

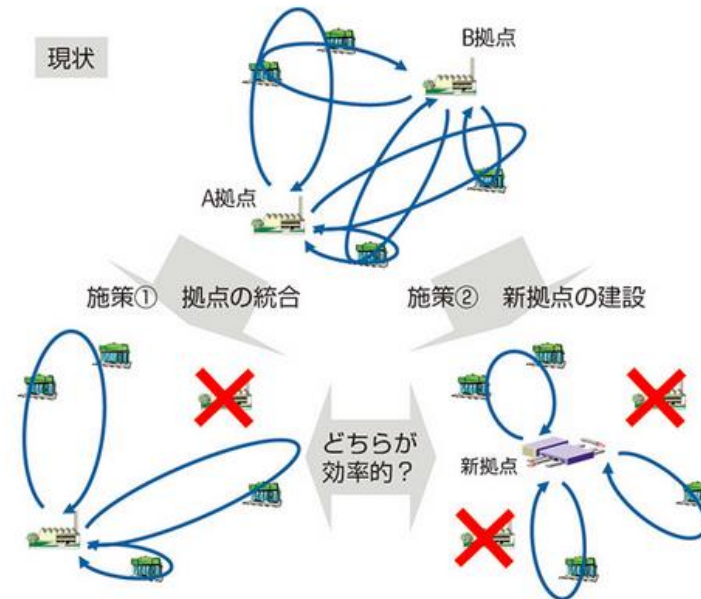
物流拠点を「組み合わせ最適化」で見直し、車両台数を11%削減

FUJITSU JOURNAL / 2018年1月30日

🔗 AI（人工知能）、ビッグデータ・アナリティクス



- ① 既存の拠点を統合するか？
- ② 新拠点を建設するか？



<https://blog.global.fujitsu.com/jp/2018-01-30/01/>

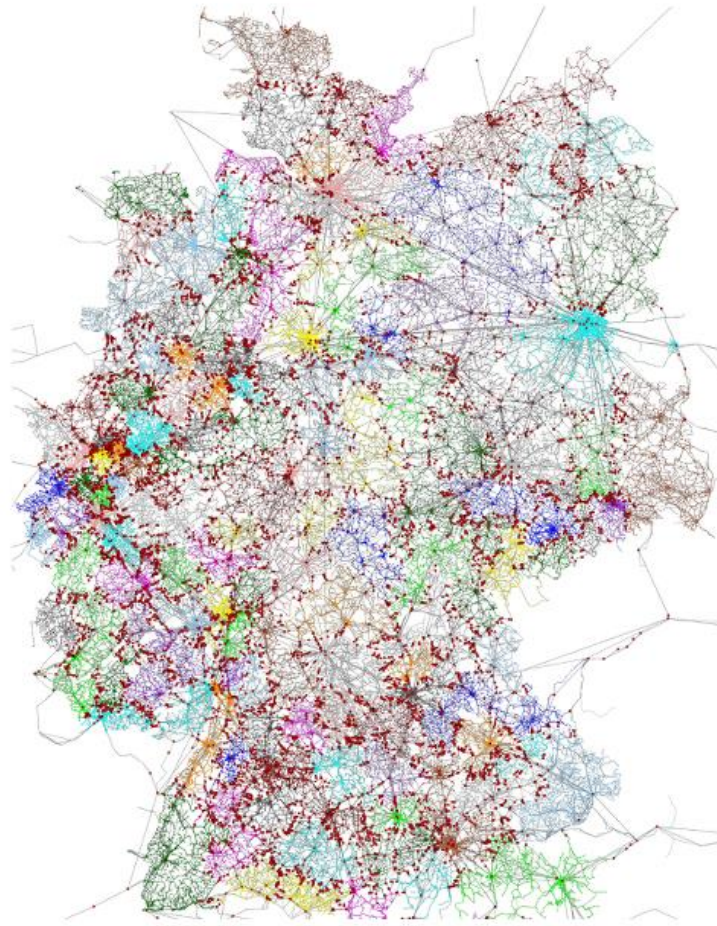
無断転載、配布を禁じます

お知らせ ミニゲームでTポイントを貯めよう

印刷 

1万の停留所には1億の移動パターン!Google、乗換案内の最適化方法を解説

◆ 阿久津良和



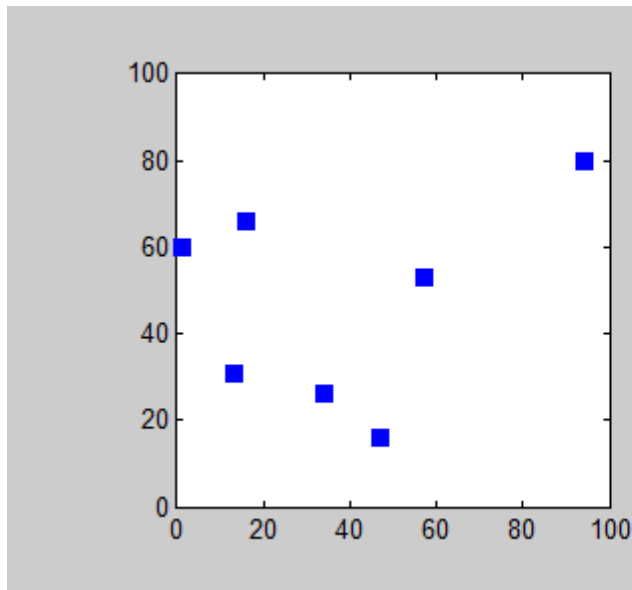
<https://news.mynavi.jp/article/20160303-a323/>

無断転載、配布を禁じます

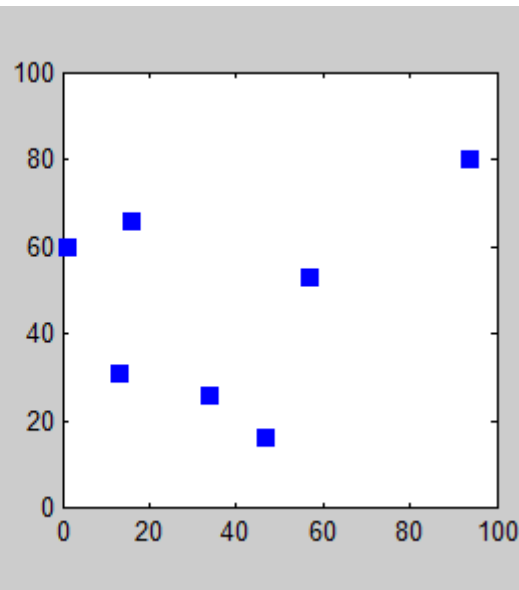
巡回セールスマン問題

全ての都市をちょうど一度ずつ巡り出発地に戻る巡回路のうち
総移動コストが最小のものを求める

解の探索



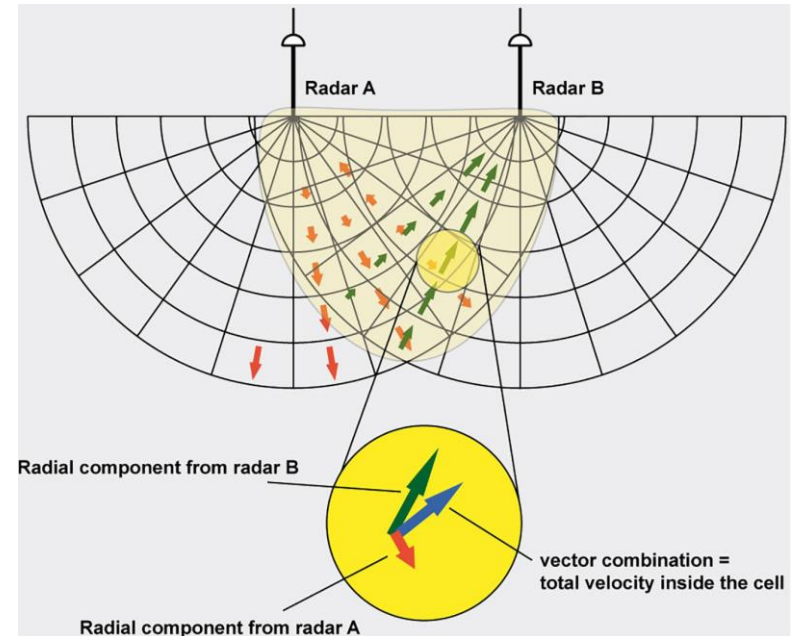
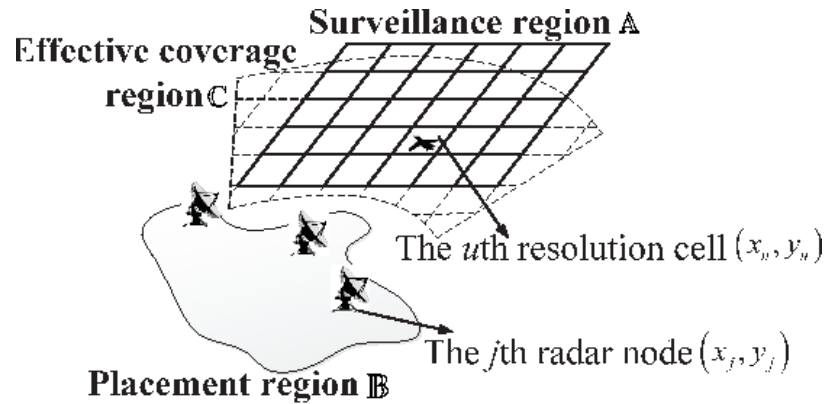
探索された中で最適なもの



NP困難（都市数が増えると計算量が爆発的に増える）

無断転載、配布を禁じます

レーダー配置の最適化



<https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fmars.2020.00210/full>

<https://www.semanticscholar.org/paper/Optimal-Deployment-of-Multistatic-Radar-System-Yang-Zhang/e0ab0c4fbc81b0423330f00df778aed9193755b9>

無断転載、配布を禁じます

最適化問題とは？

目的

例：売り上げを最大化したい
コストを最小化したい

$$f(x) \rightarrow \max \quad \text{または} \quad f(x) \rightarrow \min$$

制約

例：払える費用に限りがある
倉庫の場所と容量が限られている

$$c(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

制約なし最適化問題

$$f(x) = ax^2 + bx + c \rightarrow \min$$

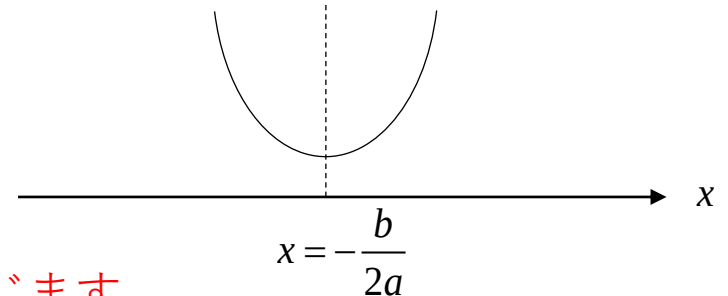
ただし $a > 0$

このように制約がなく、変数が一つだけなら簡単

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = 2ax + b = 0 \quad \text{を解くと、} \quad x = -\frac{b}{2a}$$

ここで、 $f''(x) = \frac{d^2f(x)}{dx^2} = 2a > 0$

従って、 $x = -\frac{b}{2a}$ は最小



無断転載、配布を禁じます

制約付き最適化問題

例：酒造会社の売り上げを最大化したい。

販売価格

ビールA： ¥200/L



ウイスキーB: ¥400/L



ウイスキーC: ¥550/L



発酵装置 1 と発酵装置 2 を経て蒸留装置を使わなければならない。
それぞれの酒が必要な時間は以下のとおり

	ビールA 1Lを製造する 所要時間 (時間/L) 	ウイスキーB 1Lを製造する 所要時間 (時間/L) 	ウイスキーC 1Lを製造する 所要時間 (時間/L) 	1週間の 最大稼働時間 (時間/週)
発酵装置 1	5	10	10	150
発酵装置 2	10	0	0	150
蒸留装置	0	10	20	150

決定変数と目的関数

決定変数 (Decision variable)



ビールAの製造量

x_A (L/週)



ウイスキーBの製造量

x_B (L/週)



ウイスキーCの製造量

x_C (L/週)

	価格	週当たり売上 (¥/週)
ビールA :	¥200/L	$200x_A$
ウイスキーB:	¥400/L	$400x_B$
ウイスキーC:	¥550/L	$550x_C$

目的関数 (Objective function) $200x_A + 400x_B + 550x_C \rightarrow \max$

無断転載、配布を禁じます

制約条件 (Constraints)

	ビールA 1Lを製造する 所要時間 (時間/L) 	ウイスキーB 1Lを製造する 所要時間 (時間/L) 	ウイスキーC 1Lを製造する 所要時間 (時間/L) 	1週間の 最大稼働時間 (時間/週)
発酵装置 1	5	10	10	150
発酵装置 2	10	0	0	150
蒸留装置	0	10	20	150

発酵装置1 $5 x_A + 10 x_B + 10 x_C \leq 150$

発酵装置 2 $10 x_A \leq 150$

蒸留装置 $10 x_B + 20 x_C \leq 150$

制約条件 (Constraints)

	ビールA 1Lを製造する 所要時間 (時間/L) 	ウイスキーB 1Lを製造する 所要時間 (時間/L) 	ウイスキーC 1Lを製造する 所要時間 (時間/L) 	1週間の 最大稼働時間 (時間/週)
発酵装置 1	5	10	10	150
発酵装置 2	10	0	0	150
蒸留装置	0	10	20	150

発酵装置1 $5 x_A + 10 x_B + 10 x_C \leq 150$

発酵装置 2 $10 x_A \leq 150$

蒸留装置 $10 x_A + 20 x_C \leq 150$

$$x_A \geq 0, x_B \geq 0, x_C \geq 0$$

定式化された最適化問題

目的関数： $200x_A + 400x_B + 550x_C \rightarrow \max$

制約条件（不等式）： $5x_A + 10x_B + 10x_C \leq 150$

$$10x_A \leq 150$$

$$10x_A + 20x_C \leq 150$$

$$x_A \geq 0, x_B \geq 0, x_C \geq 0$$

この形にするといろいろなソフトウェアで解ける

式のすべてが線形である問題は
線形計画問題（Linear programming problem）と呼ばれる

無断転載、配布を禁じます

Excelでの解き方

NUCT「リソース」「講義資料」のファイル



Excelを使用する場合は、最適化例題：酒造.xls



LibreOffice Calc（フリーウェア）を使用する場合は、最適化例題：酒造.ods

無断転載、配布を禁じます

最適化問題はどのように解かれているのか？

例題 5.2

目的関数 $3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$

制約条件

$$x_1 + x_2 \leq 8$$

$$2x_1 + x_2 \geq 6$$

$$x_1 + 2x_2 \geq 6$$

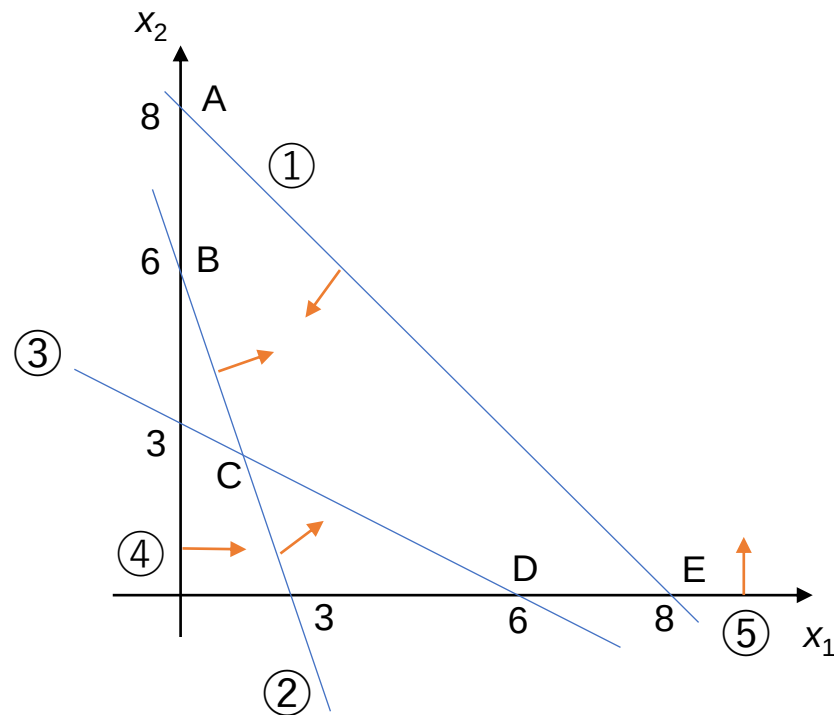
$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$

