2022/4/11 Mon.

問題解決

最適化基礎

堀田 敬介

最適化 Optimization

例題：週末に子供と遊ぶ

- 遊ぶ時間は最大5時間で，遊びは屋外での遊びと室内の遊びの2つ
- 遊ぶと疲れるので各々，1時間あたり屋外は4，室内は2の疲れがたまる
- 平日に疲れを残さないために，最大疲労許容値は16とする
- 子供の1時間あたり満足度は，屋外の遊びが4，室内の遊びが3
- 子供の満足度を最大化したい

⇒ 最適化問題として定式化し，答え（解 solution）を求める

※最適化問題 optimization problemとは，与えられた条件（制約 constraints）のもとで，目的となる値（目的関数 objective functionの値）を最大化 maximizationする問題（目的は最小化minimizationの場合もある）

※制約条件を満たす解を，実行可能解 feasible solutionとよぶ

※実行可能解の中で最大値 maximum valueを与える解を最適解 optimal solutionとよぶ

最適化 Optimization

例題：週末に子供と遊ぶ

- 遊ぶ時間は最大5時間で，遊びは屋外での遊びと室内の遊びの2つ
- 遊ぶと疲れるので各々，1時間あたり屋外は4，室内は2の疲れがたまる
- 平日に疲れを残さないために，最大疲労許容値は16とする
- 子供の1時間あたり満足度は，屋外の遊びが4，室内の遊びが3
- 子供の満足度を最大化したい

定式化するには，まず問題で求めたい解を変数 variablesに設定

- 屋外の遊び時間を x_1時間，室内の遊び時間を x_2時間とする

定式化

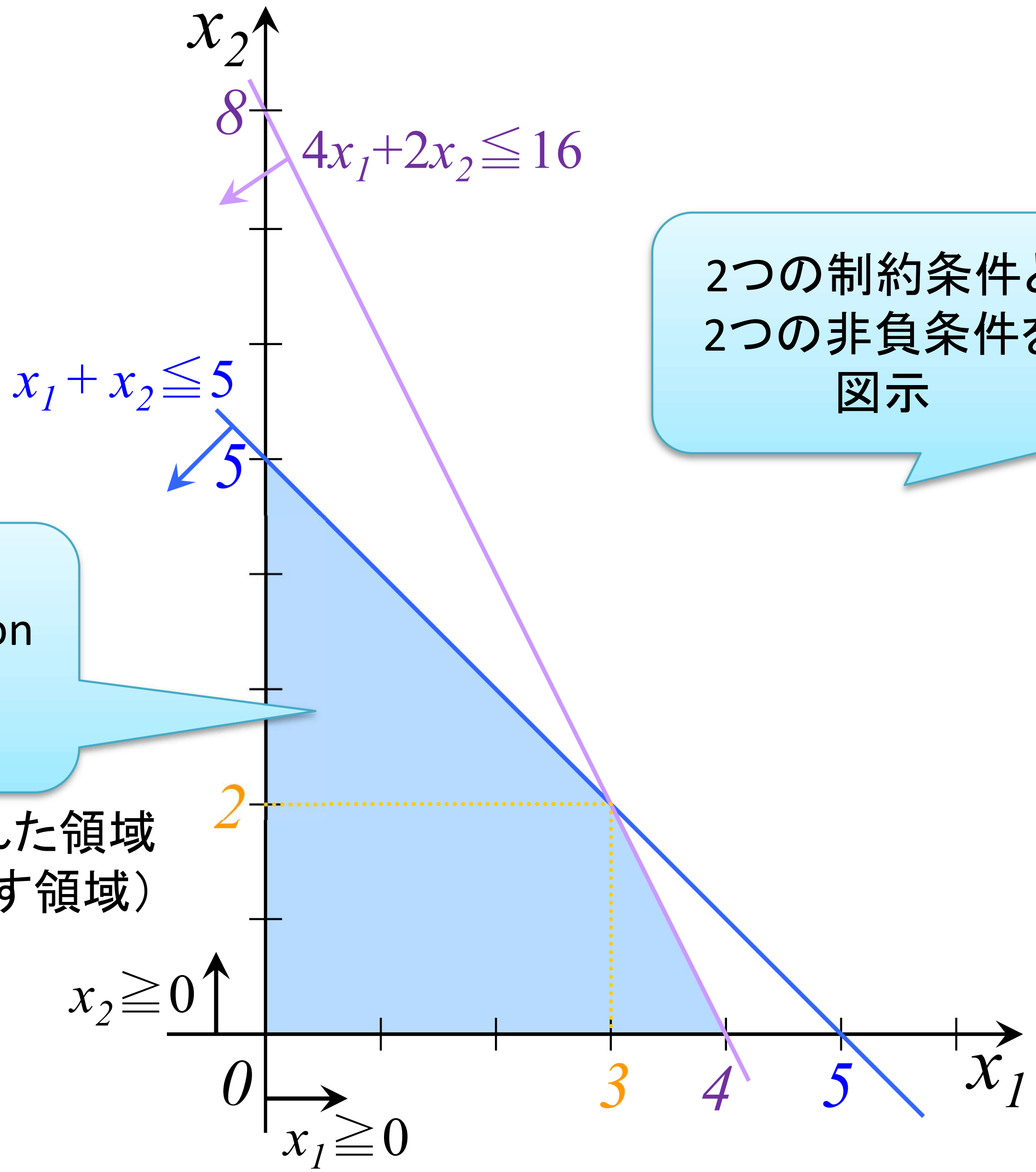
$$
\begin{aligned}
\text{max.}\ & 4x_1 + 3x_2 && \leftarrow \text{目的関数：満足度最大化} \\
\text{s. t.}\ & x_1 + x_2 \leqq 5 && \leftarrow \text{制約条件1：遊び時間} \\
& 4x_1 + 2x_2 \leqq 16 && \leftarrow \text{制約条件2：許容疲労度} \\
& x_1,\ x_2 \geqq 0 && \leftarrow \text{非負条件：遊び時間は0以上}
\end{aligned}
$$

