

11 組み合わせ最適化

今回の講義では、最適化の対象が離散的であり、組み合わせで与えられるものに対する問題—組み合わせ最適化問題 (combinatorial optimization problem)—を扱う。

11.1 組み合わせによる解候補数の爆発的増加

ここでは、図 11.1 に示すような街路を考えよう。制約付き最適化問題の定式化として、次のものを考える。ノード 1 から出発してノード 16 に至る経路の内、最短距離のものを求めることを考えよう。ただし、道は図の上から下へ、左から右への方向のみに通行できるものとする。

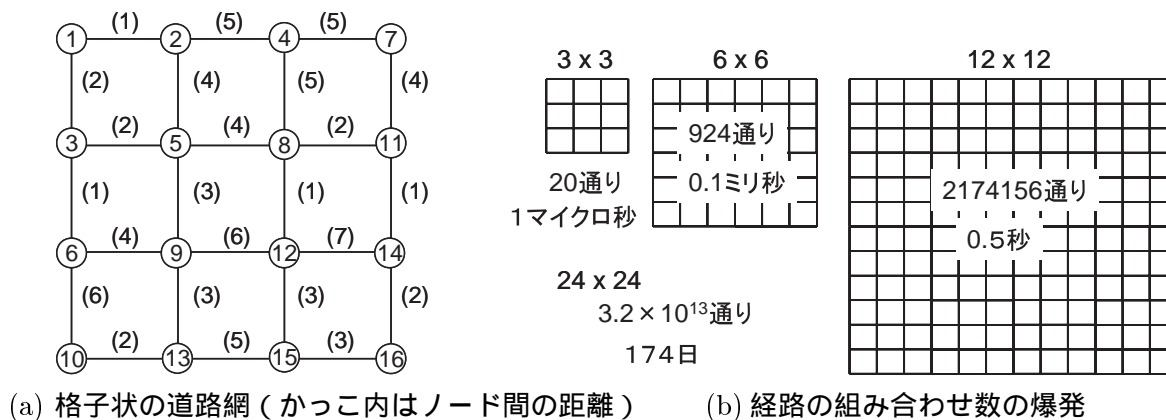


図 11.1: 最短経路問題

この場合、解の候補となる経路の数は、次のようにして求めることができる。ノード 1 からノード 16 までは、どのような経路を通るにせよ、南方向に 3 本、西方向に 3 本の合計 6 本の道路を通る必要がある。南を S 、西を W としたとき、 S が 3 つと W が 3 つの組み合わせによって任意の経路は表現できる。例えば、ノードの番号で 1 2 5 9 12 14 16 という経路は $WSSWWS$ となる。この組み合わせは、 ${}_6C_3 = (6 \times 5 \times 4) / (3 \times 2 \times 1) = 20$ 通りとなる。このくらいの数であれば、すべてを網羅的に調べることは容易なことである。

それでは、街路の一方方向でのブロック数を N としたとき、それが図で示した 3 よりも大きくなったときに、候補となる経路の数はどうなるであろうか？ 図 11.1(b) に見るように、ブロックの増加に対して指数関数的に増加していってしまう。これは組み合わせ的爆発 (combinatorial explosion) と呼ばれる。こうした性質のため、組み合わせ最適化問題においては、問題のサイズが大きくなると網羅的に全数探索を行うことが実用上不可能になる。よって、組み合わせ最適化の課題は、いかにしてこうした膨大な解の候補を全数調べることなく、確実に最適解を見つけるか、ということである。

11.2 分岐限界法

組み合わせ最適化問題に対する手法として古くから用いられているのが、分岐限界法 (branch-and-bound method)¹ である。分岐限界法の手順を、先ほどあげた最短経路問題を例にして説明しよう。

図 11.1(a) に挙げた問題は、ノード 1 から 6 回の道の選択を順に行うことで経路が決定されている²。

¹分枝限界法, 分枝限定法, 分枝限定法などとも呼ばれることもある。

²正確には最後の道は自動的に決定されているし, 他に選択肢のないノードもあるので, 道の選択は高々 5 回である。

何番目に選択される道かによって、図 11.1(a) の道は、図 11.2(a) に示されるような 6 段階に分割される。よって、経路は第一段階で右か下か、第二段階で右か下か、といった選択の連鎖として表現される。

