大規模知識処理特論

最適化技法 (2)

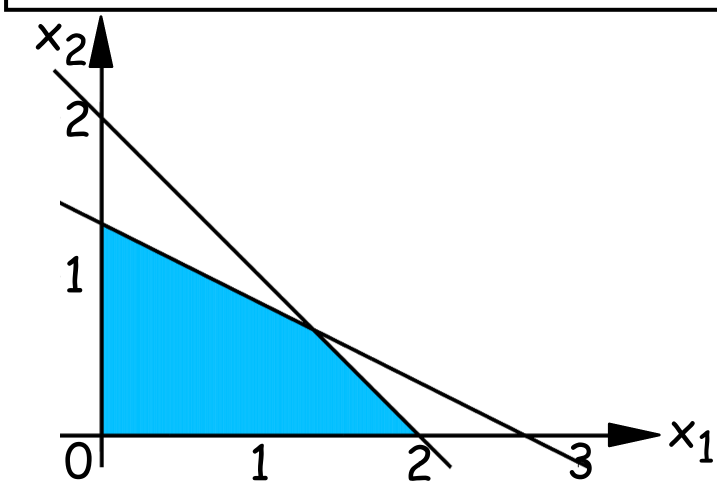
北海道大学 情報科学研究院
堀山 貴史

前回の復習＋α： 線形計画問題と標準形

- minimize $z = -4x_1 - 5x_2$
  subject to
  $$2x_1 + 2x_2 + x_3 = 4$$
  $$3x_1 + 6x_2 + x_4 = 8$$
  $$x_1, x_2, x_3, x_4 \geqq 0$$

標準形への変形

maximize $z = 4x_1 + 5x_2$
subject to
$$2x_1 + 2x_2 \leqq 4$$
$$3x_1 + 6x_2 \leqq 8$$
$$x_1, x_2 \geqq 0$$



直観的な観察：

- 実行可能領域の**端点**を探すと、最適解が見つかる
- では、実行可能領域の**端点**はどうやって見つける？
  (標準形は、良いヒント)

標準形（ベクトル表現）（例）

- minimize $z = -4x_1 - 5x_2$

  subject to
  $$2x_1 + 2x_2 + x_3 = 4$$
  $$3x_1 + 6x_2 + 4x_4 = 8$$
  $$x_j \geqq 0 \quad (j = 1, 2, \ldots, 4)$$

- minimize $z = (-4 \;\; -5 \;\; 0 \;\; 0) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$

subject to
$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 8 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \geqq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

標準形（ベクトル表現）

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & & a_{mn} \end{pmatrix}$$

- minimize $z = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j$

  subject to $\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \quad (i = 1, 2, \ldots, m)$

  $x_j \geqq 0 \quad (j = 1, 2, \ldots, n)$

- minimize $z = c^T x$

  subject to $A x = b$

  $x \geqq 0$

$c^T = (c_1, c_2, \ldots, c_n)$

$A = (a_{ij})$ $m \times n$ 行列

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

標準形 (ベクトル表現)

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & & a_{mn} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix}$$

$A = (A_1 \ \ A_2 \cdots A_n)$ と見ることもできる

(つまり、n 個の縦ベクトルを横に並べたもの)

- minimize $z = c^T x$

  subject to $A x = b$

  $x \geqq 0$

$c^T = (c_1, c_2, \ldots, c_n)$

$A = (a_{ij})$ m×n 行列

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

基底（例）

p. 3 の制約

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 8 \end{pmatrix}$$

- 2つの制約を満たす
  4変数 (x_1, x_2, x_3, x_4) は無限に存在
  - $(x_3, x_4) = (0, 0)$ にすると？
  - つまり **x_1, x_2 に着目**すると？
    → 解が一意に定まる

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 8 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 4 \\ 8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4/3 \\ 2/3 \end{pmatrix}$$

  - **基底ベクトル**: $\{ \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix} \}$
  - **基底行列**: $\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix}$
  - **基底変数**: x_1, x_2, **非基底変数**: x_3, x_4
  - 基底ベクトル $\{ \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix} \}$ に対する

