947年　線形計画法

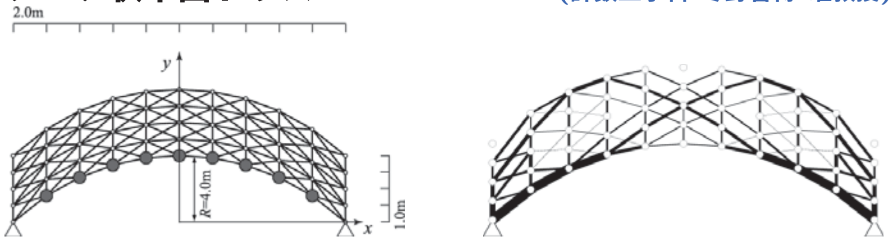
↓ **モデル化＋理論＋アルゴリズムの進歩**
計算パワーの増大

2000年　半正定値計画法(凸計画法)
離散凸解析

「凸」概念を軸とした進歩

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 准教授）



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: $\alpha = 40$程度）

数理的ポイント：

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

固有値の物理イメージ ＝ 固有振動数

バネ系（1自由度）

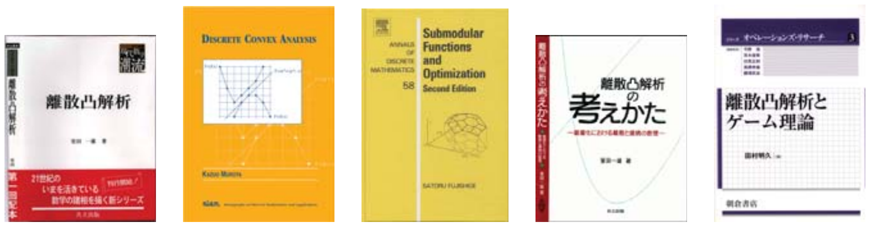
- Hookeの法則： $f = -kx$
- 運動方程式： $f = m\alpha = m\ddot{x}$
- $x = \exp(\mathrm{i}\omega t)$ とおくと $\ddot{x} = -\omega^2 x$

$$\Longrightarrow \boxed{kx = \omega^2 mx}$$

バネ系（多自由度） $\Longrightarrow \boxed{Kx = \omega^2 Mx}$

離散凸解析 の 参考書

室田一雄: 離散凸解析，共立出版	2001
K. Murota: Discrete Convex Analysis, SIAM	2003
S. Fujishige: Submodular Functions and Optimization, 2nd ed. (第VII章), Elsevier	2005
室田一雄: 離散凸解析の考えかた，共立出版	2007
田村明久: 離散凸解析とゲーム理論，朝倉書店	2009



2. 概念と抽象化

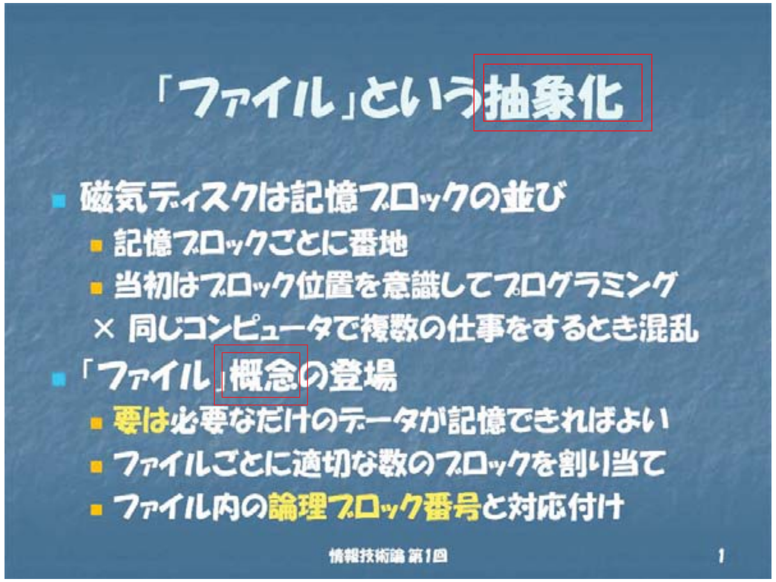
—— 「理論」との付き合い方

高校の数学 → 大学の数学

抽象的な定義や概念がたくさんでてきて……

- 何を言ってるのか分からない……
- 何をやりたいのか分からない……

第１回（近山先生）のスライドより



「概念」：「外延」と「内包」 （広辞苑 第六版）

例の列挙

外延(extension)：
ある概念の適用されるべき**事物の範囲**。
例えば金属という概念の外延は金・銀・銅・鉄などである。

本質の抽出

内包(intension; connotation)：
概念の適用される範囲（外延）に属する諸事物が**共通に有する徴表（性質）**の全体。（以下，略）

数学概念の例：偶数とは？

外延：

偶数 $= \{2, 4, 6, 8, 10, 12, \cdots\}$

（2，4，6，8，10，12 など のことである）

内包：

偶数 $= \{x \mid x$ は自然数，x は２で割り切れる$\}$

（2で割り切れる自然数のことである）

経験 から 概念へ

特徴・機能を抽象

経験 →→→→→→→→→ 概念

抽象的な〜／具体的な〜

(近山先生のスライド)

