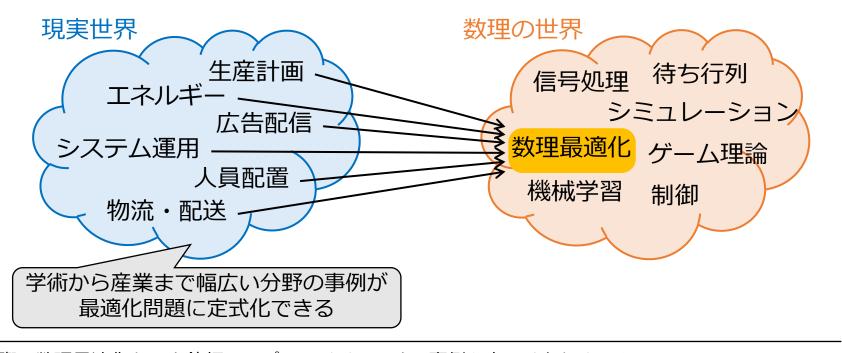
問題解決に役立つ 組合せ最適化とアルゴリズム

大阪大学 大学院情報科学研究科 梅谷 俊治

2021年6月24日

数理最適化による問題解決

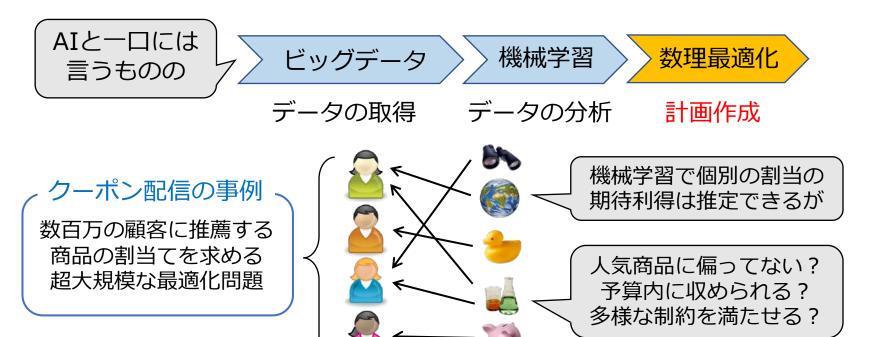
- AI(人工知能)で問題解決しましたと一口に言うもののその実態は?
- 数理科学(数理工学):現実問題を数理モデルに定式化し,数学的・科学的手法で解析することで問題解決を実現する.
- 問題解決ではデータの取得、データの分析、計画作成の手順を踏む.
- 最適化問題:制約条件を満たす解の中で,目的関数の値を最小(最大) にする解を求める問題.



^{*}実際に数理最適化をAIと銘打ってプレスリリースする事例も少なくありません.

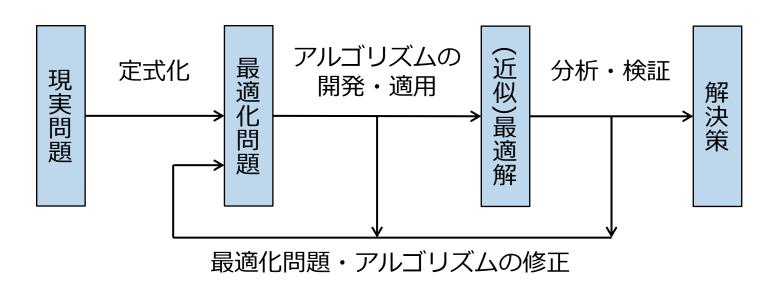
数理最適化による問題解決

- AI(人工知能)で問題解決しましたと一口に言うもののその実態は?
- 数理科学(数理工学):現実問題を数理モデルに定式化し,数学的・科学的手法で解析することで問題解決を実現する.
- 問題解決ではデータの取得、データの分析、計画作成の手順を踏む.
- 最適化問題:制約条件を満たす解の中で,目的関数の値を最小(最大) にする解を求める問題.