実行可能領域の図示

制約条件

$$\begin{array}{llllll} x_1 + x_2 & \leq 8 & \longrightarrow & x_2 & \leq -x_1 + 8 & \textcircled{1} \\ 2x_1 + x_2 & \geq 6 & \longrightarrow & x_2 & \geq -2x_1 + 6 & \textcircled{2} \\ x_1 + 2x_2 & \geq 6 & \longrightarrow & x_2 & \geq -1/2 x_1 + 3 & \textcircled{3} \\ x_1 & \geq 0 & & & & \textcircled{4} \\ x_2 & \geq 0 & & & & \textcircled{5} \end{array}$$



実行可能領域の図示

制約条件

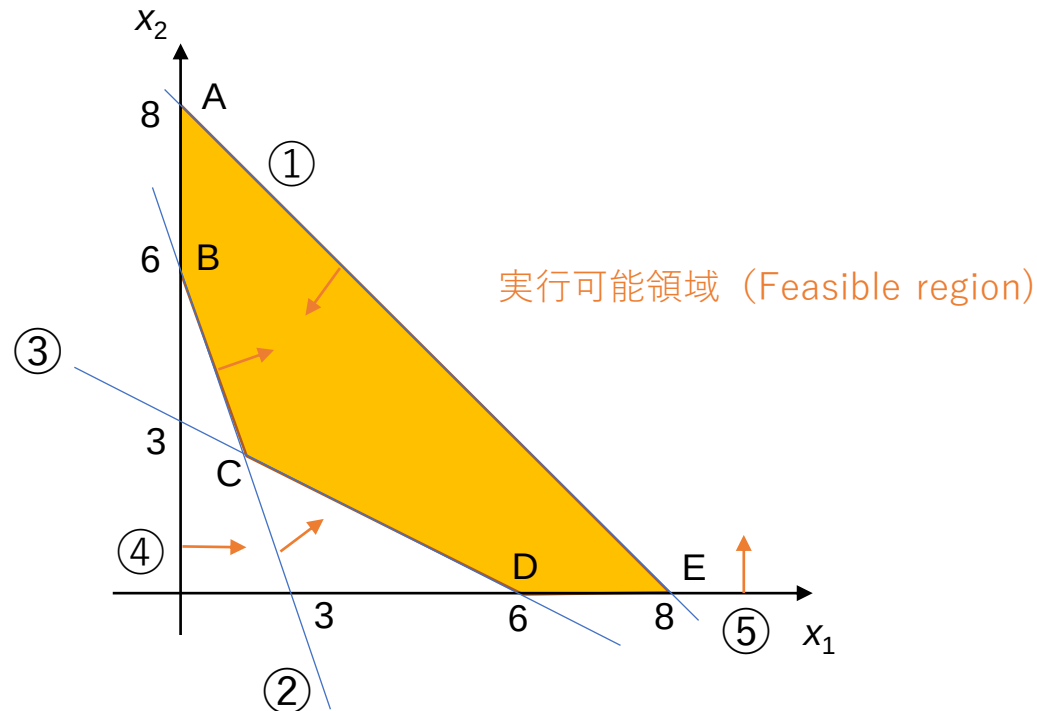
$$x_1 + x_2 \leq 8 \longrightarrow x_2 \leq -x_1 + 8 \quad \textcircled{1}$$

$$2x_1 + x_2 \geq 6 \longrightarrow x_2 \geq -2x_1 + 6 \quad \textcircled{2}$$

$$x_1 + 2x_2 \geq 6 \longrightarrow x_2 \geq -1/2 x_1 + 3 \quad \textcircled{3}$$

$$x_1 \geq 0 \quad \textcircled{4}$$

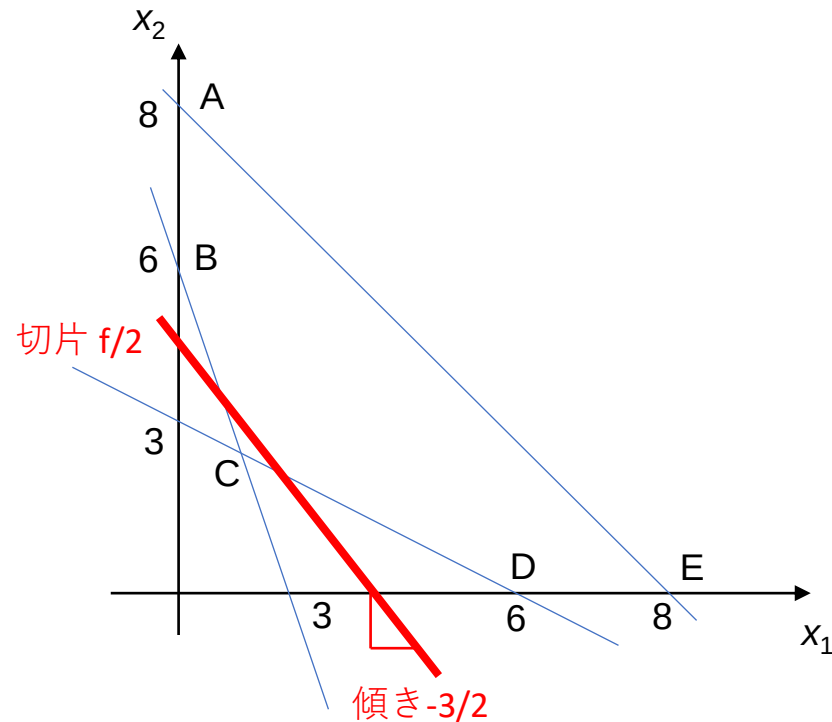
$$x_2 \geq 0 \quad \textcircled{5}$$



目的関数を図示する

目的関数 $3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$

$3x_1 + 2x_2 = f$ とおくと、 $x_2 = -\frac{2}{3}x_1 + \frac{f}{2}$
すなわち、傾き $-\frac{3}{2}$ 、切片 $\frac{f}{2}$ の直線

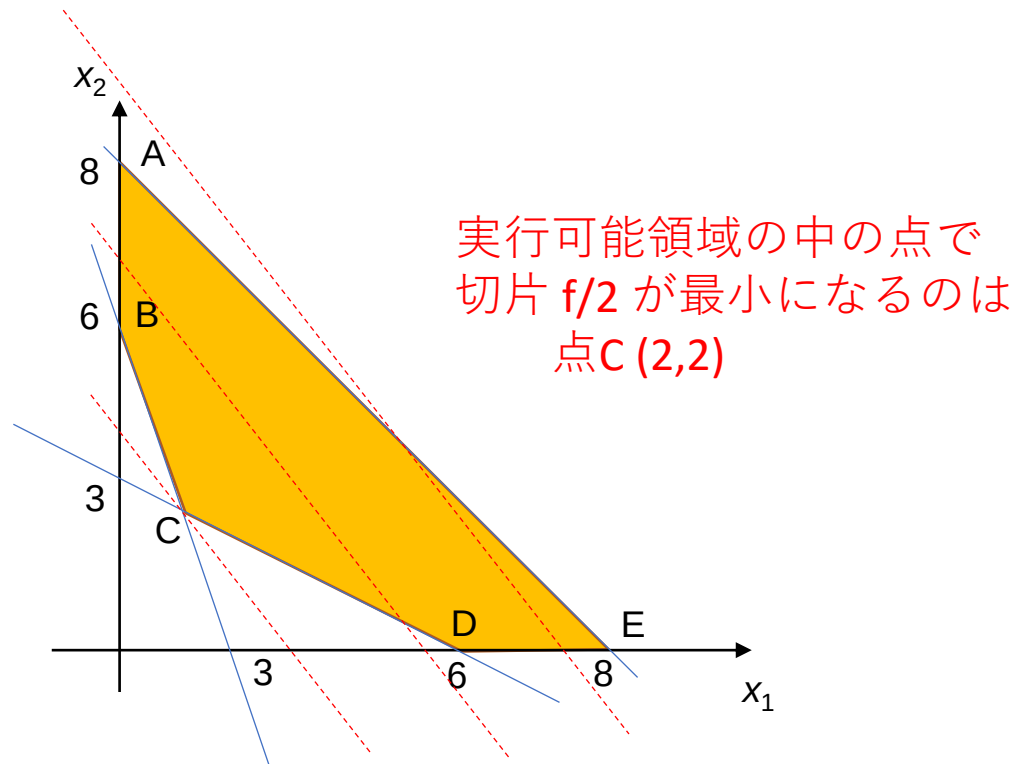


無断転載、配布を禁じます

目的関数を最小化したい

目的関数 $3x_1 + 2x_2 = f \rightarrow \min$

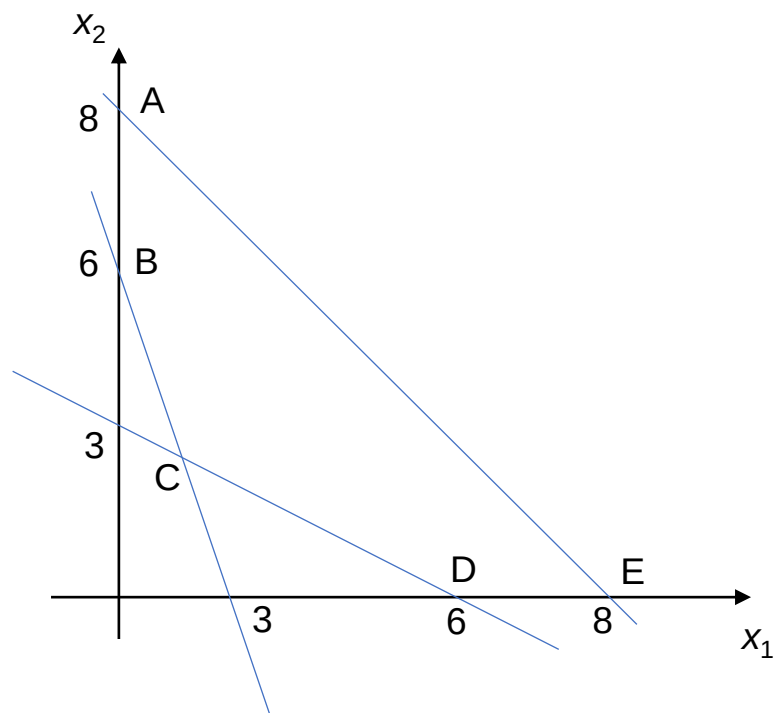
切片 $f/2$ が最小になればよい



無断転載、配布を禁じます

システムティックに解くには？

解は必ず頂点のどれかなので、頂点を全てチェックしていけばよい。



	頂点座標	$(3x_1 + 2x_2)$ 目的関数の値
A	(0,8)	16
B	(6,0)	18
C	(2,2)	10
D	(0,6)	18
E	(0,8)	24

図示をせずに解きたい

標準形 (Standard form)

目的関数 $3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$

制約条件

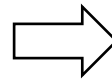
$$x_1 + x_2 \leq 8 \quad (1)$$

$$2x_1 + x_2 \geq 6 \quad (2)$$

$$x_1 + 2x_2 \geq 6 \quad (3)$$

$$x_1 \geq 0 \quad (4)$$

$$x_2 \geq 0 \quad (5)$$



目的関数 $3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$

制約条件

$$x_1 + x_2 + x_3 = 8 \quad (1')$$

$$2x_1 + x_2 - x_4 = 6 \quad (2')$$

$$x_1 + 2x_2 - x_5 = 6 \quad (3')$$

$$x_1 \geq 0 \quad (4)$$

$$x_2 \geq 0 \quad (5)$$

$$x_3 \geq 0 \quad (6)$$

$$x_4 \geq 0 \quad (7)$$

$$x_5 \geq 0 \quad (8)$$

x_3, x_4, x_5 はスラック変数と呼ぶ

連立方程式の解を求めてみる

目的関数 $3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$

制約条件

$$x_1 + x_2 + x_3 = 8 \quad (1)'$$

$$2x_1 + x_2 - x_4 = 6 \quad (2)'$$

$$x_1 + 2x_2 - x_5 = 6 \quad (3)'$$

$$x_1 \geq 0 \quad (4)$$

$$x_2 \geq 0 \quad (5)$$

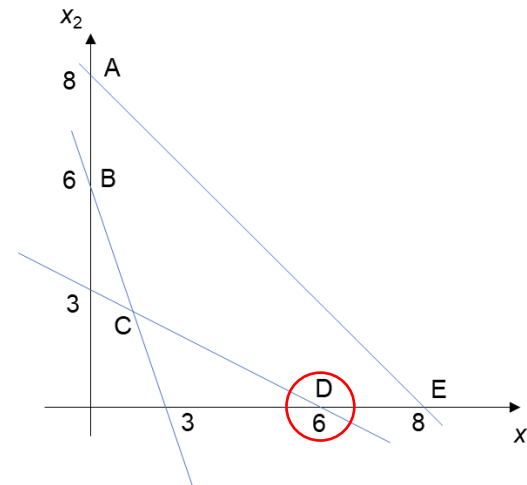
$$x_3 \geq 0 \quad (6)$$

$$x_4 \geq 0 \quad (7)$$

$$x_5 \geq 0 \quad (8)$$

} 変数5つに3つの連立方程式
変数を2つ固定すれば解ける

例えば $x_2 = 0$ 、 $x_5 = 0$ と固定すると
 $x_1 = 6$, $x_3 = 2$, $x_4 = 6$ と求められる (点Dに対応)