■「ファイル」概念の登場

■ 要は必要なだけのデータが記憶できればよい

(機能の抽象化)

定義から定理へ　(数学世界)

経験 →→→→→→ 定義 →→→→→→ 定理

本質の記述　　特徴・機能の記述

「概念 ＝ 定義」 しかし，定義を読んでも

- 何を言ってるのか分からない……
- 何をやりたいのか分からない……

「概念 ＝ 本質・特徴・機能」だとすれば，

「概念 ＝ 定義と定理の総体」と考えた方がいい

→ 定義だけ読んで分らなくて当然

数学的概念を理解するには

●どのように生じるのか　実例は？

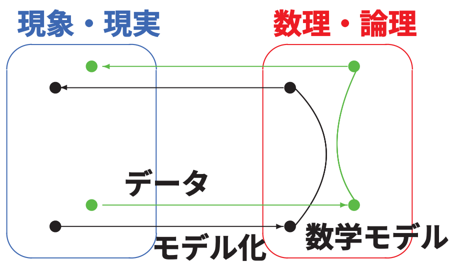
●どのように扱えるのか　数理は？

●どのように使えるのか　応用は？

例えば……

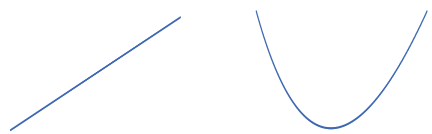
・行列

・行列の固有値



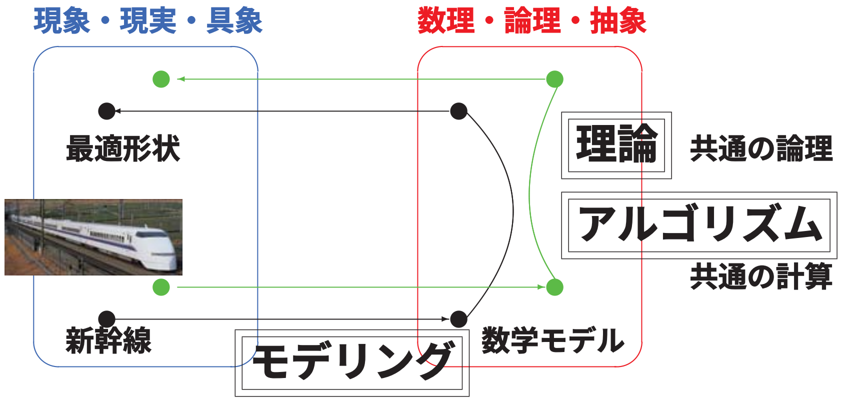
3. 凸という概念

線形 から 凸 へ

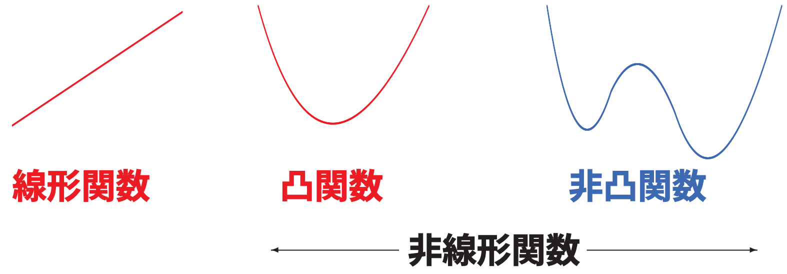


最適化の世界

1947　線形計画　→　2012　凸計画



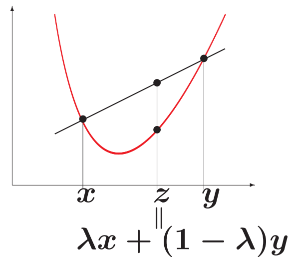
凸 関 数　(理論の主役)



定義　f が凸関数 $\Longleftrightarrow$

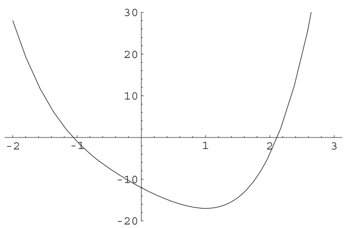
$$\lambda f(x) + (1-\lambda) f(y) \geq f(\lambda x + (1-\lambda) y)$$