数理最適化による問題解決

- AI(人工知能)で問題解決しましたと一口に言うもののその実態は?
- 問題解決ではデータの取得,データの分析,計画作成の手順を踏む.
- 数理科学(数理工学): 現実問題を数理モデルに定式化し, 数学的・科学的手法で解析することで問題解決を実現する.
- 最適化問題:制約条件を満たす解の中で,目的関数の値を最小(最大) にする解を求める問題.
- 数理最適化による問題解決を実現するためには「最適化問題の定式 化」と「アルゴリズムの開発」が必要.



最適化問題の定式化

- ある飲料メーカーでは、トマト、にんじん、ほうれん草を原料とする野菜ジュースを製造している。
- 野菜ジュースに含まれる食物繊維,ビタミンC,鉄分,βカロチンの必要量を満たしつつ,製造に要する原料費を最小に抑えるための各野菜の購入量は?
- トマト、にんじん、ほうれん草の購入量(kg)をx1, x2, x3とする.

	食物繊維	ビタミンC	鉄分	βカロチン	価格(円/kg)
トイト	10	15	2	5	400
にんじん	25	5	2	80	250
ほうれん草	30	35	20	40	1000
必要量(単位/2L)	50	60	10	40	

minimize $400x_1 + 250x_2 + 1000x_3$ → 原料費を最小化 subject to $10x_1 + 25x_2 + 30x_3 \ge 50$, → 食物繊維は50単位以上 $15x_1 + 5x_2 + 35x_3 \ge 60$, → ビタミンCは60単位以上 $2x_1 + 2x_2 + 20x_3 \ge 10$, → 鉄分は10単位以上 $5x_1 + 80x_2 + 40x_3 \ge 40$, → βカロチンは40単位以上

 $x_1, x_2, x_3 > 0$.

→ 各野菜の購入量は非負

アルゴリズムの開発

- 最適化問題では解を直接求める一般的な式を導出するは困難.
- 数理最適化では、数値の計算を繰り返して問題の解を求める手順、 いわゆるアルゴリズムを開発することが主要な目的となる。
- アルゴリズムを改良すれば計算が数万倍速くなることも少なくない。

プログラム







コンピュータ

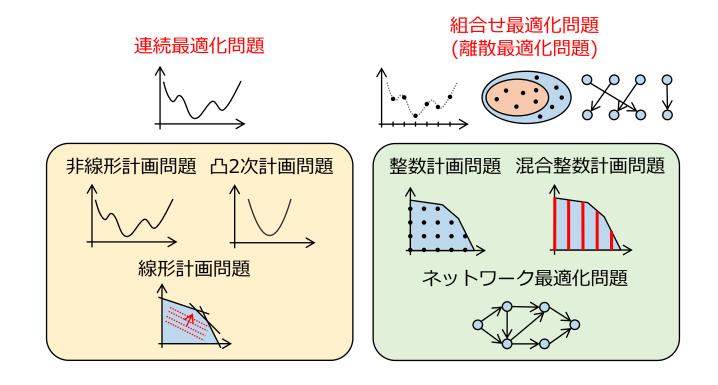
理化学研究所 スーパーコンピュータ京

例:線形計画法(1980年→2004年)