最適化 Optimization

例題 : 定式化

$$\begin{aligned} \max.\ & 4x_1 + 3x_2 \\ \text{s. t.}\ & x_1 + x_2 \leqq 5 \\ & 4x_1 + 2x_2 \leqq 16 \\ & x_1,\ x_2 \geqq 0 \end{aligned}$$

制約条件を図示する



2つの制約条件と2つの非負条件を図示

実行可能解 feasible solution の 領域 region

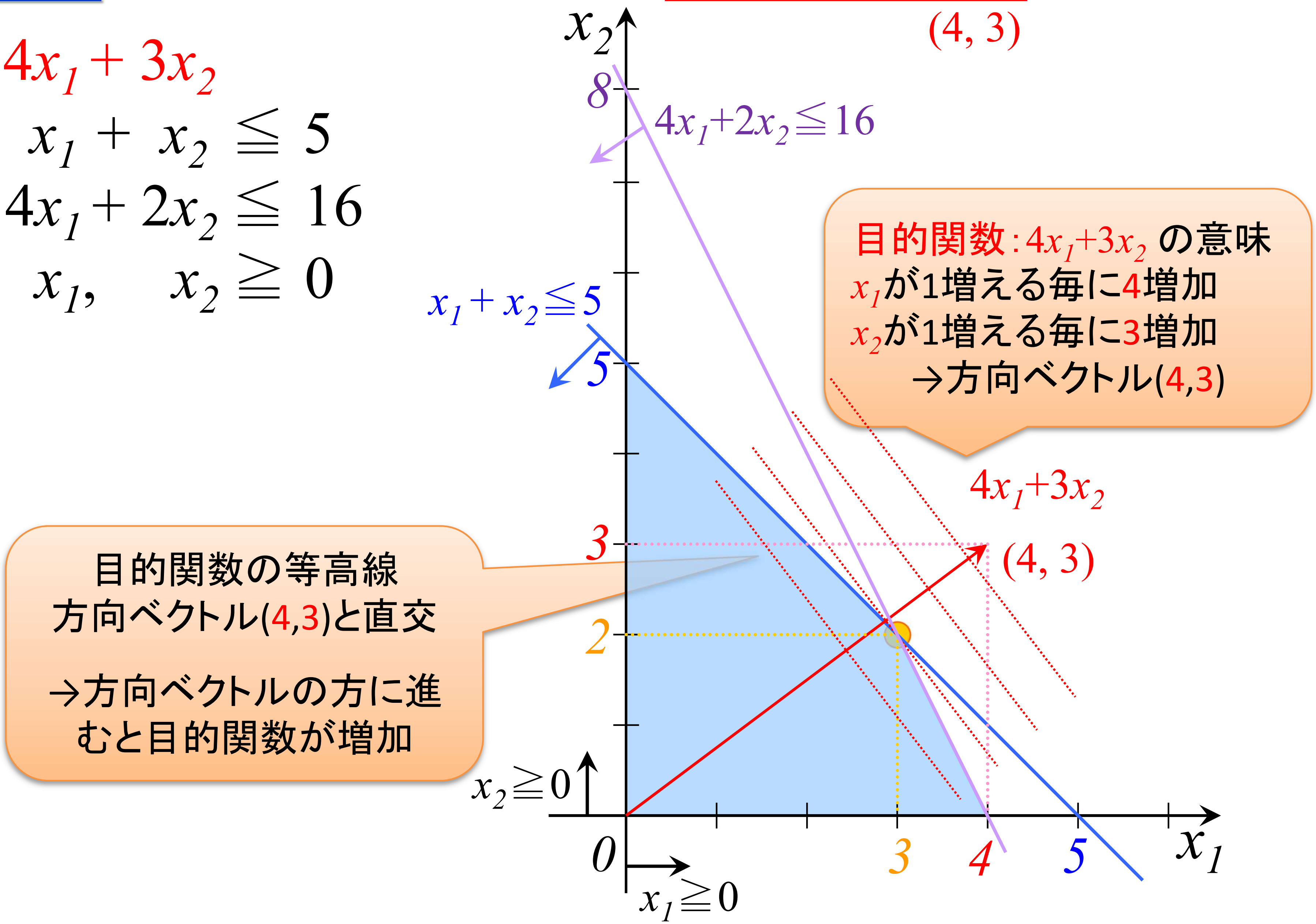
全ての制約に囲まれた領域（全ての条件を満たす領域）

最適化 Optimization

例題：定式化

$$\begin{aligned} \max.\ & 4x_1 + 3x_2 \\ \text{s. t.}\ & x_1 + x_2 \leqq 5 \\ & 4x_1 + 2x_2 \leqq 16 \\ & x_1,\ x_2 \geqq 0 \end{aligned}$$

目的関数の方向を図示



行列 matrix

- 数値を長方形の形に並べて括弧でくくったものを行列matrixとよぶ
- 横の並びを行row，縦の並びを列columnとよぶ
- 行数がm，列数がnの行列をm×n行列とか(m,n)型行列とよぶ
- 行数と列数の組合せである(m, n)を行列の大きさsizeとよぶ
- 行数mと列数nが等しい時，即ちn×n行列をn次正方行列とよぶ
- 行列内の数値を，行列の成分component（or 要素element）とよぶ
  - 例）2×3行列

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 \\ 2 & \boxed{-4} & 7 \end{pmatrix}$$

（2,3）成分
「2行2列目の成分が-4だよ」の様に使う

3次正方行列

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 \\ -1 & 4 & -2 \\ 5 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