変数 2 つを 0 におきながら、連立方程式の解を次々に求めてみる

目的関数 $3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$

制約条件

$$x_1 + x_2 + x_3 = 8 \quad (1)'$$

$$2x_1 + x_2 - x_4 = 6 \quad (2)'$$

$$x_1 + 2x_2 - x_5 = 6 \quad (3)'$$

$$x_1 \geq 0 \quad (4)$$

$$x_2 \geq 0 \quad (5)$$

$$x_3 \geq 0 \quad (6)$$

$$x_4 \geq 0 \quad (7)$$

$$x_5 \geq 0 \quad (8)$$

2つの変数は 0 に固定する（非基底変数）

残りの変数は①'②'③'から求める（基底変数）

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
2	2	4	0	0
10	-2	0	12	0
-2	10	0	0	12
6	0	2	6	0
3	0	5	0	-3
8	0	0	10	2
0	3	5	-3	0
0	6	2	0	6
0	8	0	2	10
0	0	8	-6	-6

実行不能な解が見つかった

目的関数 $3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$

制約条件

$$x_1 + x_2 + x_3 = 8 \quad (1)'$$

$$2x_1 + x_2 - x_4 = 6 \quad (2)'$$

$$x_1 + 2x_2 - x_5 = 6 \quad (3)'$$

$$x_1 \geq 0 \quad (4)$$

$$x_2 \geq 0 \quad (5)$$

$$x_3 \geq 0 \quad (6)$$

$$x_4 \geq 0 \quad (7)$$

$$x_5 \geq 0 \quad (8)$$

全ての変数は負になってはいけない

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
2	2	4	0	0
10	-2	0	12	0
-2	10	0	0	12
6	0	2	6	0
3	0	5	0	-3
8	0	0	10	2
0	3	5	-3	0
0	6	2	0	6
0	8	0	2	10
0	0	8	-6	-6

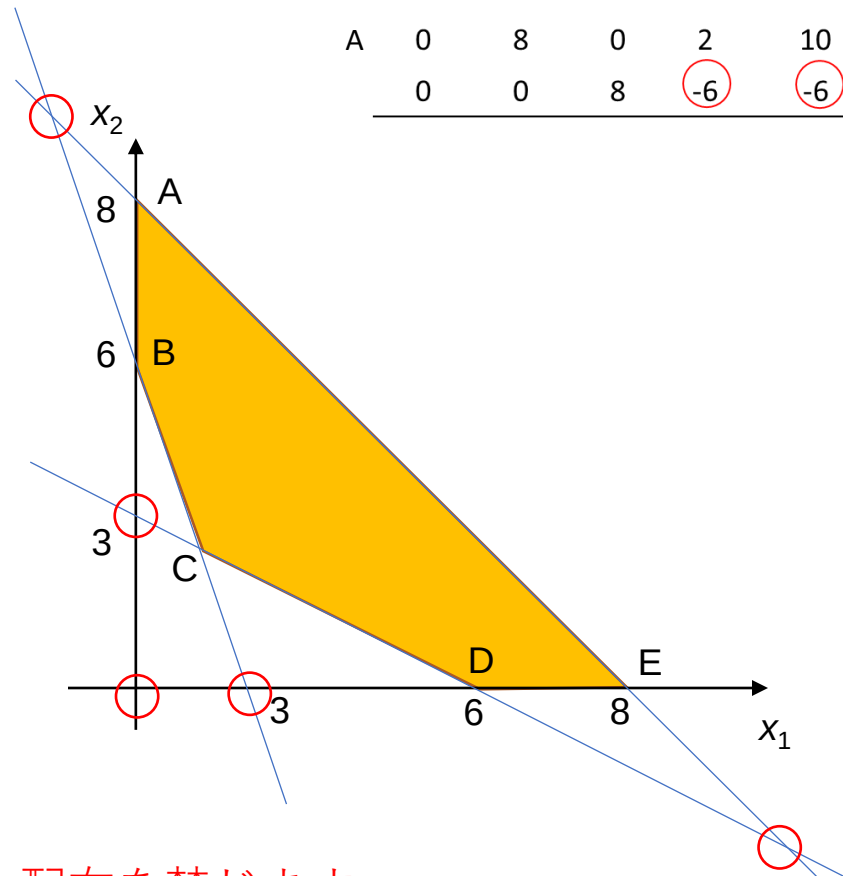
連立方式の解の解釈

目的関数 $3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$

制約条件

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + x_3 &= 8 & \textcircled{1}' \\ 2x_1 + x_2 - x_4 &= 6 & \textcircled{2}' \\ x_1 + 2x_2 - x_5 &= 6 & \textcircled{3}' \\ x_1 &\geq 0 & \textcircled{4} \\ x_2 &\geq 0 & \textcircled{5} \\ x_3 &\geq 0 & \textcircled{6} \\ x_4 &\geq 0 & \textcircled{7} \\ x_5 &\geq 0 & \textcircled{8} \end{aligned}$$

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
C	2	2	4	0	0
	10	-2	0	12	0
	-2	10	0	0	12
D	6	0	2	6	0
	3	0	5	0	-3
E	8	0	0	10	2
	0	3	5	-3	0
B	0	6	2	0	6
A	0	8	0	2	10
	0	0	8	-6	-6



無断転載、配布を禁じます

まとめ：コンピュータでの解法

1. 不等式にスラック変数を加えて標準形にする。
2. (変数の数) - (等式の数) だけ変数を0にして解く
3. 目的関数が最適になるものを見つける。

標準形

目的関数 $3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$

制約条件

$$x_1 + x_2 + x_3 = 8 \quad (1)'$$

$$2x_1 + x_2 - x_4 = 6 \quad (2)'$$

$$x_1 + 2x_2 - x_5 = 6 \quad (3)'$$

$$x_1 \geq 0 \quad (4)$$

$$x_2 \geq 0 \quad (5)$$

$$x_3 \geq 0 \quad (6)$$

$$x_4 \geq 0 \quad (7)$$

$$x_5 \geq 0 \quad (8)$$

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$3x_1 + 2x_2$	
2	2	4	0	0	10	最小解
10	-2	0	12	0	26	
-2	10	0	0	12	14	
6	0	2	6	0	18	
-3	0	5	0	-3	9	
8	0	0	10	2	24	
0	3	5	-3	0	6	
0	6	2	0	6	12	
0	8	0	2	10	16	
0	0	8	-6	-6	0	

コンピュータへの実装

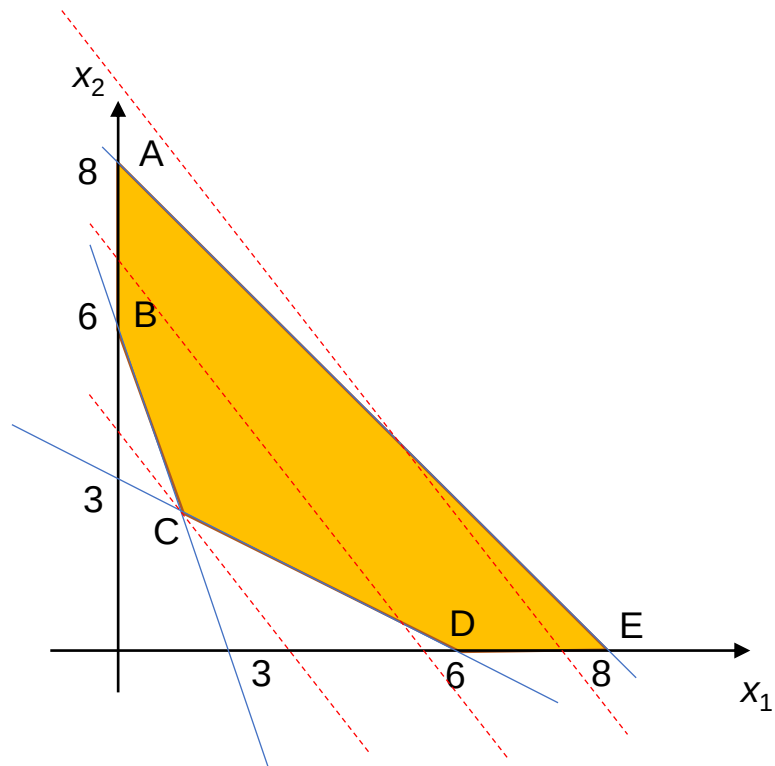
工学で解かれる問題は、変数が数百万個あることも珍しくない。

連立方程式を何度も解くだけでも時間がかかるので、効率の良い探索法（シンプレックス法）が開発されている（教科書5.2.2）

線形計画 vs. 非線形計画

線形計画問題：

目的関数も制約も全て線形
実行可能領域の頂点を調べればよい

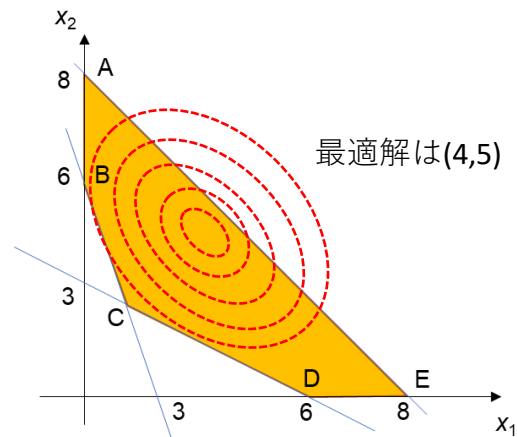


目的関数が非線形

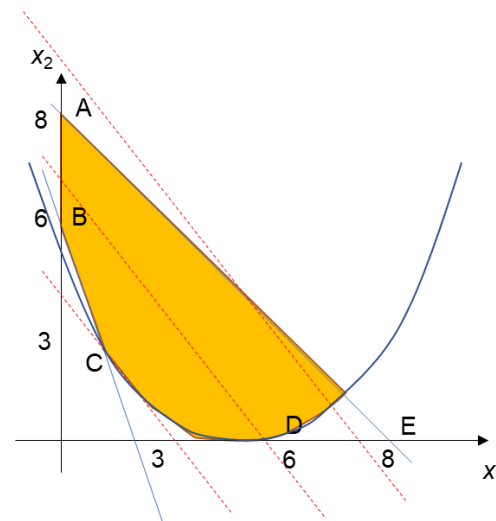
例： $(x_1 - 4)^2 + (x_2 - 5)^2$

非線形計画問題

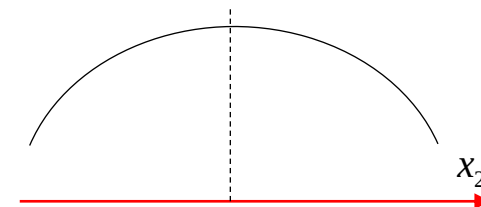
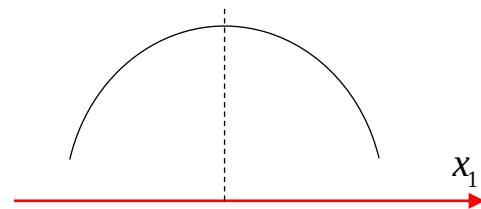
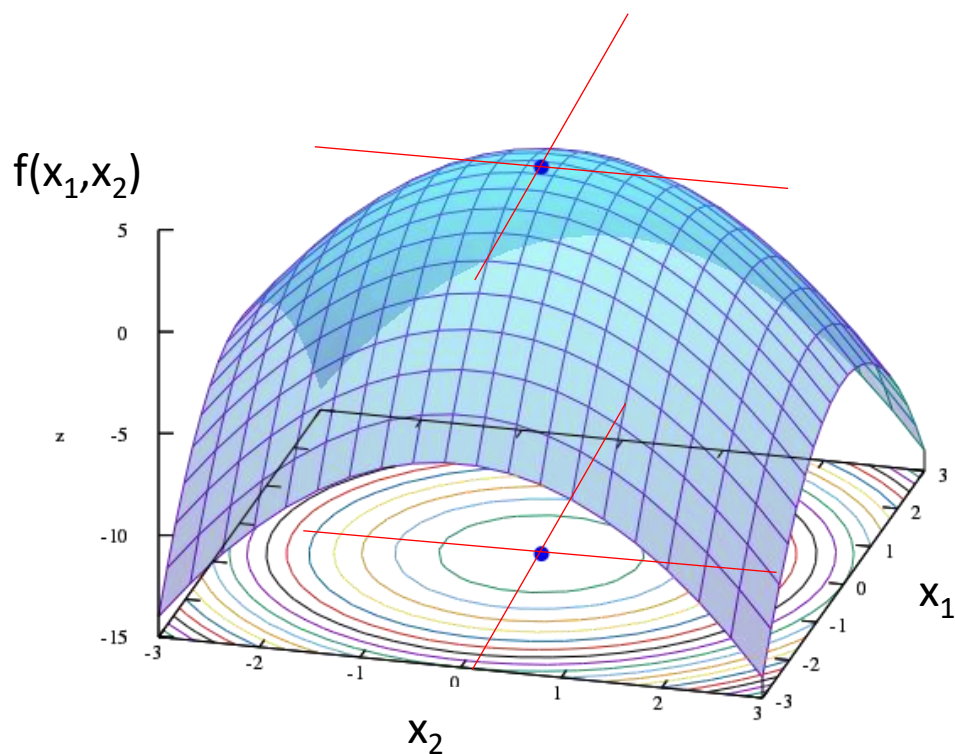
制約か目的関数どれか一つでも非線形



制約の一つが非線形



制約なし非線形計画問題（最大化）



極大（最大）においては

$$\frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} = 0$$

$$\frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} = 0$$

が成り立つ（停留点）

無断転載、配布を禁じます

停留点の計算例

$f(x_1, x_2) = x_1^2 x_2 - x_1^2 - 2x_2^2$ の停留点を求める

$$\begin{cases} \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} = 2x_1(x_2 - 1) = 0 & \rightarrow \text{場合分け} \\ \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} = x_1^2 - 4x_2 = 0 \end{cases}$$

この連立方程式を解くと、

$$x_1 = 0 \text{ のとき}$$

$$x_2 = 0$$

$$x_2 = 1 \text{ のとき}$$

$$x_1 = \begin{cases} 2 \\ -2 \end{cases}$$

従って停留点は3つ

$$(x_1, x_2) = (0, 0), (2, 1), (-2, 1)$$

最大？最小？鞍点？

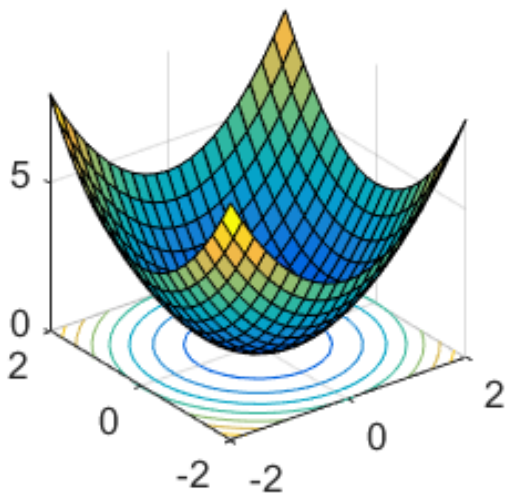
極大、極小、鞍点

停留点条件

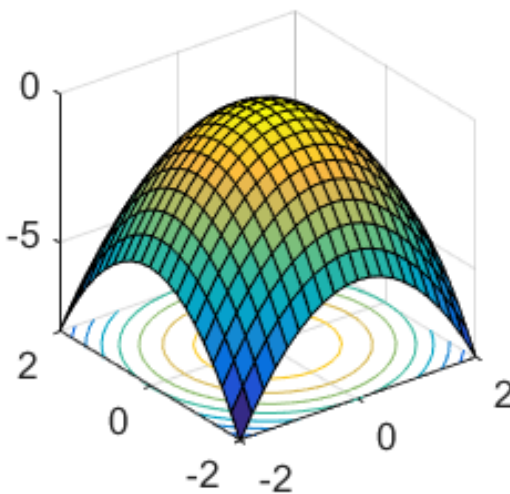
$$\begin{cases} \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} = 0 \\ \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} = 0 \end{cases}$$