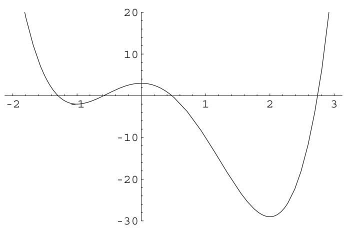
$$(0 < \forall\ \lambda < 1)$$



凸関数 と 凸でない関数

$f(x) = x^4 + 2x^2 - 8x - 12$　　$f(x) = 3x^4 - 4x^3 - 12x^2 + 3$





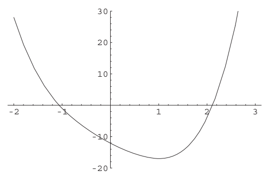
凸関数の判定法　(滑らかな関数に対して)

fが凸関数 $\Longleftrightarrow$ すべての x に対して $f''(x) \geq 0$

$f(x) = x^4 + 2x^2 - 8x - 12$

$\Rightarrow f'(x) = 4x^3 + 4x - 8$

$\Rightarrow f''(x) = 12x^2 + 4 > 0 \Rightarrow$ 凸

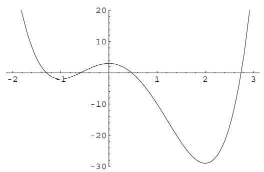


$f(x) = 3x^4 - 4x^3 - 12x^2 + 3$

$\Rightarrow f'(x) = 12x^3 - 12x^2 - 24x$

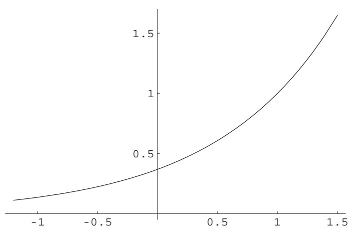
$\Rightarrow f''(x) = 36x^2 - 24x - 24$

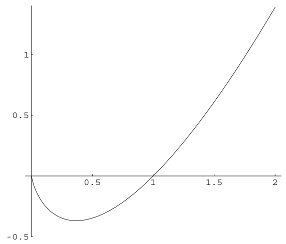
$\Rightarrow f''(0) = -24 \quad < 0 \quad \Rightarrow$ 凸でない



凸関数の例

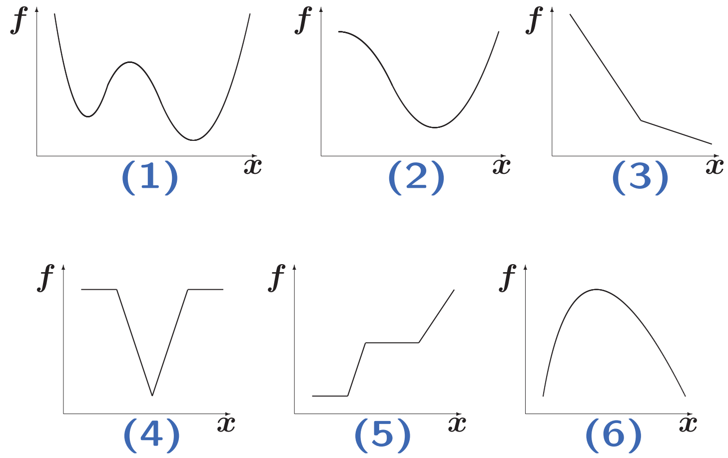
$$f(x) = \exp(x-1) \qquad f(x) = x \log x$$





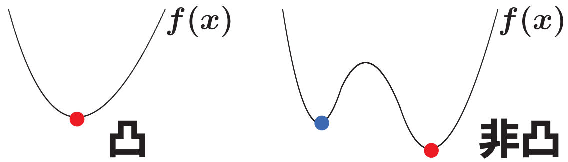
$f''(x) = \exp(x-1)$ $\color{red}{> 0}$ $\qquad f''(x) = 1/x$ $\color{red}{> 0}$