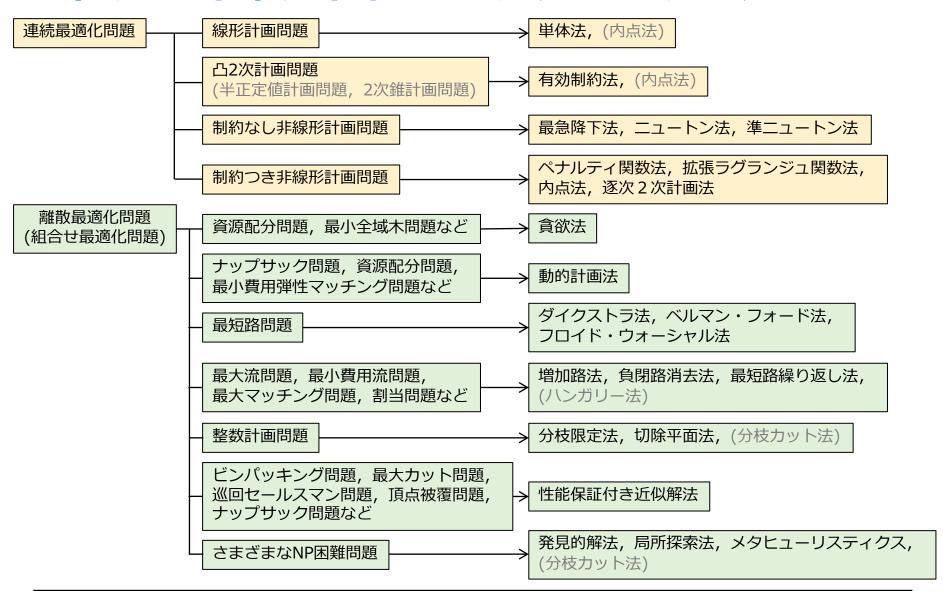
コンピュータ 1600倍 アルゴリズム 3300倍 (2ヶ月⇒約1秒)

代表的な最適化問題

- 連続最適化問題:変数が実数値のような連続的な値を取る最適化問題
- 組合せ最適化問題(離散最適化問題):変数が整数値のような離散的な値を取る最適化問題や、解が順列・組合せ・ネットワークなど組合せ数学で扱われる構造を持つ最適化問題.



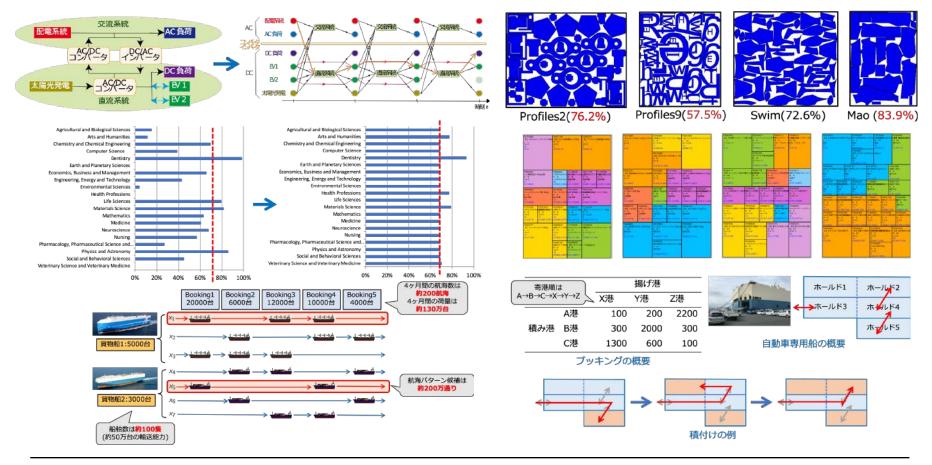
代表的な最適化問題とアルゴリズム*



^{*}梅谷俊治, しっかり学ぶ数理最適化, 講談社, 2020.

組合せ最適化問題の応用事例

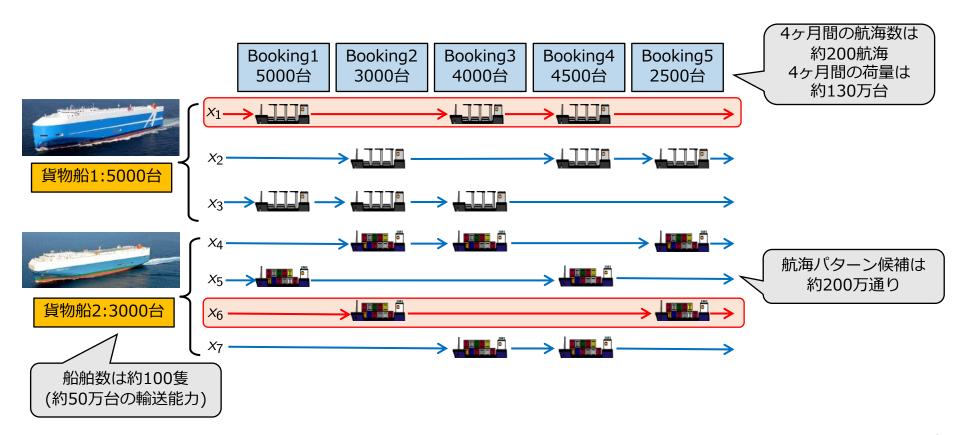
• 製造・物流・交通・通信・金融など,多様なシステムやサービスにおいて生じる計画作成の業務が組合せ最適化問題に定式化できる*.