を解いただけでは、極小、極大、鞍点かわからない

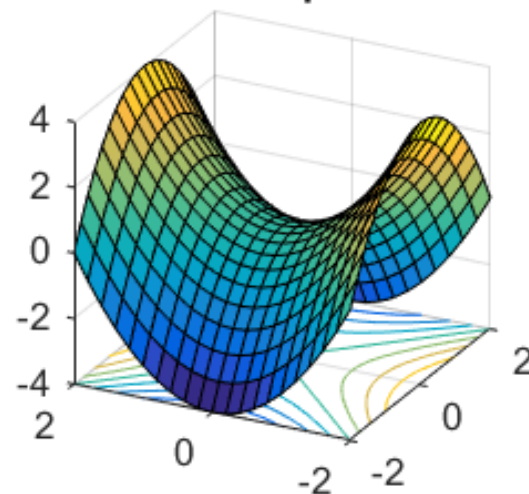
極小 local min



極大 local max



鞍点 saddle point

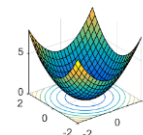


極致の判定は二階微分を使う

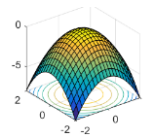
ヘッセ行列 $H = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} \end{pmatrix}$

行列式 $\det H = \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} - \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_1 \partial x_2} \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_2 \partial x_1}$

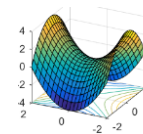
• $\det H > 0$ かつ $\frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} > 0$ 極小



• $\det H > 0$ かつ $\frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} < 0$ 極大



• $\det H < 0$ 鞍点



• $\det H = 0$ 判定不能

極致の判定：例題 $f(x_1, x_2) = x_1^2 x_2 - x_1^2 - 2x_2^2$

ヘッセ行列

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_2^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2(x_2 - 1) & 2x_1 \\ 2x_1 & -4 \end{pmatrix}$$

ヘッセ行列の行列式 $\det H = \begin{vmatrix} 2(x_2 - 1) & 2x_1 \\ 2x_1 & -4 \end{vmatrix} = -8(x_2 - 1) - 4x_1^2$

先ほど求めた3つの停留点 $(x_1, x_2) = (0, 0), (2, 1), (-2, 1)$ それぞれを判定する

$(x_1, x_2) = (0, 0)$	$(x_1, x_2) = (2, 1)$	$(x_1, x_2) = (-2, 1)$
$\det H = 8 > 0$	$\det H = -16 < 0$	$\det H = -16 < 0$
$\frac{\partial^2 f(x_1, x_2)}{\partial x_1^2} = -2 < 0$	従って鞍点	従って鞍点
従って極大		

例題の図示 $f(x_1, x_2) = x_1^2 x_2 - x^2 - 2y^2$

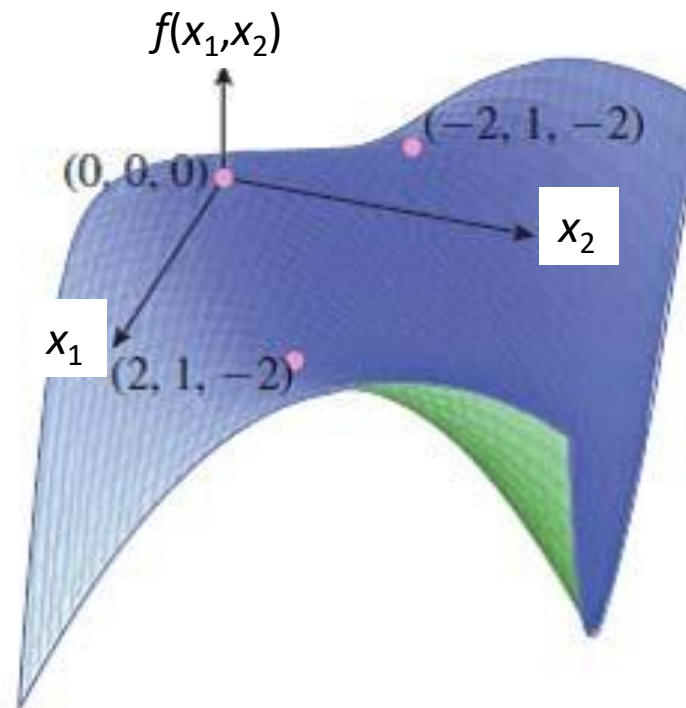


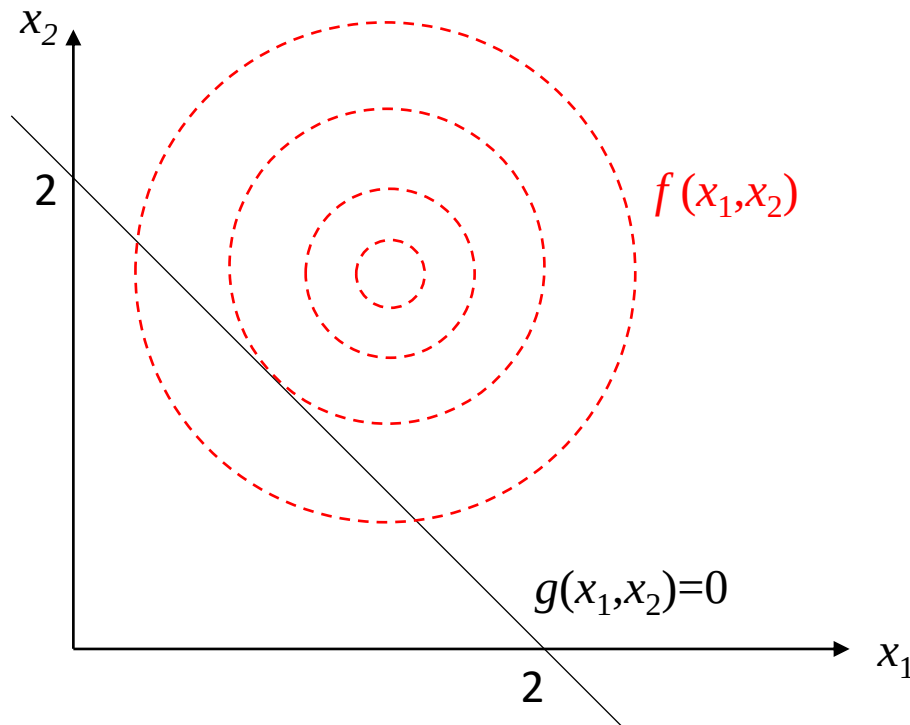
Figure 20

制約付き非線形計画問題

教科書例題 5. 4

目的関数 $f(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min$

制約条件 $g(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 2 = 0$

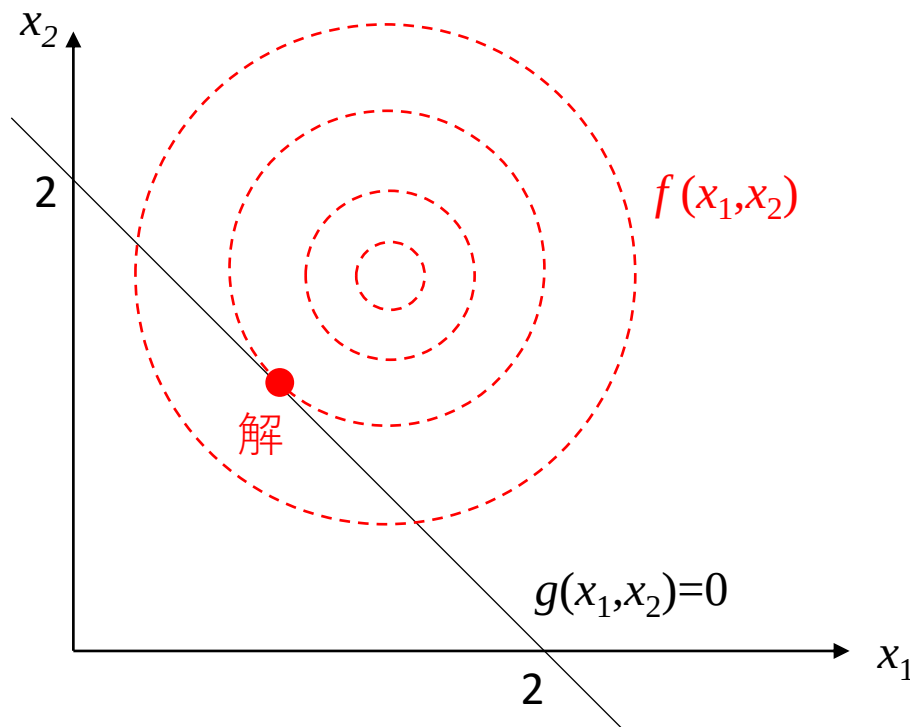


制約付き非線形計画問題

教科書例題 5. 4

目的関数 $f(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min$

制約条件 $g(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 2 = 0$



ラグランジュ関数の定義

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min \\ g(x_1, x_2) &= x_1 + x_2 - 2 = 0 \end{aligned}$$

ラグランジュ関数：目的関数と制約条件を、未定乗数を使って線形結合したもの

$$\begin{aligned} L(x_1, x_2, u_1) &= f(x_1, x_2) + u_1 g(x_1, x_2) \\ &= (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 + u_1 (x_1 + x_2 - 2) \end{aligned}$$

u_1 ：未定乗数

ラグランジュ関数の偏微分も計算しておく。

$$\frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_1} = 2x_1 - 2 + u_1$$

$$\frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_2} = 2x_2 - 4 + u_1$$

カルーシュ・クーン・タッカー条件
(Karush-Kuhn-Tucker) 条件
またはKKT条件

$$f(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min$$
$$g(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 2 = 0$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_1} = 2x_1 - 2 + u_1 = 0 & \text{ラグランジュ関数の偏微分がゼロ} \\ \frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_2} = 2x_2 - 4 + u_1 = 0 & \text{ラグランジュ関数の偏微分がゼロ} \\ g(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 2 = 0 & \text{元の問題の制約条件} \end{array} \right.$$

最適解は、このKKT条件の解を満たすことが知られている（必要条件）
逆は必ずしも成り立たない。最大か最小かもこれだけではわからない。

カルーシュ・クーン・タッカー条件
(Karush-Kuhn-Tucker) 条件
またはKKT条件

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min \\ g_1(x_1, x_2) &= x_1 + x_2 - 2 \leq 0 \\ g_2(x_1, x_2) &= x_1 - 1 \leq 0 \end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_1} = 2x_1 - 2 + u_1 = 0 & \xrightarrow{\textcircled{1}} x_1 = \frac{2 - u_1}{2} \\ \frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_2} = 2x_2 - 4 + u_1 = 0 & \xrightarrow{\textcircled{2}} x_2 = \frac{4 - u_1}{2} \\ g(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 2 = 0 & \xrightarrow{\textcircled{3}} \frac{2 - u_1}{2} + \frac{4 - u_1}{2} - 2 = 0 \end{array} \right.$$

$$\textcircled{3} \text{より } u_1 = 1$$

$$\textcircled{1}、\textcircled{2} \text{より } x_1 = \frac{1}{2}, x_2 = \frac{3}{2}$$

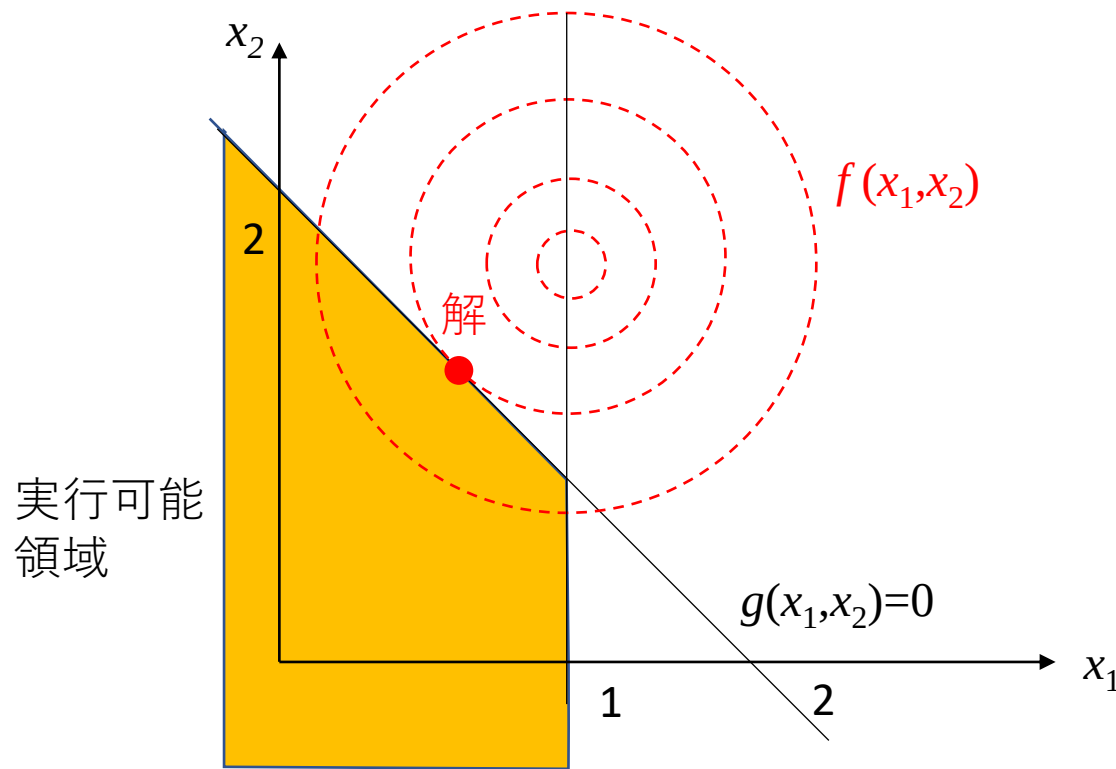
複数の不等式制約付き非線形計画

教科書例題 5. 5

目的関数 $f(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min$

制約条件 $g_1(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 2 \leq 0$

$g_2(x_1, x_2) = x_1 - 1 \leq 0$



無断転載、配布を禁じます

複数の不等式があるラグランジュ関数

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min \\ g_1(x_1, x_2) &= x_1 + x_2 - 2 \leq 0 \\ g_2(x_1, x_2) &= x_1 - 1 \leq 0 \end{aligned}$$