正方行列の対角成分diagonal elements
正方行列は行数と列数が同じなので，
対角成分は左上の(1,1)成分～右下の(n,n)成分となる
（※例では(1,1), (2,2), (3,3)成分）

※外側の括弧は，( )の代わりに [ ] を使う場合もある（特に決まりはない．好みの問題）

ベクトル vector

- m×1行列をm次元（行）ベクトル m-dimensional (row) vectorとよぶ
- 1×n行列をn次元（列）ベクトル n-dimensional (column) vectorよぶ

  - 例）3次元（行）ベクトル
    $$\begin{pmatrix} 4 & 7 & -2 \end{pmatrix}$$
    2次元（列）ベクトル
    $$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

次元dimension とは，単にベクトルの成分の数だと思えば良い
※3次元ベクトルは，数値が3つあるので3次元
※図に描画する場合に，座標が何個あるかに関係するので次元という言葉が出てくる
（2次元ベクトルは，2次元空間上に，3次元ベクトルは3次元空間上に描画される）

※ベクトルを「行」で書くか「列」で書くかは好み（都合のよい方を使ってよい）だが，慣例上どちらかに統一して話を進める．ここでは「列ベクトル」に統一して話を進める

- 行列とベクトルの表現
  - 例えば，行列は大文字のアルファベットで表記する $A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 \\ 2 & -4 & 7 \end{pmatrix}$
  - 例えば，ベクトルは小文字の太字で表記する $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$

単位行列と零行列，行列の転置

- 対角成分が全て1でそれ以外が0の行列を単位行列identity matrix, unit matrix とよび，記号I で表す
  - 例）3次元単位行列　　　　2次元単位行列