凸関数 と 凸でない関数



最適化 における 凸関数 の 意義

局所的最小 ＝ 大域的最小

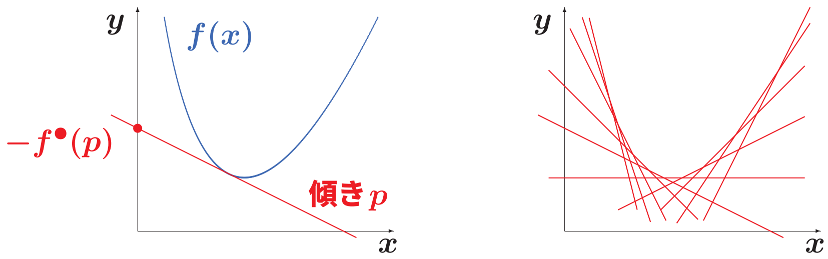


種々の双対性

- ルジャンドル変換
- 最大最小定理

ルジャンドル変換

凸関数 ＝ 接線の包絡線



ルジャンドル変換 $f^{\bullet}(p) = \max_{x} \{p \cdot x - f(x)\}$

$\boxed{\text{定理：凸関数 } f \mapsto f^{\bullet} \mapsto f^{\bullet\bullet} = f}$

裏 の 裏 は 表

ルジャンドル変換の計算法

$$f^\bullet(p) = \max_x \ \{\underline{p\cdot x - f(x)}\}$$

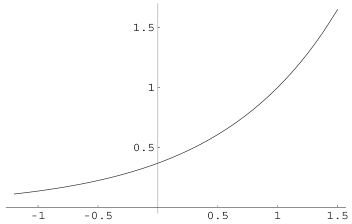
$$\Rightarrow \ \frac{d}{dx}(\underline{p\cdot x - f(x)}) = p - f'(x) = 0$$

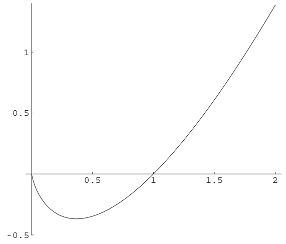
$$\Rightarrow \ p = f'(x)$$

$$\Rightarrow \ x = x(p)$$

$$\Rightarrow \ f^\bullet(p) = p\cdot x(p) - f(x(p))$$

ルジャンドル変換の例（1）





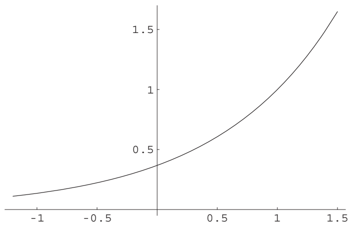
$$f(x) = \exp(x-1) \quad \longrightarrow \quad g(p) = p\log p$$

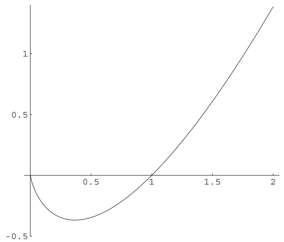
$$f^\bullet(p) = g(p)$$

$$p = f'(x) = \exp(x-1) \ \Rightarrow \ x = 1 + \log p$$

$$\Rightarrow \ f^\bullet(p) = p\cdot x - f(x) = p\cdot(1+\log p) - p = p\log p$$

ルジャンドル変換の例（2）





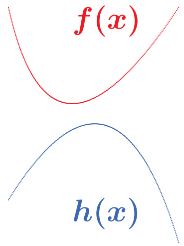
$$f(x) = \exp(x-1) \quad \longleftarrow \quad g(p) = p\log p$$

$$f(x) = g^\bullet(x)$$

$$x = g'(p) = 1 + \log p \ \Rightarrow \ p = e^{x-1}$$

$$\Rightarrow \ g^\bullet(x) = p\cdot x - g(p) = xe^{x-1} - (x-1)e^{x-1} = e^{x-1}$$

最大・最小定理



ルジャンドル変換

$$f^\bullet(p) = \max_x\{p\cdot x - f(x)\}$$

$$h^\circ(p) = \min_x\{p\cdot x - h(x)\}$$

フェンシェル 双対定理 f: 凸 h: 凹

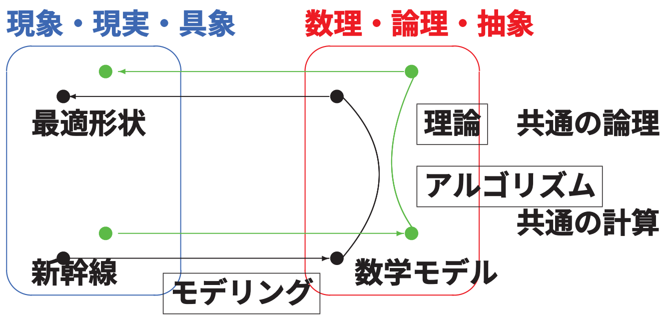
$$\min_x\{f(x) - h(x)\} = \max_p\{h^\circ(p) - f^\bullet(p)\}$$

線形計画法の双対定理：

$$\min\{c^\top x \mid Ax = b, x \geq 0\} = \max\{b^\top y \mid A^\top y \leq c\}$$

最適化の数理：まとめ

モデリング ＋ 理論 ＋ アルゴリズム



- 線形計画法
- 概念と定義
- 凸関数

参考文献

最適化とは

今野浩：最適化時代の旗手：21世紀のOR，日科技連出版社，2007

概念と抽象化

新井紀子：数学は言葉，東京図書，2009

凸という概念

室田一雄：離散凸解析，共立出版，2001

室田一雄：離散凸解析の考えかた，共立出版，2007