制約条件は2つの未定乗数を使って2つとも線形結合する

$$\begin{aligned} L(x_1, x_2, u_1, u_2) &= f(x_1, x_2) + u_1 g_1(x_1, x_2) + u_2 g_2(x_1, x_2) \\ &= (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 + u_1 (x_1 + x_2 - 2) + u_2 (x_1 - 1) \end{aligned}$$

u_1, u_2 : 未定乗数

ラグランジュ関数の偏微分も計算しておく。

$$\frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_1} = 2x_1 - 2 + u_1 + u_2$$

$$\frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_2} = 2x_2 - 4 + u_1$$

不等式制約があるときのKKT条件

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min \\ g_1(x_1, x_2) &= x_1 + x_2 - 2 \leq 0 \\ g_2(x_1, x_2) &= x_1 - 1 \leq 0 \end{aligned}$$

未定乗数 u_1, u_2 を導入する

$$\frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_1} = 2x_1 - 2 + u_1 + u_2 = 0 \quad \text{ラグランジュ関数の偏微分がゼロ}$$

$$\frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_2} = 2x_2 - 4 + u_1 = 0 \quad \text{ラグランジュ関数の偏微分がゼロ}$$

$$u_1 g_1(x_1, x_2) = u_1 (x_1 + x_2 - 2) = 0 \quad \text{相補性条件}$$

$$u_2 g_2(x_1, x_2) = u_2 (x_1 - 1) = 0 \quad \text{相補性条件}$$

$$g_1(x_1, x_2) = x_1 + x_2 - 2 \leq 0 \quad \text{元の問題の制約条件}$$

$$g_2(x_1, x_2) = x_1 - 1 \leq 0 \quad \text{元の問題の制約条件}$$

$$u_1 \geq 0 \quad \text{未定乗数は負でない}$$

$$u_2 \geq 0 \quad \text{未定乗数は負でない}$$

等式

$$\begin{cases} 2x_1 - 2 + u_1 + u_2 = 0 & \rightarrow x_1 = \frac{2 - u_1 - u_2}{2} \quad ① \\ 2x_2 - 4 + u_1 = 0 & \rightarrow x_2 = \frac{4 - u_1}{2} \quad ② \\ u_1(x_1 + x_2 - 2) = 0 & ③ \\ u_2(x_1 - 1) = 0 & ④ \end{cases}$$

不等式

$$\begin{cases} x_1 + x_2 - 2 \leq 0 & ⑤ \\ x_1 - 1 \leq 0 & ⑥ \\ u_1 \geq 0 & ⑦ \\ u_2 \geq 0 & ⑧ \end{cases}$$

解がこれら不等式を満たすか確認

④を使って場合分け



$u_2 = 0$ のとき

①と②を③に代入

$$u_1 \left(\frac{2 - u_1}{2} + \frac{4 - u_1}{2} - 2 \right) = 0$$

変形すると

$$u_1(1 - u_1) = 0$$

この式を使って更に場合分け

$x_1 = 1$ のとき

①より

$$1 = \frac{2 - u_1 - u_2}{2}$$

変形すると

$$u_2 = -u_1$$

これが⑦と⑧を満たすのは、 $u_1 = u_2 = 0$ だけ
すなわち、(*)と同じ

$u_1 = 0$ のとき (*)

①より $x_1 = 1$

②より $x_2 = 2$

これは⑤を満たさない

$u_1 = 1$ のとき

①より $x_1 = \frac{1}{2}$

②より $x_2 = \frac{3}{2}$

これは⑤-⑧を全て満たす！

まとめ：不等式制約があるときのKKT条件

最適化問題 $f(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \rightarrow \min$

$$\begin{aligned} g_1(x_1, x_2) &\leq 0 \\ g_2(x_1, x_2) &\leq 0 \\ &\vdots \\ g_m(x_1, x_2) &\leq 0 \end{aligned}$$

この問題に対し、ラグランジュ関数を定義

$$\begin{aligned} L(x_1, x_2, \dots, u_1, u_2, \dots, u_m) \\ &= f(x_1, x_2) + u_1 g_1(x_1, x_2) + u_2 g_2(x_1, x_2) + \dots + u_m g_m(x_1, x_2) \\ &= f(x_1, x_2) + \sum_{i=1}^m u_i g_i(x_1, x_2) \end{aligned}$$

最適解はKKT条件を満たす

しかし必要条件であり、十分条件ではない（満たしても最適解とは限らない）

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_1} = 0 & g_1(x_1, x_2) \leq 0 \\ & g_2(x_1, x_2) \leq 0 \\ & \vdots \\ \frac{\partial L(x_1, x_2, u_1)}{\partial x_2} = 0 & g_m(x_1, x_2) \leq 0 \\ \\ u_i g_i(x_1, x_2) = 0, \ i = 1, 2, \dots, m \\ \\ u_i \geq 0, \ i = 1, 2, \dots, m \end{array} \right.$$

無断転載、配布を禁じます

決定変数の次元について

- 本講義では、 x_1 と x_2 の2つの決定変数だけが現れる2次元の問題だけ扱った。教科書は $x_1, x_2, \dots, x_n$ の n 次元の表記をしている。
- 本講義では、2次元の問題だけ扱ったため、等式の制約が1つだけ現れる例題のみ扱った。

KKT条件の呼称について

- 教科書では、カルーシュ・クーン・タッカー（KKT）条件をクーン・タッカー条件と呼んでいる。前者の表記（KKT条件）のほうが今日では一般的である。
- 本講義では、等式と不等式制約付き最適化問題の解が満たす条件を全てKKT条件と呼んだ。教科書は等式制約最適化（例題5.4）のもの条件をラグランジュの未定乗数法、不等式制約最適化（例題5.5）の条件をクーン・タッカー（KKT）条件と区別している。

偏微分について

- 偏微分は一般にグラジエントとして表すことがある。

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} \end{pmatrix}$$

整数計画問題 (Integer programming problems)

最適化問題の中には、決定変数が連続値ではなく、離散値（整数）の値しか取らないことがある。

- 利益を最大にする投資案件の組み合わせは何か？
- 必要なトラックの台数は何台か？
- 室温を一定温度以下にしながらエネルギー消費を最小にするエアコンの台数は？

整数計画問題の例

例題5.12

$$f(x_1, x_2) = 3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$$

$$x_1 + x_2 \leq 8$$

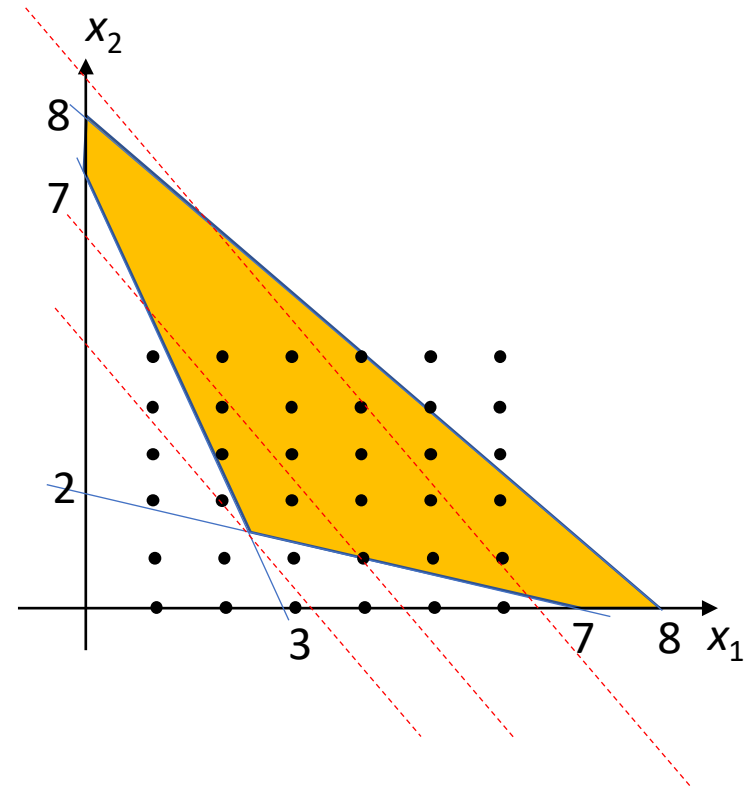
$$7x_1 + 3x_2 \geq 21$$

$$2x_1 + 7x_2 \geq 14$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$

x_1 と x_2 は整数



「整数」という制約を緩和してみる

$$f(x_1, x_2) = 3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$$

$$x_1 + x_2 \leq 8$$

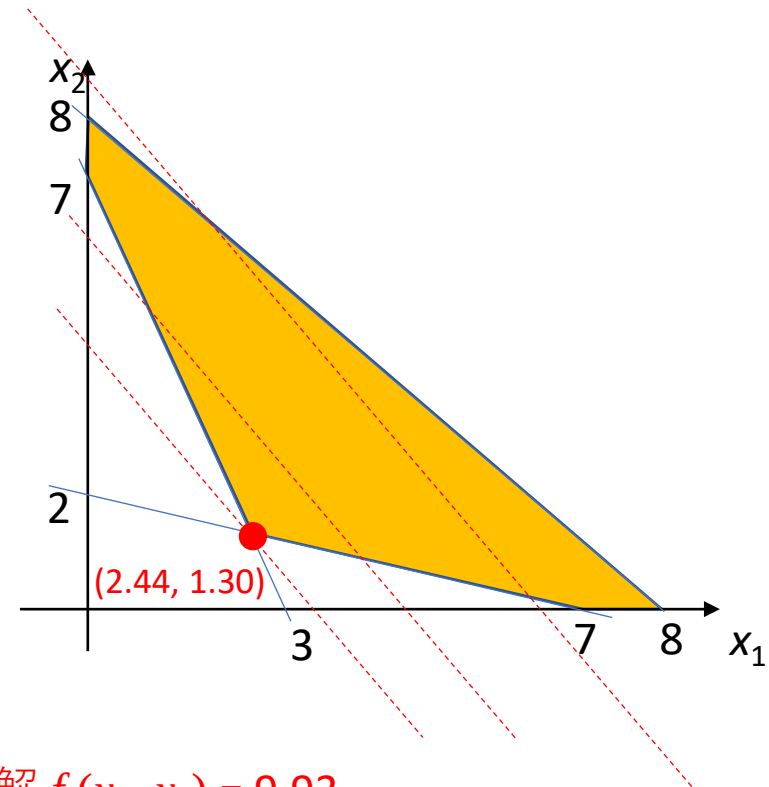
$$7x_1 + 3x_2 \geq 21 \quad (\text{A})$$

$$2x_1 + 7x_2 \geq 14$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$

~~x_1 と x_2 は整数~~



$x_1 = 2.44, x_2 = 1.30$ のとき、最適解 $f(x_1, x_2) = 9.93$

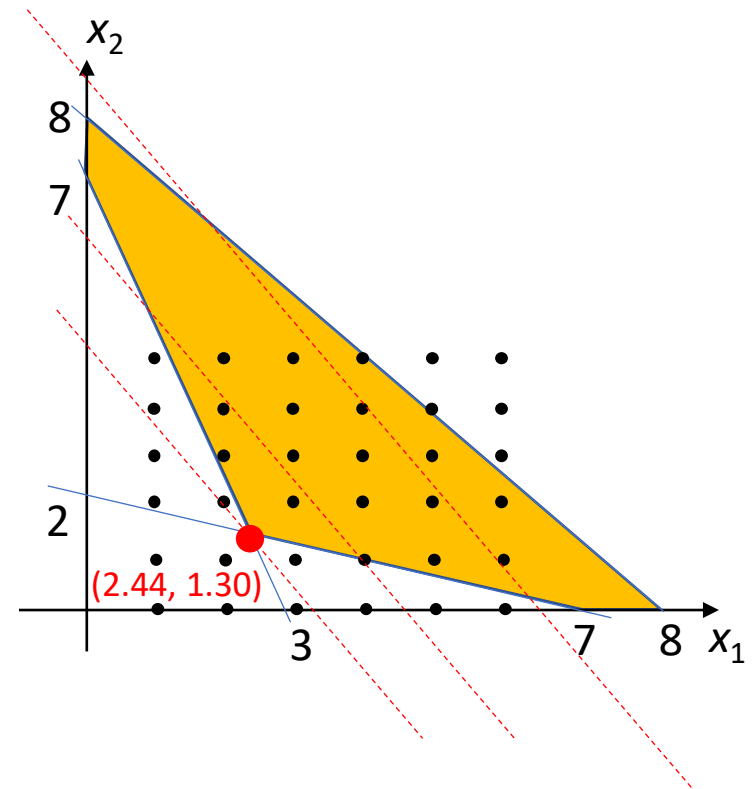
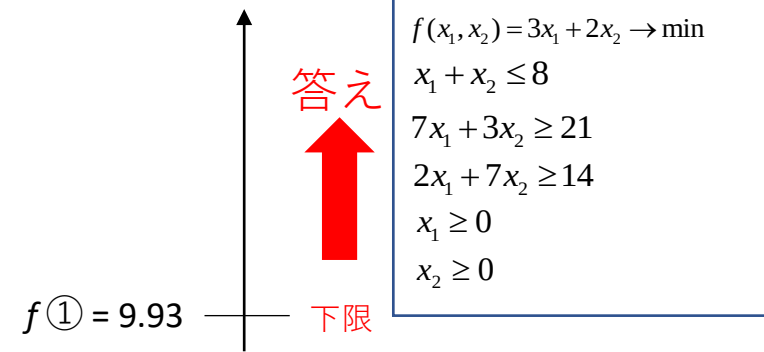
四捨五入して、 $x_1 = 2, x_2 = 1$ が整数の解？ これは (A) を満たさない