基底解: $\hat{x} = (4/3, 2/3, 0, 0)$

基底（例）

p. 3 の制約

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 8 \end{pmatrix}$$

- 基底ベクトルの
  取り方を変えると？

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 8 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 4 \\ 8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8/3 \\ -4/3 \end{pmatrix}$$

- **基底ベクトル**: $\left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$
- **基底行列**: $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 0 \end{pmatrix}$
- **基底変数**: x_1, x_3, **非基底変数**: x_2, x_4
- 基底ベクトル $\left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$ に対する
  基底解: $\hat{x} = (8/3, 0, -4/3, 0)$

補足

- 基底ベクトルの取り方によっては、
  逆行列が無い場合もある

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} と \begin{bmatrix} 2 \\ 6 \end{bmatrix}$$ が一次従属
(一次独立でない)

- $$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & & a_{mn} \end{bmatrix}$$
  - 仮定1: $n \geqq m$
  - 仮定2: 行列 A のランクは m
  - 仮定3: 最適解が存在する

後で緩めることができる

基底ベクトル、基底行列

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix}$$

$$A = (A_1 \quad A_2 \ \cdots \ A_n)$$

- **基底ベクトル**
  選び方は、唯一ではない
  - A の **m 個**の線形独立な列ベクトル
    基底 $\mathcal{B} = \{ A_{i_1}, A_{i_2}, \ldots, A_{i_m} \}$
- **非基底ベクトル**
  - それ以外の **$(n-m)$ 個**の列ベクトル

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{B} = \left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix} \right\}$$

- **基底行列** B
  - **m 個**の基底ベクトルを集めた m × m 正方行列

$$B = (A_{i_1} \quad A_{i_2} \cdots A_{i_m})$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix}$$

- **非基底行列** N
  - **(n - m) 個**の非基底ベクトルを集めた
    m × (n - m) 行列

基底変数、基底解

$x_B = (x_1, x_2)$
$x_N = (x_3, x_4)$
$\hat{x} = (8/3, 2/3, 0, 0)$

- **基底変数**
  - m 個の基底ベクトル $A_{i_1}, A_{i_2}, \ldots, A_{i_m}$ に対応する **m 個**の変数 $x_{i_1}, x_{i_2}, \ldots, x_{i_m}$
  - m 次元ベクトル $x_B = (x_{i_1}, x_{i_2}, \ldots, x_{i_m})$
- **非基底変数**
  - それ以外の **(n−m) 個**の変数
  - (n−m) 次元ベクトル x_N
- 基底ベクトル $\mathcal{B} = \{A_{i_1}, A_{i_2}, \ldots, A_{i_m}\}$ に対する **基底解 $\hat{x}$**
  - $$\hat{x}_j = \begin{cases} 0 & (A_j \notin \mathcal{B}) \\ B^{-1}b \text{ の第}\ell\text{成分} & (A_j \in \mathcal{B}, x_j = x_{i_\ell}) \end{cases}$$

Bx = b の解

p. 3 の標準形

練習問題: 基底解

- minimize $z = -4\,x_1 - 5\,x_2$

  subject to
  $$\begin{aligned} 2\,x_1 + 2\,x_2 + x_3 \quad\quad &= 4 \\ 3\,x_1 + 6\,x_2 \quad\quad + x_4 &= 8 \\ x_j \geqq 0 \ (j = 1, 2, \ldots, 4) \end{aligned}$$

- $A_1 = \binom{2}{3},\ A_2 = \binom{2}{6},\ A_3 = (\quad),\ A_4 = (\quad)$
- A_1 と A_2 は独立 $\leftarrow (A_1 A_2)$ の rank$=$m or 行列式 $\neq 0$
- $(A_1\ \ A_2)\binom{x_1}{x_2} = \binom{4}{8}$ を解くと、$x_1 =\quad$, $x_2 =\quad$ を得る
- よって、A_1, A_2に対する基底解は $x^T = (\ \ ,\ \ ,\ \ ,\ \ )$ である