^{*}最近は、物流・旅客における配車、広告における商品推薦、製造業における受発注など、多くの分野で利便性の高いオンラインサービスが現れて、計画作成の自動化・効率化の重要性が高まっています.

事例:自動車船の配船・運航計画

- 世界各地を航海する約100隻の自動車専用船を4ヶ月先までの約200 ブッキング(約130万台)に割り当てる。
- 各船の航海パターンの候補を列挙した後に、全てのブッキングを充足 する航海パターンの組み合わせを求める最適化問題に定式化する。



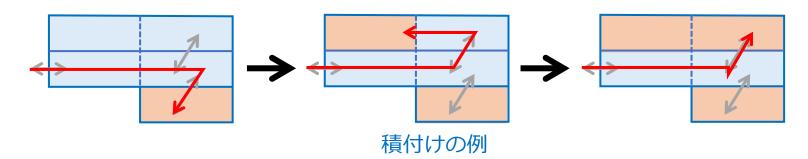
事例:自動車船の積付け計画

- 日本の2~3ヶ所の積み港から海外の2~3ヶ所の揚げ港に運行する自動車船について,複数の車種から構成される約20ブッキングを自動車船内の約40ホールドに割り当てる.
- 寄港時の車両の搬入・搬出経路の確保などいくつかの条件を考慮しつ つ,ブッキングを自動車船内のホールドに割り当てる問題を最適化問題に定式化する.

	寄港順は		揚げ港		
A-	→B→C→X-	→Y→Z	X港	Y港	Z港
		A港	100	200	2200
	積み港	B港	300	2000	300
		C港	1300	600	100



ブッキングの概要



組合せ最適化問題の難しさ

- NP困難問題:厳密な最適解を求めるのに必要な計算時間が最悪で入力サイズの指数関数になると多くの研究者が考えている問題.
- 都市をちょうど1回ずつ訪問する最短の巡回路を求める巡回セールスマン問題の解候補を列挙すると(n-1)!/2通り.



Newsweek, July 26, 1954*





都市数	巡回路の総数	計算時間(秒)	
6	60	4.32×10 ⁻¹⁰	
8	2520	3.23×10 ⁻⁸	
10	1.81×10^{5}	3.63×10 ⁻⁶	
15	4.36×10^{10}	1.96	
20	6.08×10^{16}	4.87×10^{6}	約56日
25	3.10×10^{23}	3.88×10^{13}	約122万年
30	4.42×10 ³⁰	7.96×10 ²⁰	約25233億年