緩和した解は貴重な情報

$$\textcircled{1} \quad (x_1, x_2) = (2.44, 1.30)$$

$$f\textcircled{1} = 9.93 \quad (\text{旧下限})$$

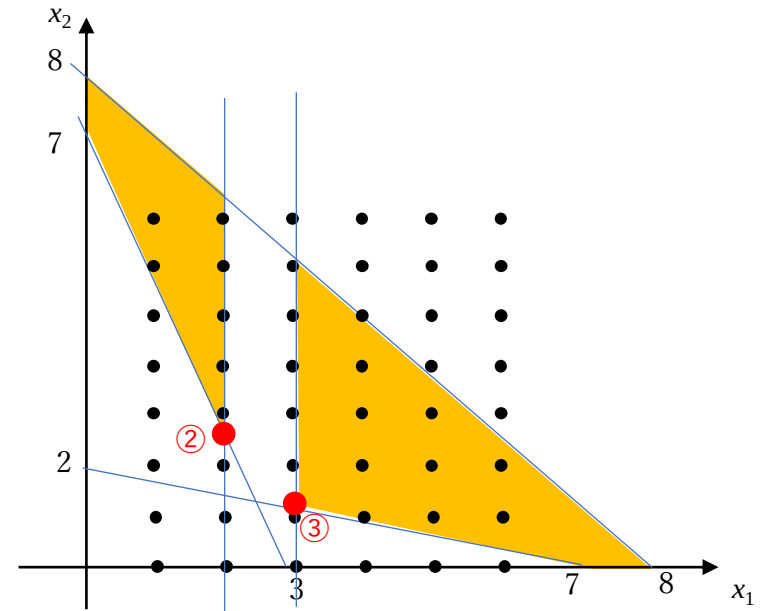
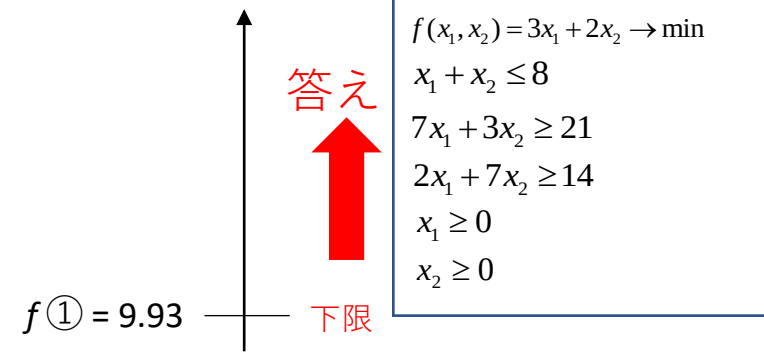
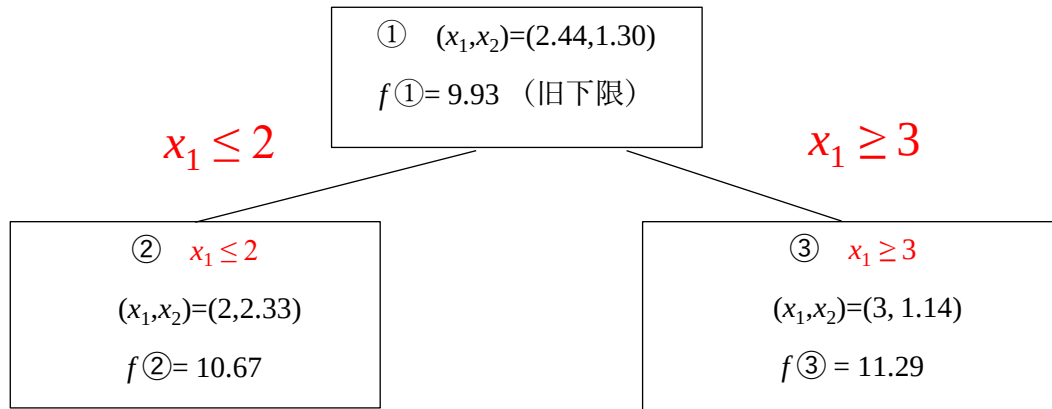
答えはこれより絶対悪くならないはず (下限)



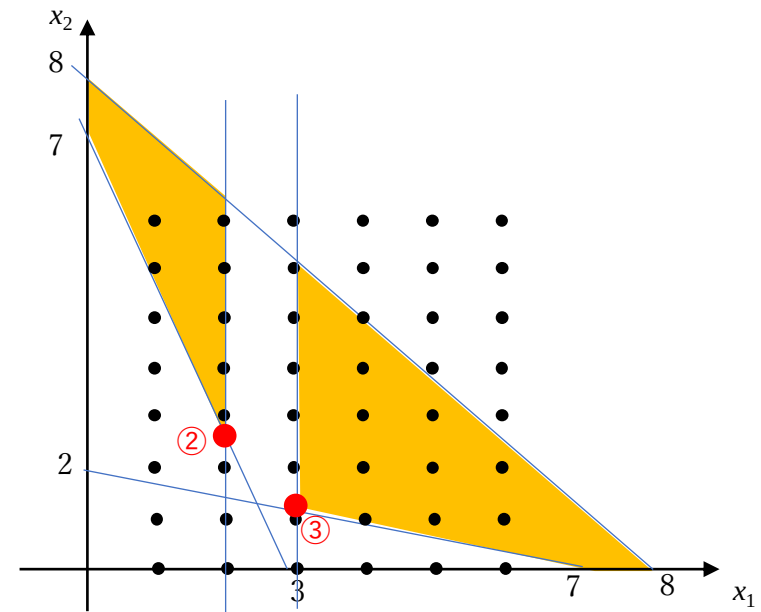
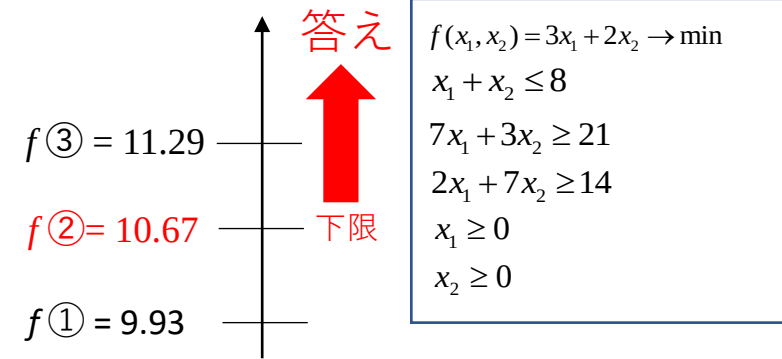
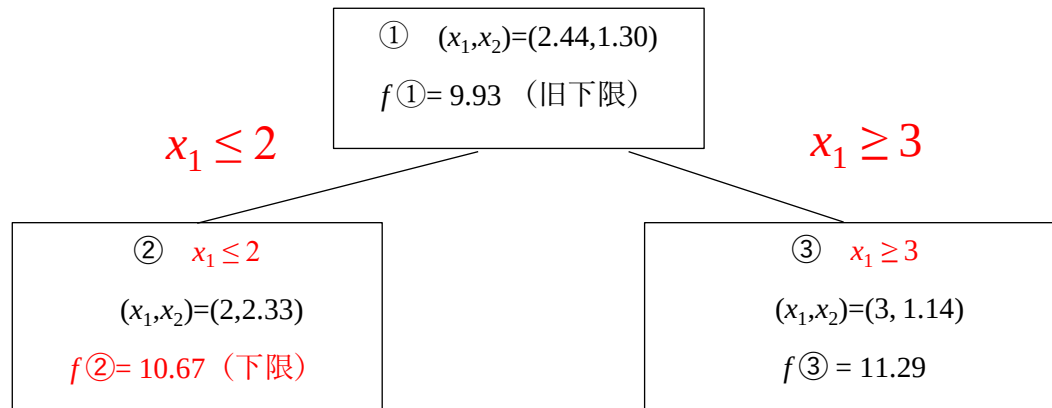
無断転載、配布を禁じます

分枝限定法 (Branch and Bound)

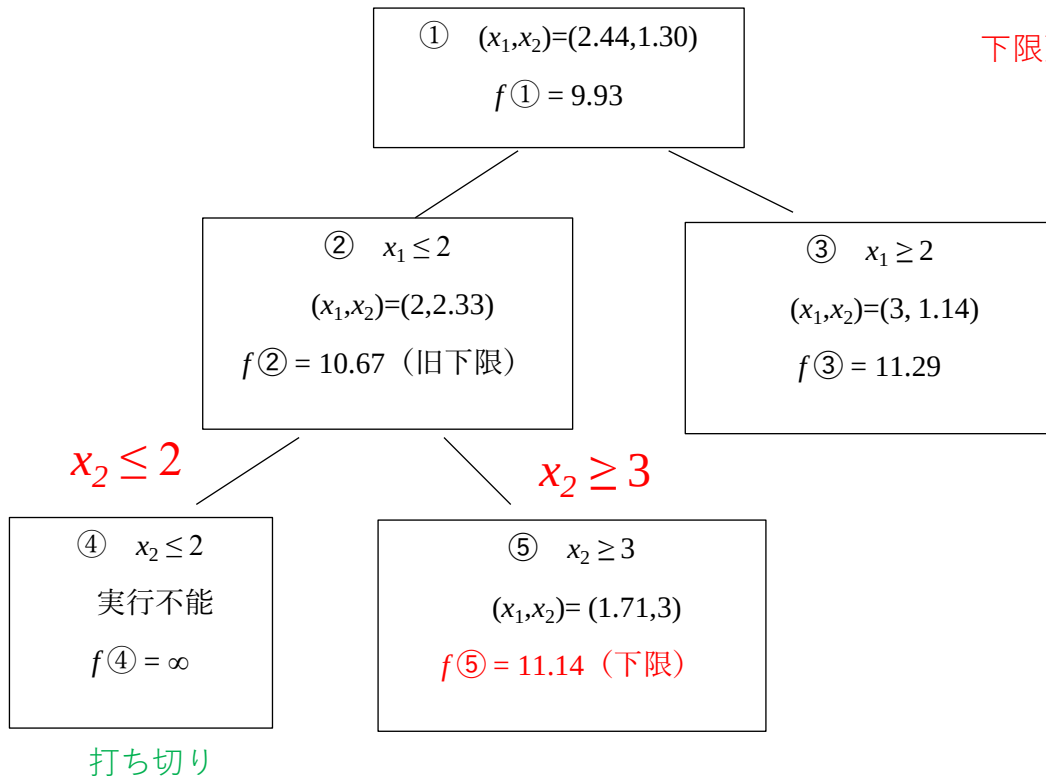
実行可能領域を分割して、それぞれ線形計画問題を解く



下限を更新する



更に分割していく



下限更新

$$f^{(3)} = 11.29$$

$$f(5) = 11.14$$

$$f(2) = 10.67$$

$$f^{(1)} = 9.93$$

答え

$$f(x_1, x_2) = 3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$$

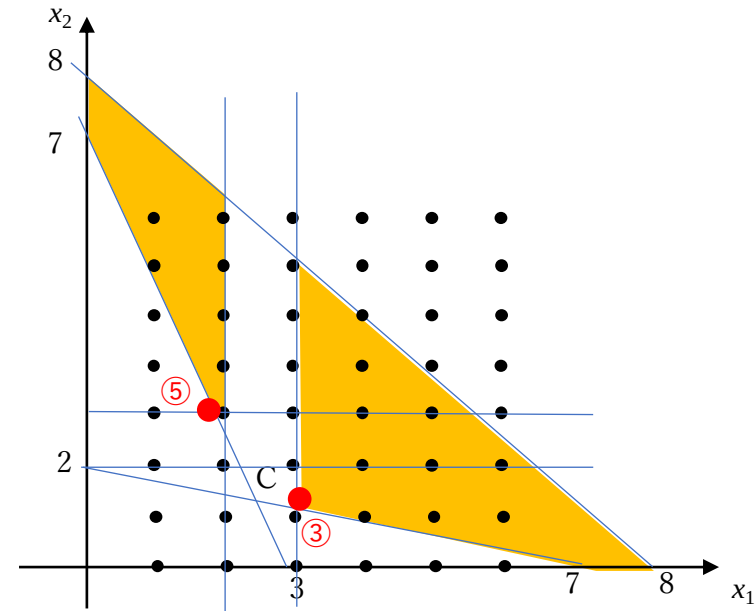
$$x_1 + x_2 \leq 8$$

$$7x_1 + 3x_2 \geq 21$$

$$2x_1 + 7x_2 \geq 14$$

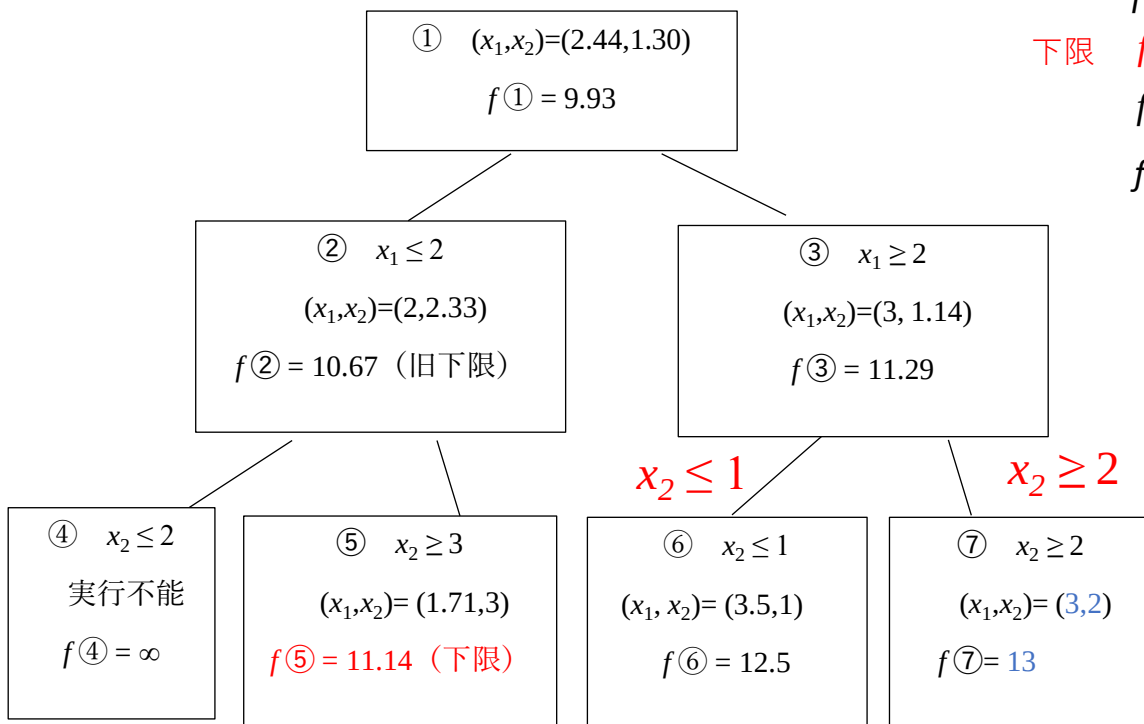
$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$



無断転載、配布を禁じます

③から分割



打ち切り

整数の解!
 答えだろうか?