- 基底成分(基底解の成分)がすべて非負

  → **実行可能基底解** (basic feasible solution)

練習問題:　基底解

- p. 3 の制約から、4つの列ベクトル A_1 ～ A_4 が得られる。ここから2つの基底ベクトル A_i A_j の選び方は6通りある。それぞれに対し、基底解を求めなさい。
- 各基底解から (x_1, x_2) に対応する部分を取り出す。これらは、もとの最適化問題の制約条件を示した図のどの位置に相当するか確認しなさい。

もとの最適化問題　maximize　$4x_1 + 5x_2$

subject to　$2x_1 + 2x_2 \leqq 4$

$3x_1 + 6x_2 \leqq 8$

$x_1 \geqq 0,\ x_2 \geqq 0$

p. 3 の標準形

標準形と基底解

- minimize $z = -4x_1 - 5x_2$

  subject to
  $$2x_1 + 2x_2 + x_3 = 4$$
  $$3x_1 + 6x_2 + x_4 = 8$$
  $$x_1, x_2, x_3, x_4 \geqq 0$$

$Ax = b$
$x \geqq 0$

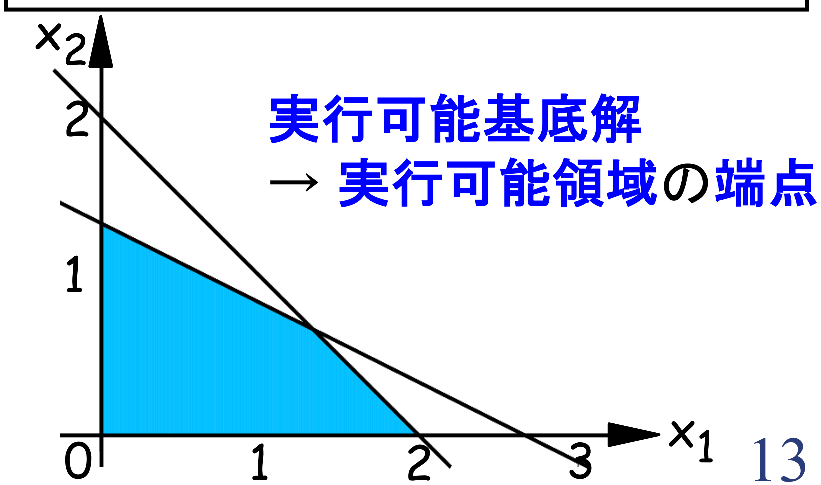
$$\begin{array}{cccc} A_1 & A_2 & A_3 & A_4 \\ \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

標準形への変形

maximize $z = 4x_1 + 5x_2$

subject to
$$2x_1 + 2x_2 \leqq 4$$
$$3x_1 + 6x_2 \leqq 8$$
$$x_1, x_2 \geqq 0$$

- A_1, A_2の基底解 $(\frac{4}{3}, \frac{2}{3}, 0, 0)$
- A_1, A_3の基底解 $(\frac{8}{3}, 0, -\frac{4}{3}, 0)$
- A_1, A_4の基底解 $(2, 0, 0, 2)$
- A_2, A_3の基底解 $(0, \frac{4}{3}, \frac{4}{3}, 0)$
- A_2, A_4の基底解 $(0, 2, 0, -4)$
- A_3, A_4の基底解 $(0, 0, 4, 8)$



実行可能基底解の退化 (縮退)

- 実行可能基底解 x が**退化 (縮退)** している
  - x が n-m 個より多くのゼロを持つ
- 2つの異なる基底が同じ基底解 x に対応している

→ x は退化している

練習問題: 退化 (縮退)

- "最適化技法 (1)" 資料 p. 20 (a), p. 21 の
  線形計画問題について、
  (1) 標準形に変形しなさい
  (2) 退化している実行可能基底解が存在するか、
  確認しなさい