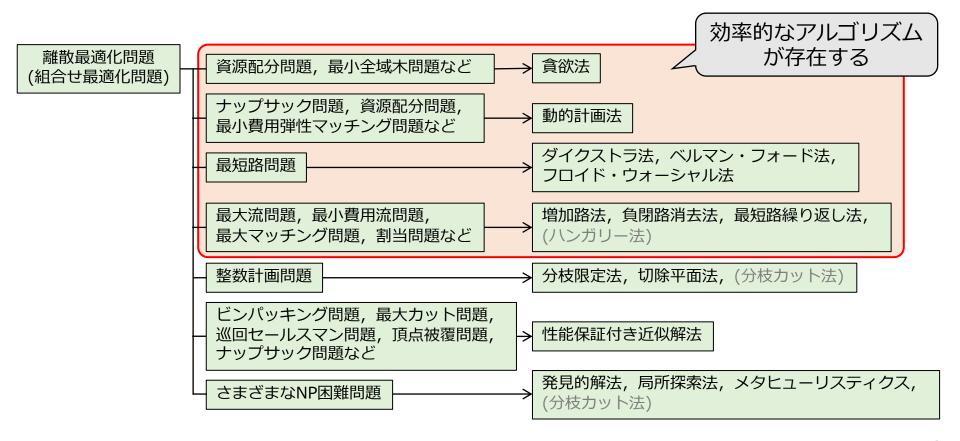
100TFlopsのコンピュータを用いて 巡回路を列挙したときの計算時間

PCB3038

全ての解候補を列挙することは現実的には不可能

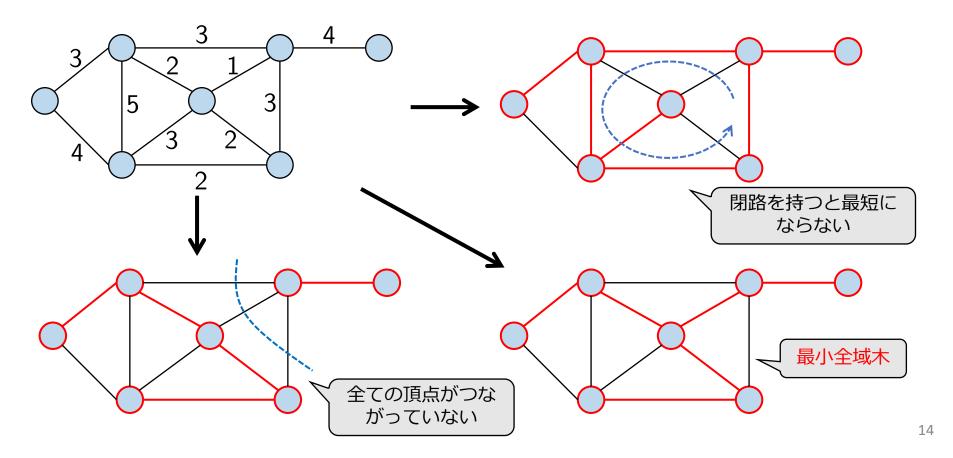
効率的に解ける組合せ最適化問題

- 巡回セールスマン問題など、多くの組合せ最適化問題はNP困難で効率的なアルゴリズムは期待できない。
- 特徴的な構造を持つ一部の組合せ最適化問題には効率的なアルゴリズムが存在する。



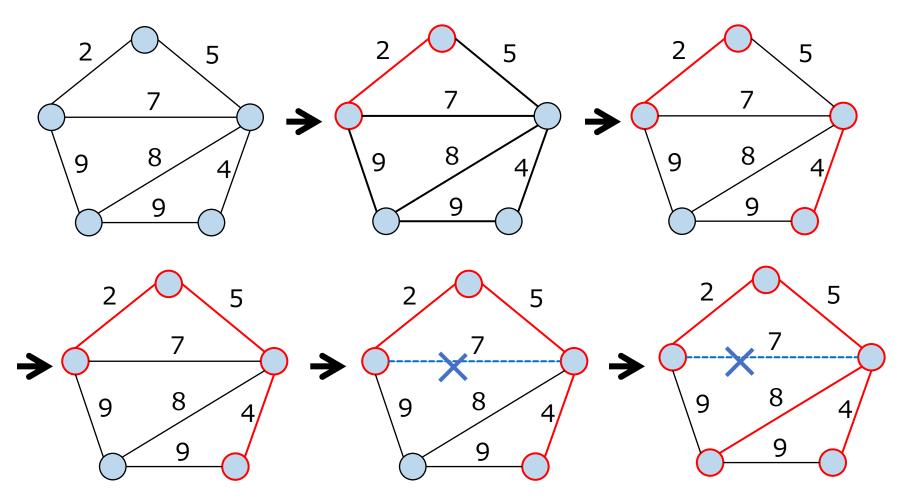
最小全域木問題

- ・ネットワーク:頂点とそれらをつなぐ辺から構成される組合せ的構造.
- 最小全域木問題:全ての頂点をつなぐ最短の辺の組合せを求める問題.
- ・水道・電気・ガスなどのライフライン,電話・インターネットなどの 通信網,石油・ガスパイプライン,道路の敷設など多くの応用を持つ.