下限

$$f③ = 11.29$$

$$f⑤ = 11.14$$

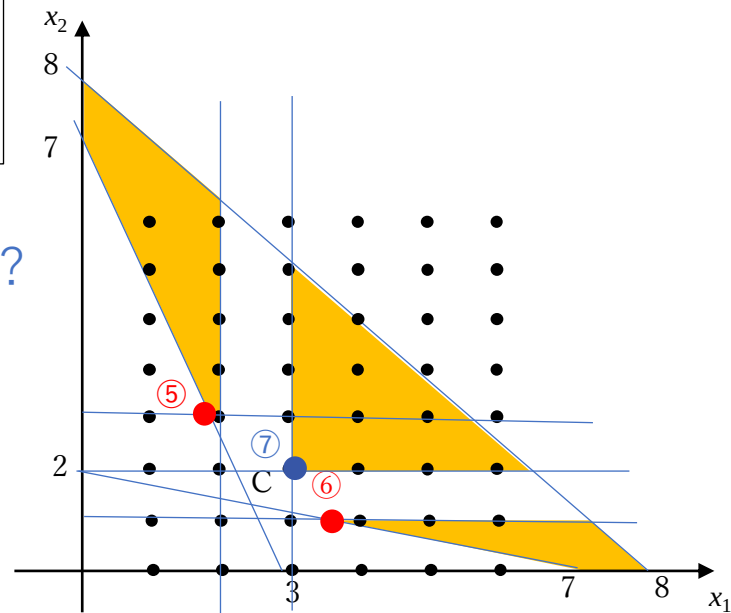
$$f② = 10.67$$

$$f① = 9.93$$

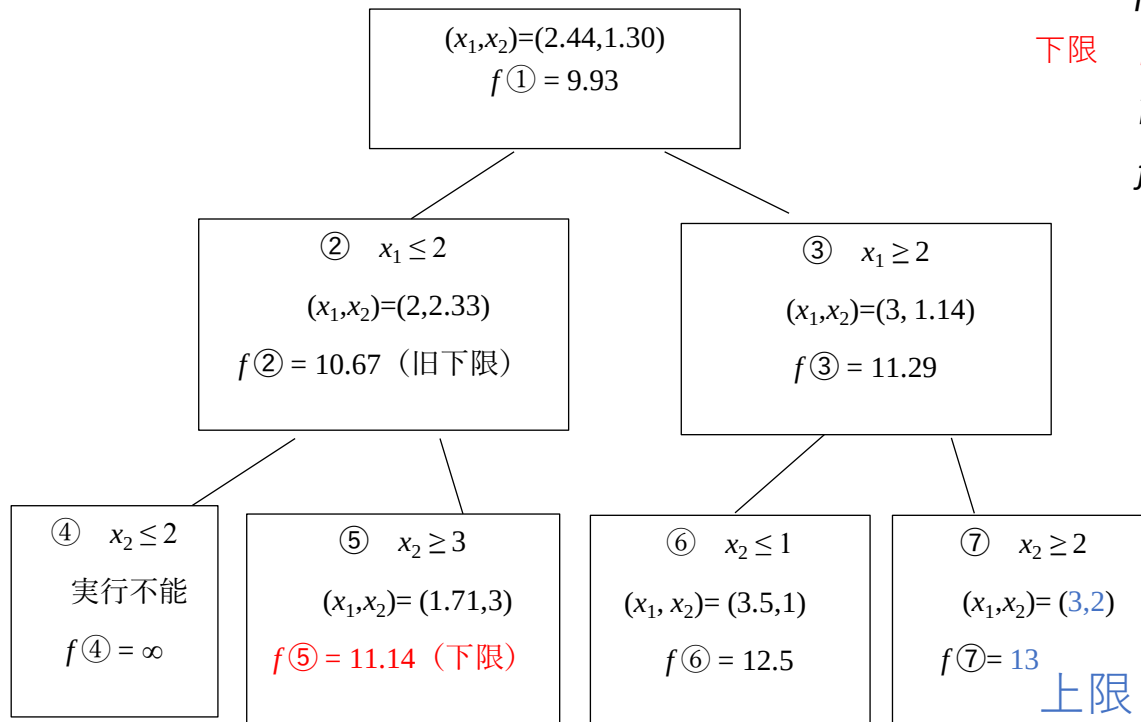
答え



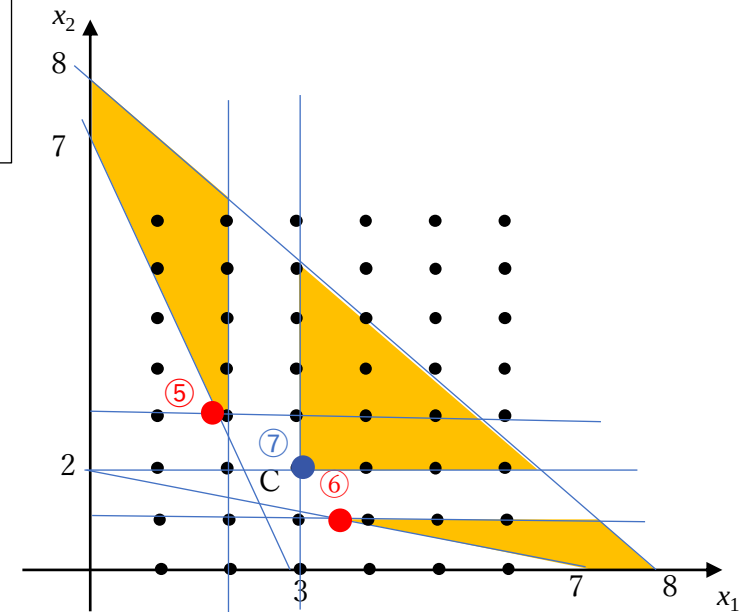
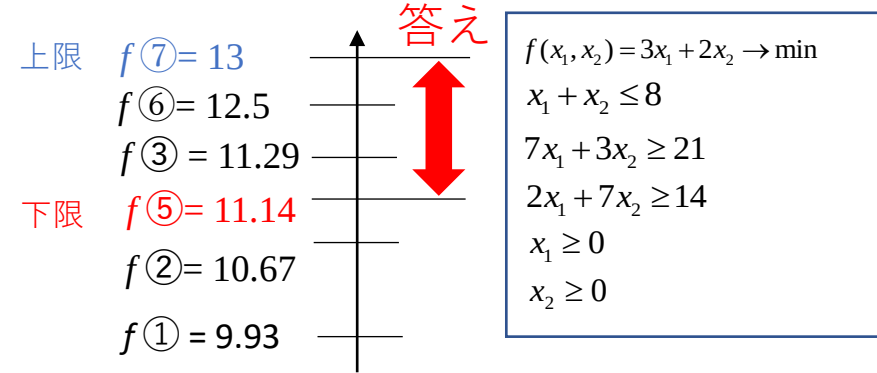
$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= 3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min \\ x_1 + x_2 &\leq 8 \\ 7x_1 + 3x_2 &\geq 21 \\ 2x_1 + 7x_2 &\geq 14 \\ x_1 &\geq 0 \\ x_2 &\geq 0 \end{aligned}$$



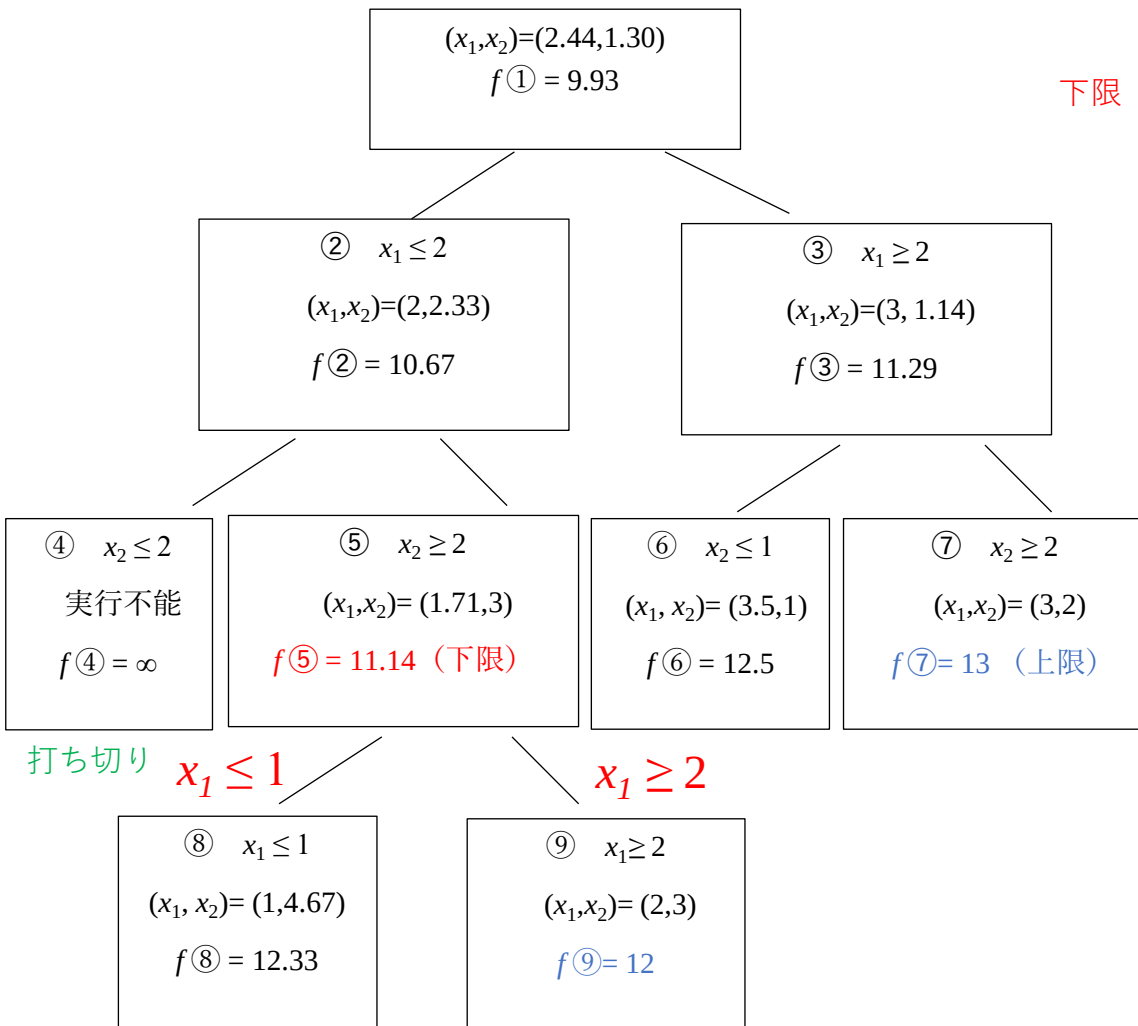
上限を設定



打ち切り



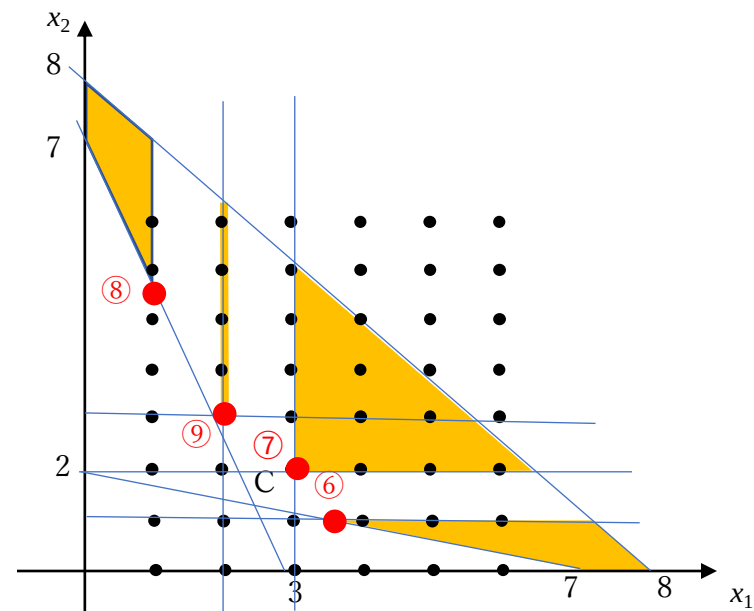
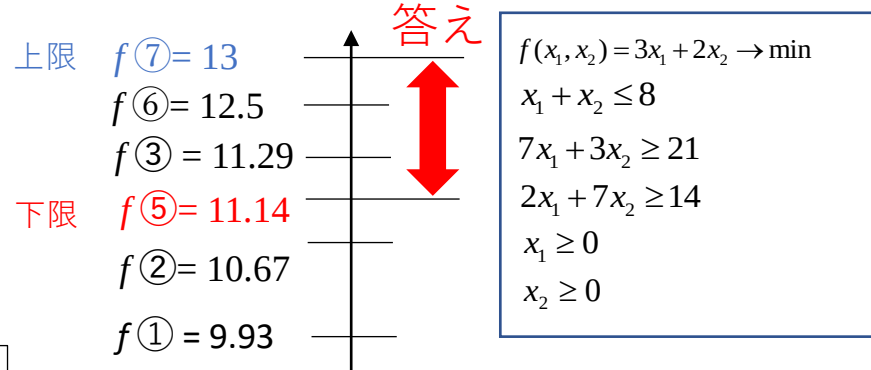
更に⑤から分割



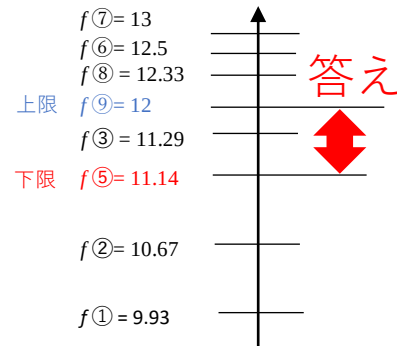
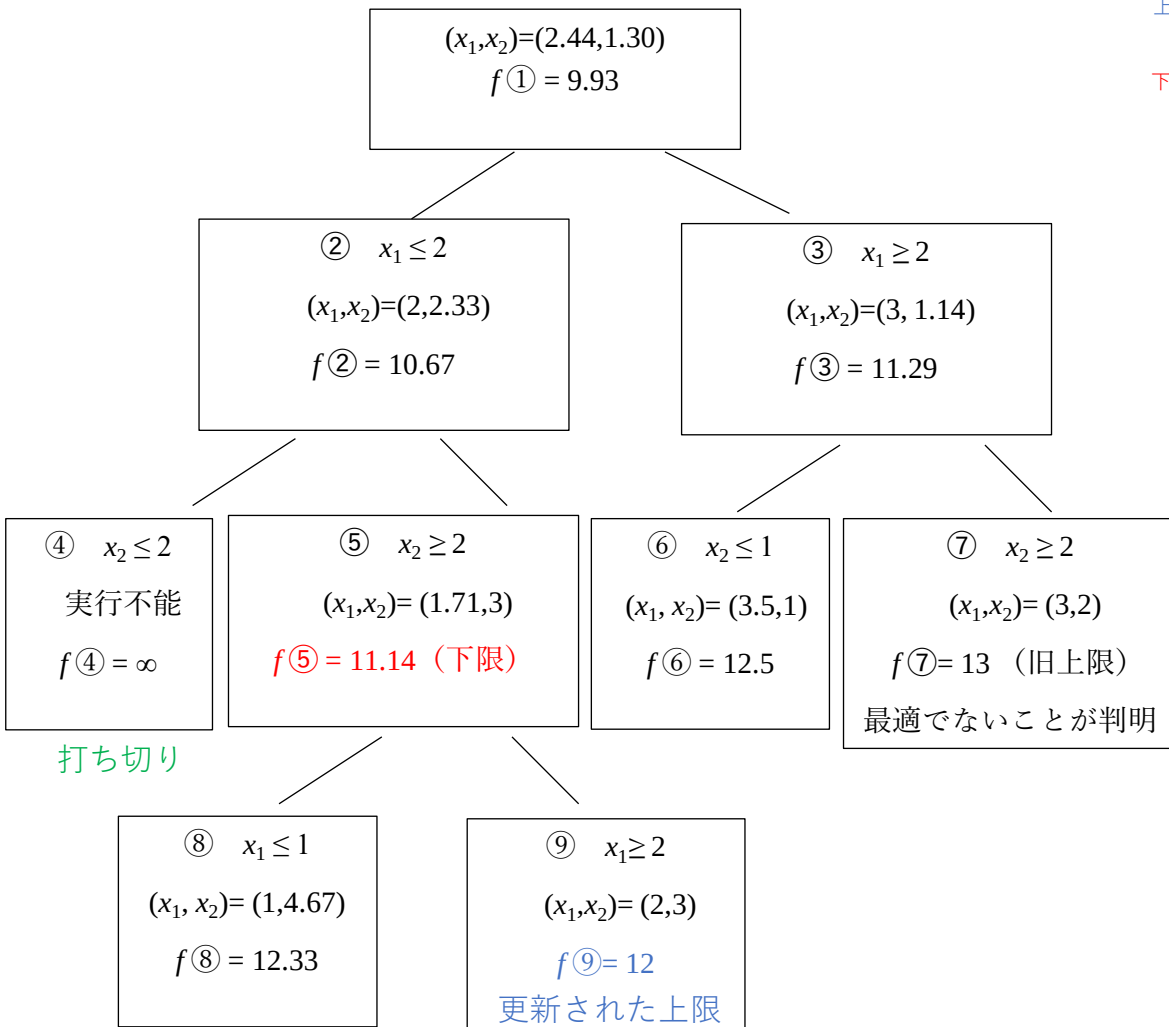
打ち切り $x_1 \leq 1$