実行可能基底解の退化（縮退）

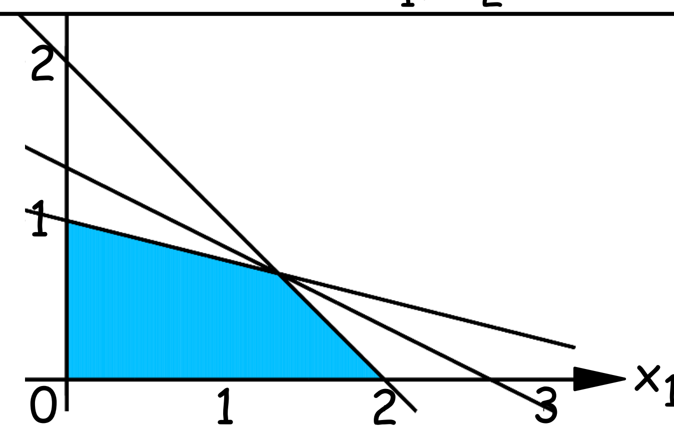
- minimize $z = -4x_1 - 5x_2$
  subject to
$$
\begin{aligned}
2x_1 + 2x_2 + x_3 \qquad\qquad &= 4\\
3x_1 + 6x_2 + \qquad x_4 \qquad &= 8\\
x_1 + 4x_2 + \qquad\qquad x_5 &= 4\\
x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 &\geqq 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{array}{ccccc}
A_1 & A_2 & A_3 & A_4 & A_5\\
\begin{pmatrix}2\\3\\1\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}2\\6\\4\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}
\end{array}
$$

maximize $z = 4x_1 + 5x_2$
subject to
$$
\begin{aligned}
2x_1 + 2x_2 &\leqq 4\\
3x_1 + 6x_2 &\leqq 8\\
x_1 + 4x_2 &\leqq 4\\
x_1, x_2 &\geqq 0
\end{aligned}
$$

- A_1, A_2, A_3の基底解 $\left(\frac{4}{3}, \frac{2}{3}, 0, 0, 0\right)$
- A_1, A_2, A_4の基底解 $\left(\frac{4}{3}, \frac{2}{3}, 0, 0, 0\right)$
- A_1, A_2, A_5の基底解 $\left(\frac{4}{3}, \frac{2}{3}, 0, 0, 0\right)$