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- 要素が全て0の行列を零行列zero matrixとよび，Oで表す
  - 例）3次元零行列　　　　2次元零行列

$$O = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad O = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- 行列Aの(i,j)成分を全て(j,i)成分に替えたものを転置行列transposed matrix とよびA^Tと書く．また，この操作を「行列Aを転置する」とよぶ
  - 例えば(1,3)成分→(3,1)成分に，(2,4)成分→(4,2)成分など．よって，対角成分は転置しても変化しない(例：(2,2)成分→(2,2)成分)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 \\ 2 & -4 & 7 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \text{Aを転置する} \rightarrow \quad A^T = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & -4 \\ -2 & 7 \end{pmatrix}$$

行列とベクトルの計算1

- 行列の加法（減法）
  - 足し算は，サイズの同じ行列どうしで，対応する成分について計算する
  - 引き算も同様

  - 例）(2,3)行列どうしの足し算

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 \\ 2 & -4 & 7 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 5 & 4 & 0 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+5 & 3+4 & -2+0 \\ 2+(-1) & -4+(-2) & 7+1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 7 & -2 \\ 1 & -6 & 8 \end{pmatrix}$$

  - サイズの異なる足し算（引き算）はできない

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 \\ -1 & 4 & -2 \\ 5 & 1 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 4 & -3 \\ -2 & 5 \end{pmatrix}$$ ×（計算不能）

  - 例）2次元ベクトルどうしの引き算

$$\begin{pmatrix} -3 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-3)-2 \\ 1-4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 \\ -3 \end{pmatrix}$$

行列とベクトルの計算2

- 行列の乗法
  - 掛けられる行列の列数と掛ける行列の行数が同じ場合のみ，掛け算できる
  - (m,n)行列×(n,p)行列＝(m,p)行列となる
  - 行列の除算（割り算）はない
  - 掛け算の記号「×」は省略することが多い

nが一致していると掛け算可能で
結果の行列サイズは$m \times p$となる

  - 例）$(1,3)$行列×$(3,2)$行列の掛け算

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 4 & -3 \\ -2 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \times 1 + 2 \times 4 + 1 \times (-2) & 3 \times 2 + 2 \times (-3) + 1 \times 5 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 9 & 5 \end{pmatrix}$$

$n=3$が一致しているので掛け算可能で
結果の行列サイズは1×2となる

  - 掛けられる行列の列数と掛ける行列の行数が異なると，掛け算できない

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 \\ 2 & -4 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 4 & 0 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

×掛け算不可能

$(2,3)$行列と$(2,3)$行列で
$3 \neq 2$ なので掛け算不可能

行列とベクトルの計算3

- 行列のスカラー倍
  - 行列（やベクトル）にスカラーを掛け算可能（行列のスカラー倍とよぶ）

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 4 & -3 \\ -2 & 5 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

行列にスカラー（普通の数値）を掛ける演算は，
行列の全要素それぞれにスカラーを掛けること

  - 例）行列Aを3倍する

$$3A = 3\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 4 & -3 \\ -2 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3\times 1 & 3\times 2 \\ 3\times 4 & 3\times(-3) \\ 3\times(-2) & 3\times 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 6 \\ 12 & -9 \\ -6 & 15 \end{pmatrix}$$

ベクトルにスカラーを掛ける場合も同様

  - 例）ベクトル$\boldsymbol{x}$を-2倍する

$$-2x = -2\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2\times 3 \\ -2\times 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -6 \\ -2 \end{pmatrix}$$

行列演算の性質

- 加法(減法)の性質
  - 同一サイズの行列A,B,Cとスカラーp,qに対し，次が成り立つ
    - $1A=A$, $0A=O$, $A-A=O$
    - $(pq)A = p(qA)$
    - $(A+B) + C = A + (B+C)$ 結合則
    - $A+B = B+A$ 交換則
    - $(p+q)A = pA + qA$ 分配則
    - $p(A+B) = pA + pB$ 分配則
- 乗法の性質
  - 積が計算できる行列A,B,Cとスカラーpに対し，次が成り立つ
    - $(AB)C = A(BC)$ 結合則
    - $p(AB) = (pA)B = A(pB)$ スカラー倍
    - $A(B+C) = AB + AC$ 分配則(右)
    - $(A+B)C = AC + BC$ 分配則(左)
  - 積が計算できる行列A,Bに対し，交換則が成り立つとは限らない
    - $AB = BA$ の場合と，$AB \neq BA$ の場合がある