$x_1 \geq 2$

またも整数の解
しかも $f⑦$ より小さい



上限を更新



$$f(x_1, x_2) = 3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$$

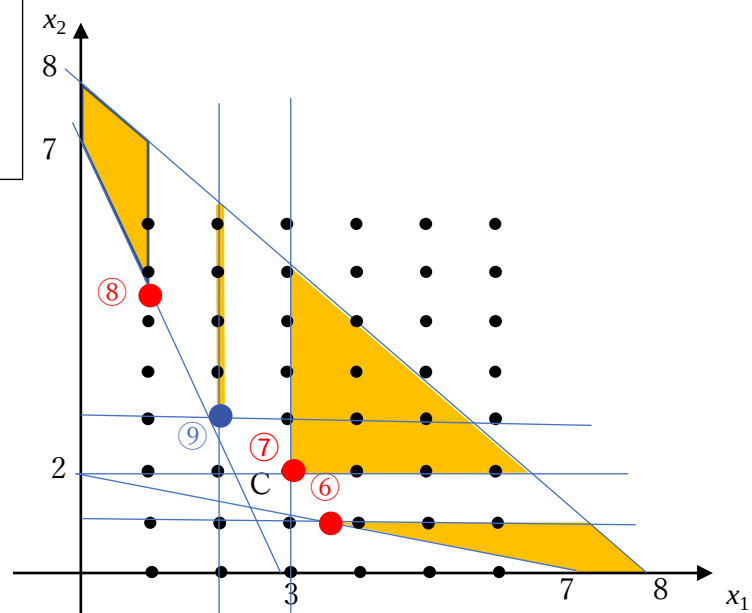
$$x_1 + x_2 \leq 8$$

$$7x_1 + 3x_2 \geq 21$$

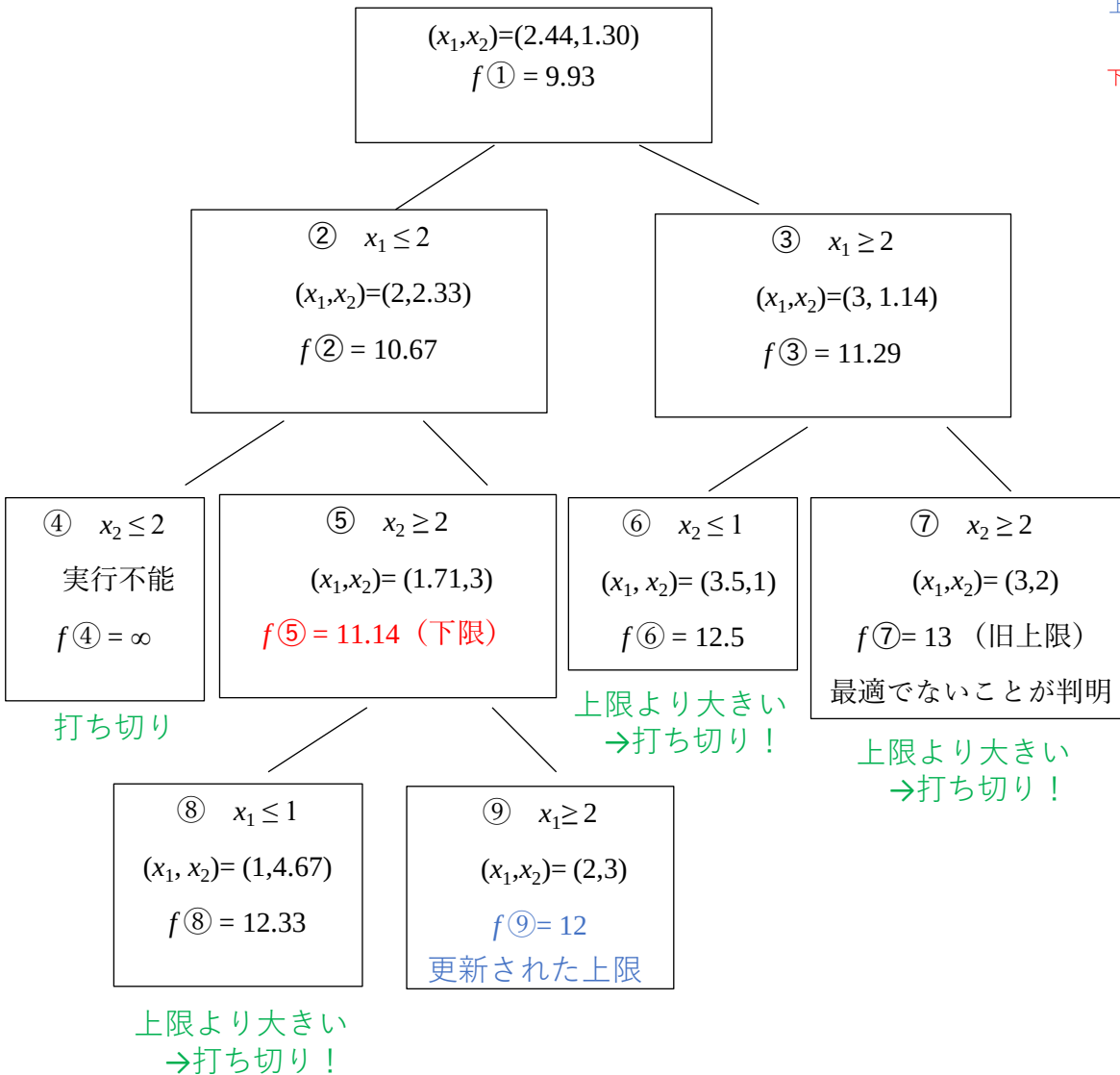
$$2x_1 + 7x_2 \geq 14$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$



打ち切りできるノードが見つかる



$f⑦ = 13$
 $f⑥ = 12.5$
 $f⑧ = 12.33$
 上限 $f⑨ = 12$
 $f③ = 11.29$
 下限 $f⑤ = 11.14$
 $f② = 10.67$
 $f① = 9.93$

答え

$$f(x_1, x_2) = 3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$$

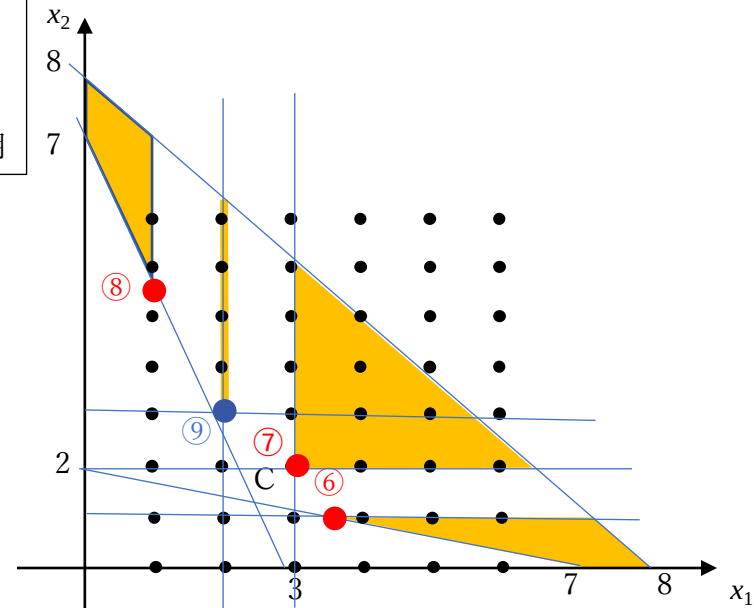
$$x_1 + x_2 \leq 8$$

$$7x_1 + 3x_2 \geq 21$$

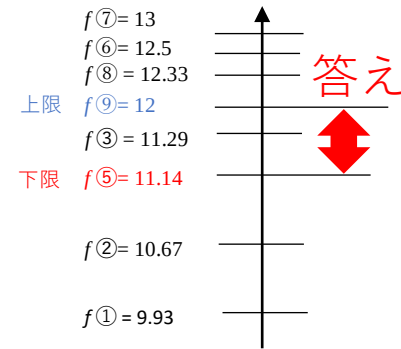
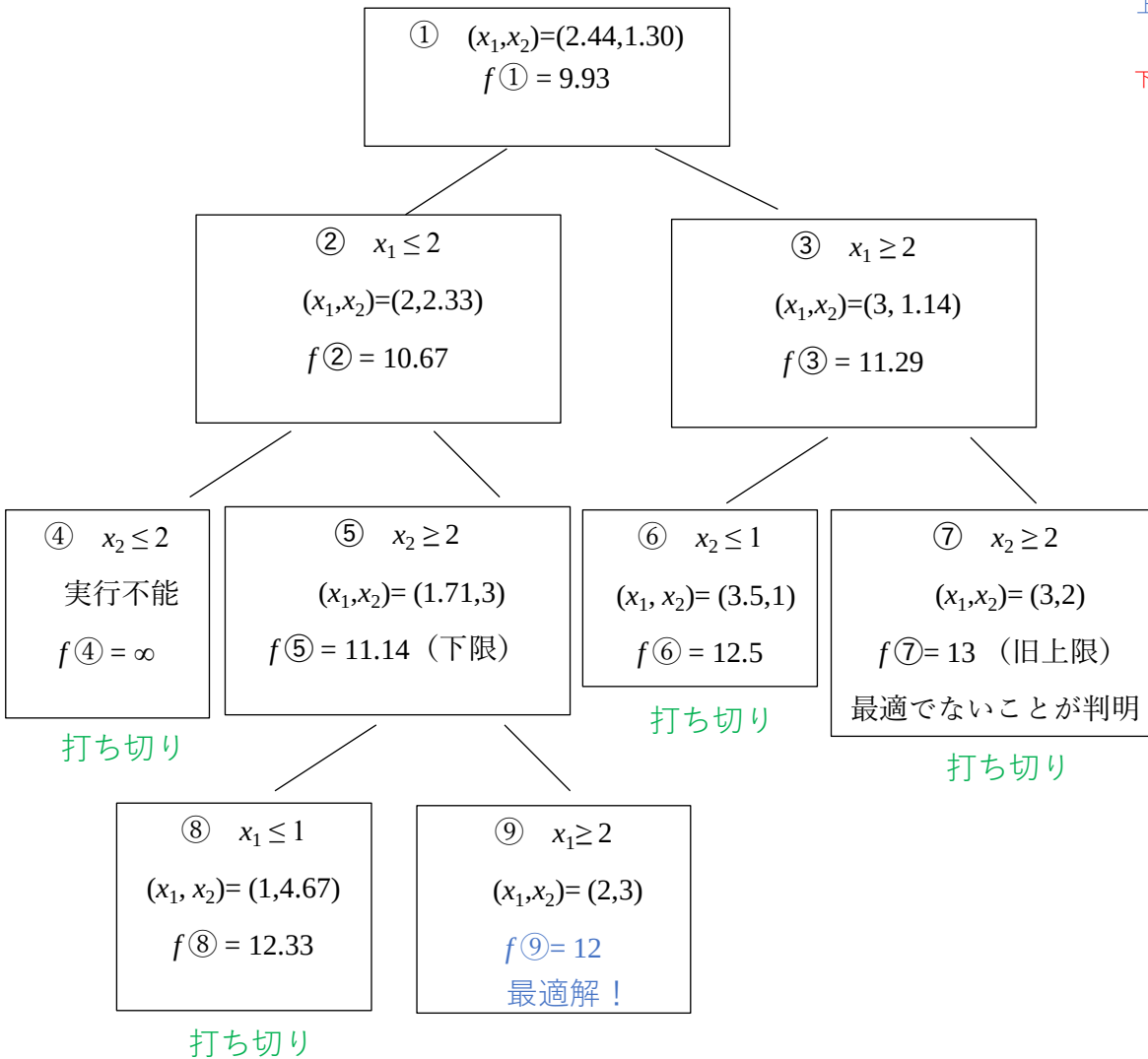
$$2x_1 + 7x_2 \geq 14$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$



これで終了



$$f(x_1, x_2) = 3x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$$

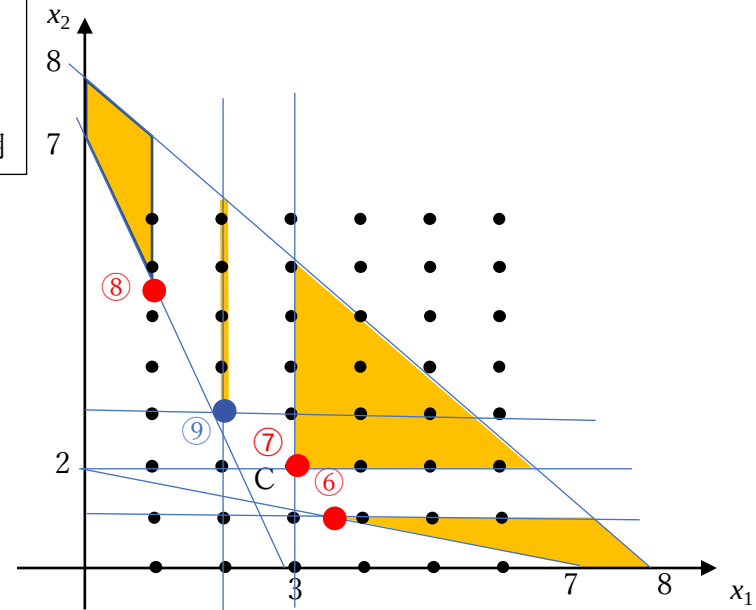
$$x_1 + x_2 \leq 8$$

$$7x_1 + 3x_2 \geq 21$$

$$2x_1 + 7x_2 \geq 14$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$



無断転載、配布を禁じます

分子限定法のまとめ

- 上限と下限を更新することにより、最適解を絞り込んでいく。
- 線形計画問題を繰り返し解かなければならない。
- 本講義では、ツリー出来るだけ横に広げていった (**breadth first**)。それに対し、教科書5.6節では早くツリーを縦に広げていく方法 (**depth first**) が取られている

最適化手法まとめ

	制約なし	制約あり 整数制約なし	制約あり 整数制約あり
線形	-	線形計画 実行可能領域の頂点を調べる	整数計画 分枝限定法
非線形	停留点 ヘッセ行列の行列式 で最大・最小・鞍点 を判別	非線形計画 KKT条件を解く	非線形整数計画 本講義では扱わず