$\vdots$

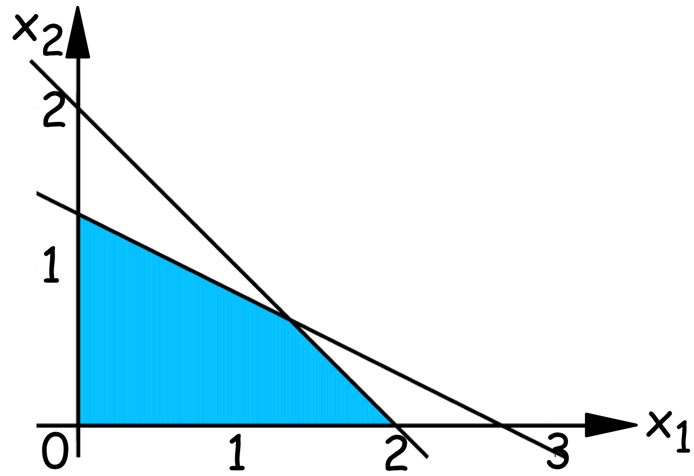


練習問題: 基底解

- p. 15 の問題の基底解を、すべて列挙しないさい
  - A_i は 5 個
  - その中から 3 個を、基底変数として選ぶ

ここまでの まとめ

- 実行可能基底解
  → 実行可能領域の端点
- 基底ベクトルと基底解が対応
- **すべて**の基底ベクトルの取り方で基底解を求めれば、最適解が分かる

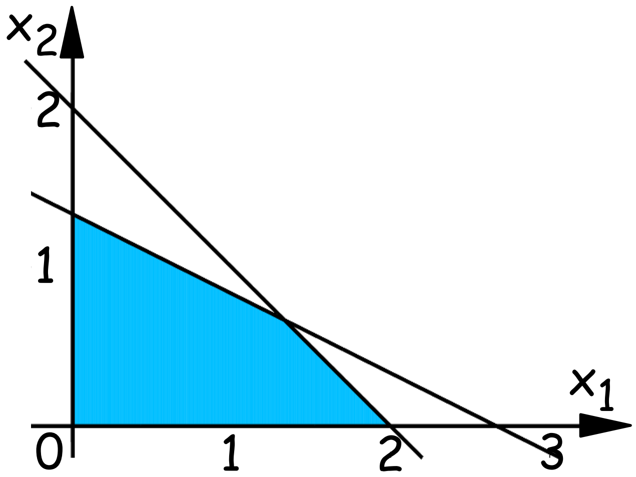


線形計画法
単体法（シンプレックス法）

- 基底解を、すべて調べるの？
- もっと良い方法は？
  目的関数値を改善させるように
  実行可能基底解を渡り歩く（単体法）

その前に: 実行可能領域と端点

- 補題: 実行可能領域 F は、凸集合である
- 定義: $x \in F$ が**端点**
  - 互いに異なる2点 x', x'' の凸結合で表せるような $x', x'' \in F$ が存在しない
- 性質:
  - F は**有限個の端点**を持つ
  - **F は端点の凸包**として表される



- 凸集合 S
  - 任意の $x', x'' \in S$, 任意の α $(0 \leqq \alpha \leqq 1)$ に対して $\alpha x' + (1-\alpha)x'' \in S$ が成立
- 点集合 S' の凸包
  - S' を含む最小の凸集合

シンプレックス辞書（辞書）

- minimize $z = -2x_1 + x_2 + x_3 - x_4$
  subject to
  $x_1 + 2x_2 - x_3 + x_4 = 0$
  $2x_1 - 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = 9$
  $x_1, x_2, x_3, x_4 \geqq 0$

- A_2, A_3の基底解
  $\left(0, \frac{9}{4}, \frac{9}{2}, 0\right)$ … 実行可能解

- 辞書
  - 制約式を**基底変数**について解き、**目的関数の式に代入**

現在の
目的関数値

- $z = \boxed{27/4} - 19/4\, x_1 - 21/4\, x_4$
- $x_2 = 9/4 - 5/4\, x_1 - 7/4\, x_4$
- $x_3 = 9/2 - 3/2\, x_1 - 5/2\, x_4$

基底変数　基底解での値　非基底変数

基底解の移動

- $z = 27/4 - 19/4\, x_1 - 21/4\, x_4$
- $x_2 = 9/4 - 5/4\, x_1 - 7/4\, x_4$
- $x_3 = 9/2 - 3/2\, x_1 - 5/2\, x_4$

- 現在の基底解では、$x_1 = x_4 = 0$
- 目的関数の式での x_1, x_4 の係数は、$-19/4, -21/4$
- x_4 を Δ だけ増やすと…
  - 目的関数値を減らせる: $27/4 - 21/4\,\Delta$
  - x_4 単独で増やすと、制約条件を満たさない
    → **他の非基底変数**は**固定**したまま ($x_1 = 0$)
    基底変数 (x_2, x_3) を**変化**させる

基底解の移動 (つづき)

- $z = 27/4 - 21/4\, x_4$
- $x_2 = 9/4 - 7/4\, x_4$
- $x_3 = 9/2 - 5/2\, x_4$

- **他の非基底変数**は**固定**したまま ($x_1 = 0$)
- x_4 を 0 から増やしていく
  - x_2 が減っていく ($x_4 = 9/7$ の時、$x_2 = 0$)
  - x_3 が減っていく ($x_4 = 9/5$ の時、$x_3 = 0$)

- **実行可能性を保つ** ($x_i \geqq 0$) には、$x_4 = 9/7$ で止める
  - $x_2 = 0$ … x_2 を非基底変数に
  - x_4 を基底変数に