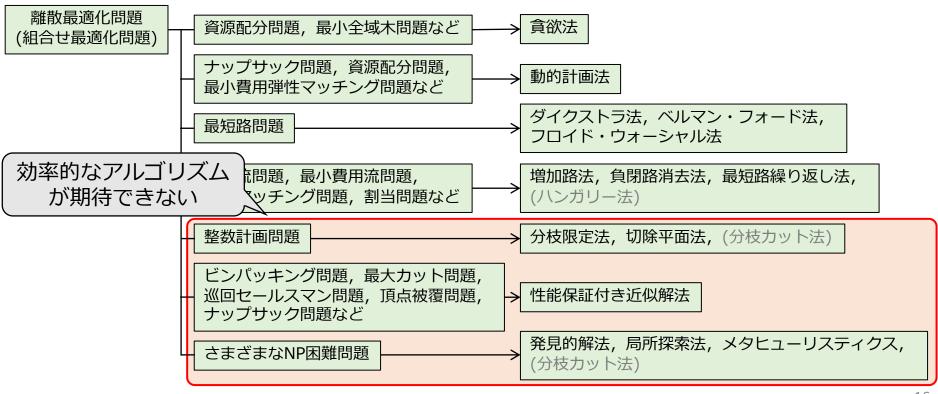
クラスカル法

- 長さの小さい順に辺を追加する.
- 各反復では閉路ができないように長さ最小の辺を追加する.



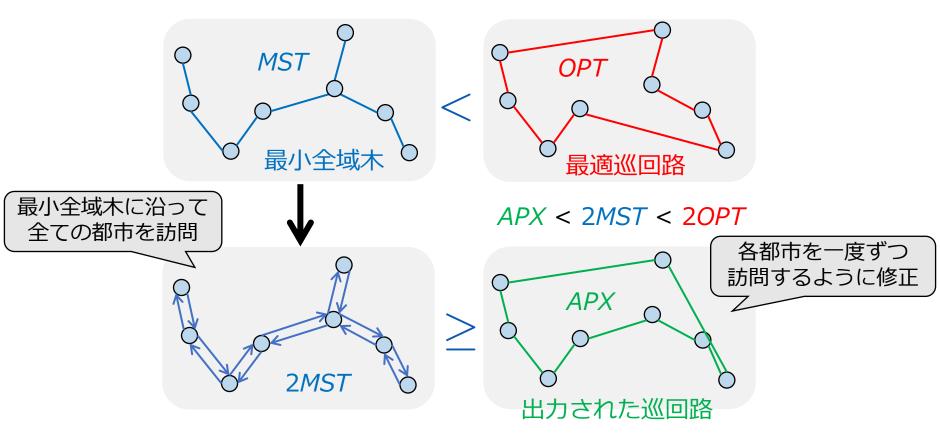
計算困難な組合せ最適化問題

- 厳密解法:任意の入力データに対して最適解を出力するアルゴリズム.
- 近似解法:任意の入力データに対して最適値に対する近似性能を保証する実行可能解を出力するアルゴリズム.
- 発見的解法:最適値に対する近似性能が保証されていない実行可能解 を出力するアルゴリズム.



巡回セールスマン問題に対する木二重化法

- クラスカル法を用いて最小全域木を求める.
- 最小全域木に沿って全ての都市を巡回し、一度訪れた都市は飛ばして 全ての都市を一度だけ訪問するように路をつなぎ替える。



巡回路の長さが最適値の2倍以内となる近似解を出力

おわりに

- 本講義では、組合せ最適化問題とそのアルゴリズムを紹介しました。
- 最近は、データサイエンスの普及とともに、数理最適化が活用される 事例も急速に増えています。
- ・現実問題を最適化問題に定式化すること,効率的なアルゴリズムを開発することは,複雑なパズルを解くような面白さがあります.
- 本講義を通じて,数理最適化やアルゴリズムに少しでも興味を持って もらえると嬉しいです。