最適化問題を行列で表す1

- 最適化問題
  - 例題：週末に子供と遊ぶの定式化

$$
\begin{aligned}
\max.\ & 4x_1 + 3x_2 \\
\text{s.t.}\ & x_1 + x_2 \leqq 5 \\
& 4x_1 + 2x_2 \leqq 16 \\
& x_1,\ x_2 \geqq 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{pmatrix} 4 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 4x_1 + 3x_2
$$

$$
\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 \\ 4x_1 + 2x_2 \end{pmatrix}
$$

- 行列で表記した最適化問題

$$
\begin{aligned}
\max.\ & \begin{pmatrix} 4 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \\
\text{s.t.}\ & \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \leq \begin{pmatrix} 5 \\ 16 \end{pmatrix} \\
& \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$$
A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 2 \end{pmatrix},\quad
\boldsymbol{c} = \begin{pmatrix} 5 \\ 16 \end{pmatrix}, \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 5 \\ 16 \end{pmatrix},\quad
\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \boldsymbol{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}
$$

と置けば
（と記号で表せば）

- さらに簡略化

$$
\begin{aligned}
\max.\ & \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} \\
\text{s.t.}\ & A\boldsymbol{x} \leqq \boldsymbol{b} \\
& \boldsymbol{x} \geqq \boldsymbol{0}
\end{aligned}
$$

最適化問題を行列で表す2

- 最適化問題(例2)

$$
\begin{aligned}
\text{max.}\ & 5x_1 + 2x_2 + 3x_3 \\
\text{s. t.}\ & x_1 + x_2 - 4x_3 \leqq 7 \\
& 3x_1 - 2x_2 + x_3 \leqq 11 \\
& x_1,\ x_2,\ x_3 \geqq 0
\end{aligned}
$$

⇩

$$
\begin{aligned}
\text{max.}\ & \begin{pmatrix} 5 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \\
\text{s. t.}\ & \begin{pmatrix} 1 & 1 & -4 \\ 3 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \leq \begin{pmatrix} 7 \\ 11 \end{pmatrix} \\
& \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \geq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -4 \\ 3 & -2 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{c} = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 7 \\ 11 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \boldsymbol{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

と置けば

(と記号で表せば)

⇨

$$
\begin{aligned}
\text{max.}\ & \boldsymbol{c}^T \boldsymbol{x} \\
\text{s. t.}\ & A\boldsymbol{x} \leqq \boldsymbol{b} \\
& \boldsymbol{x} \geqq \boldsymbol{0}
\end{aligned}
$$

足し算の記号 Σ(シグマ)

- 足し算を表す記号Σ(シグマと読む)の使い方
  - 例1) $\sum_{i=1}^{n} x_i = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$
  - 例2) $\sum_{i=2}^{5} a_i = a_2 + a_3 + a_4 + a_5$
  - 例3) $\sum_{j=1}^{4} 3y_{ij} = 3y_{i1} + 3y_{i2} + 3y_{i3} + 3y_{i4}$
  - 例4) $\sum_{i=1}^{7} i = 1 + 2 + 3 + 4 + 5 + 6 + 7$
  - 例5) $\sum_{i=1}^{6} k = k + k + k + k + k + k = 6k$

「Σの右にある「足すもの」x_iを，Σの下にある添え字iについて1から始めて(i=1)，順に1つずつ大きくし(i=1,2,3,4,…)，Σの上にあるnまで足しなさい」という意味
だから，「$x_1+x_2+x_3+x_4+\ldots+x_n$」となる

※ギリシャ文字のΣ(大文字)は，英語ではSに相当する．足し算 summation の頭文字から
※Σの小文字はσ （←こちらは統計学での「標準偏差 standard deviation」などに使う）
※添え字に i を使うことが多いのは，添え字の英語 index の頭文字からくる慣例

最適化問題をΣ表記で表す1

- 最適化問題
  - 例題：週末に子供と遊ぶの定式化

$$\max.\ 4x_1 + 3x_2$$
$$\text{s. t.}\quad x_1 + x_2 \leqq 5$$
$$4x_1 + 2x_2 \leqq 16$$
$$x_1,\quad x_2 \geqq 0$$

$$\boldsymbol{c} = (c_1\ \ c_2)^T = (4\quad 3)^T$$
$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}$$
$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 16 \end{pmatrix}$$

$$\left\{\begin{array}{l} c_1=4,\ c_2=3 \\ a_{11}=1,\ a_{12}=1,\quad b_1=5, \\ a_{21}=4,\ a_{22}=2,\quad b_2=16 \end{array}\right.$$