基底解の移動 （つづき）

- $z = 27/4 - 19/4\, x_1 - 21/4\, x_4$
- $x_2 = 9/4 - 5/4\, x_1 - 7/4\, x_4$
- $x_3 = 9/2 - 3/2\, x_1 - 5/2\, x_4$

辞書の更新

- x_2 を非基底変数に、x_4 を基底変数にする
- $x_2 = \ldots$ の式を、$x_4 = \ldots$ の式に変更し、他の式に代入

- $z = -9/4 + 19/5\, x_1 + 7/5\, x_2$
- $x_4 = 9/7 - 5/7\, x_1 - 4/7\, x_2$
- $x_3 = 9/5 + 6/5\, x_1 - 2/5\, x_2$

練習問題: 基底解の移動

- 以下のシンプレックス辞書において、x_2, x_3 が基底変数、x_1, x_4 が非基底変数となるように辞書を更新しなさい

$$
\begin{aligned}
z &= \quad\; - 4 x_1 - 6 x_2 \\
x_3 &= 4 - 2 x_1 - 2 x_2 \\
x_4 &= 9 - 3 x_1 - 6 x_2
\end{aligned}
$$

最適辞書

- 目的関数の式で、どの非基底変数の係数も正
  - 目的関数の値を、減らせない

- **すべての実行可能解**で、
  $x_2, x_4 \geqq 0$ なので $z \geqq -9/4$
- $x^T = (9/5, 0, 9/5, 0)$ は
  $z = -9/4$ で **最適**

これは、**最適辞書**

最適値

最適解 $x^T = (9/5, 0, 9/5, 0)$

- $z = \boxed{-9/4} + 19/5\,x_2 + 7/5\,x_4$
- $x_1 = 9/5 - 4/5\,x_2 - 7/5\,x_4$
- $x_3 = 9/5 + 6/5\,x_2 - 2/5\,x_4$

単体表

$$\begin{aligned} z &= 27/4 - 19/4\, x_1 - 21/4\, x_4 \\ x_2 &= 9/4 - 5/4\, x_1 - 7/4\, x_4 \\ x_3 &= 9/2 - 3/2\, x_1 - 5/2\, x_4 \end{aligned}$$

- 辞書を**単体表**で表す

		x_1	x_4
z	27/4	- 19/4	- 21/4
x_2	9/4	- 5/4	- 7/4
x_3	9/2	- 3/2	- 5/2

現在の目的関数値

非基底変数

基底変数

相対コスト係数

非基底変数の値の増加に対する目的関数の値の変化率

基底解での値

- **ピボット演算**
  - (r, s) を中心とするピボット
  - r 個目の基底変数と s 個目の非基底変数を交換
  - 例: 上の単体表で、(1, 1) のピボット
    - x_2 = … の式を x_1 = … の式に変更し、他の式に代入

ピボットアウト変数（基底から出る変数）

ピボットイン変数（基底に入る変数）

単体法 (シンプレックス法)

		x_1	x_2
z	0	- 4	- 6
x_3	4	- 2	- 2
x_4	9	- 3	- 6

minimize $z = -4x_1 - 6x_2$

subject to
$$2x_1 + 2x_2 + x_3 = 4$$
$$3x_1 + 6x_2 + x_4 = 9$$
$$x_1, x_2, x_3, x_2 \geqq 0$$

		x_1	x_4
z	-9	- 1	1
x_3	1	- 1	1/3
x_2	3/2	- 1/2	- 1/6

(2, 2) のピボット

2行目の変数と2列目の変数の入れ換え

z		

(,) のピボット

後半の まとめ

- 実行可能基底解 (実行可能領域の端点) を単体表で表す
- 単体法 (シンプレックス法) の概要
  - 実行可能基底解を見つけ (次回)、出発点とする
  - ピボット演算: 基底変数と非基底変数を交換
    → 実行可能領域の端点を渡り歩く
    (目的関数値を改善できなくなるまで)