と係数・定数を記号に置き換えて

  - Σ表記をするため，係数・定数の数値を記号に置き換えた定式化

$$\max.\ c_1x_1 + c_2x_2$$
$$\text{s. t.}\ a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \leqq b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \leqq b_2$$
$$x_1,\quad x_2 \geqq 0$$

最適化問題をΣ表記で表す1

- 最適化問題
  - Σ表記をするため，係数・定数の数値を記号に置き換えた定式化

$$\begin{aligned} \max.\ & c_1x_1 + c_2x_2 \\ \text{s. t.}\ & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \leqq b_1 \\ & a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \leqq b_2 \\ & x_1,\quad x_2 \geqq 0 \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{c} = (c_1 \ \ c_2)^T = (4 \quad 3)^T$$
$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}$$
$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 16 \end{pmatrix}$$

- Σ表記の最適化問題

$$\begin{aligned} \max.\ & \textstyle\sum_{j=1}^{2} c_j x_j \\ \text{s. t.}\ & \textstyle\sum_{j=1}^{2} a_{1j} x_j \leq b_1 \\ & \textstyle\sum_{j=1}^{2} a_{2j} x_j \leq b_2 \\ & x_j \geq 0\ (j = 1,2) \end{aligned}$$

- さらに2本の制約式（緑）を1本に簡略化

$$\begin{aligned} \max.\ & \textstyle\sum_{j=1}^{2} c_j x_j \\ \text{s. t.}\ & \textstyle\sum_{j=1}^{2} a_{ij} x_j \leq b_i (i = 1,2) \\ & x_j \geq 0\ (j = 1,2) \end{aligned}$$

※行の添え字に i，列の添え字に j を使うのが慣例なので，それに合わせた

最適化問題をΣ表記で表す2

- 最適化問題（例2）

$$
\begin{aligned}
\text{max.}\ & 5x_1 + 2x_2 + 3x_3 \\
\text{s. t.}\ & x_1 + x_2 - 4x_3 \leqq 7 \\
& 3x_1 - 2x_2 + x_3 \leqq 11 \\
& x_1,\ x_2,\ x_3 \geqq 0
\end{aligned}
$$

$$\boldsymbol{c} = (c_1\ \ c_2\ \ c_3)^T = (5\ \ 2\ \ 3)^T$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -4 \\ 3 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 11 \end{pmatrix}$$

$$\left\{\begin{array}{l} c_1=5,\ c_2=2,\ c_3=3 \\ a_{11}=1,\ a_{12}=1,\ a_{13}=-4,\quad b_1=7, \\ a_{21}=3,\ a_{22}=-2,\ a_{23}=1,\quad b_2=11 \end{array}\right.$$

と係数・定数を記号に置き換えて

$$\Downarrow$$

- Σ表記をするため，係数・定数の数値を記号に置き換えた定式化

$$
\begin{aligned}
\text{max.}\ & c_1x_1 + c_2x_2 + c_3x_3 \\
\text{s. t.}\ & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 \leqq b_1 \\
& a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 \leqq b_2 \\
& x_1,\ x_2,\ x_3 \geqq 0
\end{aligned}
$$

最適化問題をΣ表記で表す2

- 最適化問題(例2)
  - Σ表記をするため，係数・定数の数値を記号に置き換えた定式化

$$\max.\ c_1x_1 + c_2x_2 + c_3x_3$$
$$\text{s.t.}\ a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 \leqq b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 \leqq b_2$$
$$x_1,\quad x_2,\quad x_3 \geqq 0$$

$$\boldsymbol{c} = (c_1\ \ c_2\ \ c_3)^T = (5\quad 2\quad 3)^T$$
$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -4 \\ 3 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$
$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 11 \end{pmatrix}$$

- Σ表記の最適化問題

$$\max.\ \sum_{j=1}^{3} c_j x_j$$
$$\text{s.t.}\ \sum_{j=1}^{3} a_{1j} x_j \leq b_1$$
$$\sum_{j=1}^{3} a_{2j} x_j \leq b_2$$
$$x_j \geq 0\ (j = 1,2,3)$$

- さらに2本の制約式(緑)を1本に簡略化

$$\max. \sum_{j=1}^{3} c_j x_j$$
$$\text{s.t.}\ \sum_{j=1}^{3} a_{ij} x_j \leq b_i (i = 1,2)$$
$$x_j \geq 0\ (j = 1,2,3)$$

例1と2，添え字の数値範囲以外は共通