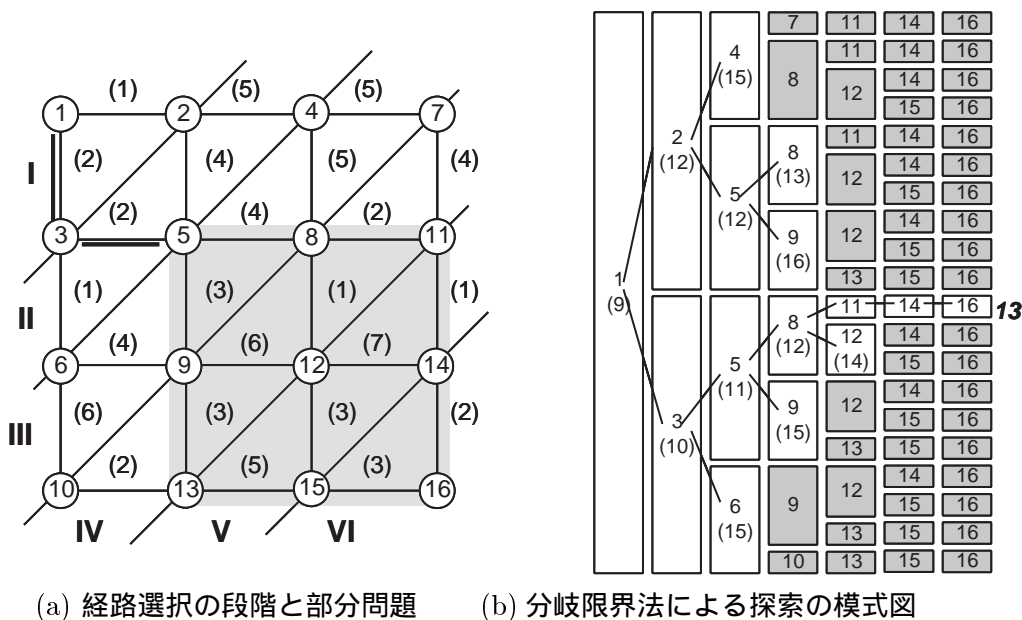


図 11.2: 分岐限界法による最短距離の探索

いま、ノード 1 から出発して、道の選択を 4 回行い、1 2 5 9 とたどってノード 9 まで来たとして、この選択は各ノードで距離の短い道を選んできた経路でもある。ここまでの距離の合計は $1 + 4 + 5 = 10$ である。ここで、

- ノード 9 からゴールのノード 16 までの距離は 10 よりも短くなることはない。
- スタートからゴールまでに 20 より短い経路が存在する。

ということがわかっていたら、この先、ゴールへの道を選択することは意味があるだろうか？ 1 2 5 9 とたどってきた経路選択は、この先、どんな経路をとったとしても、 $10 + 10 = 20$ よりも短くならない。こうした値を下界値 (lower bound) とよぶ。

この下界値をどうやって求めるか、というのが鍵である。下界値を求めるために、その先の選択肢のすべての可能性を調べてしまえば、全数探索をしていることと代わりがなくなる。すべてを調べることなくいかにして下界値を求めることができるのか、ということがを考えてみよう。

この最短経路問題ではこのように考えてみよう。図 11.2(a) で示されるように、1 3 5 の経路でノード 5 に到達したとして、ここまでの距離は $2 + 2 = 4$ となっている。一方でノード 5 からノード 16 に至る道は複数存在する。ここで、次のように考えてみよう。ノード 5 から出発すると、段階 III で選択できる道の距離 (4, 3)、段階 IV では (2, 1, 6, 3)、段階 V では (1, 7, 3, 5)、段階 VI では (2, 3) である。ここで、各段階で選択する道は連結していないといけな訳であるが、その条件を取り去り段階で一番距離の短い道が選択できるとしよう。すると、 $(3 + 1 + 1 + 2) = 7$ となる。この 7 という距離は実際には実現できないかもしれない。しかし、ノード 5 からノード 16 に至る経路で合計 7 より短いものは絶対にあり得ないことは保証できる。すなわち、7 は下界値を与える。ノード 1 からノード 5 までの距離 4 と今求めた下界値 7 を加えた 11 が、1 3 5 と選択してきたものの下界値を与える。すなわち、この先、いかなる選択をしても 11 よりも小さな値をもつことはありえない。

さて、今、ノード 1 からノード 16 までの経路が一つ得られて、それが L_s だったとしよう。そのとき、まだゴールまでの経路があたえられておらず、下界値のみが与えられている探索の中間的状态の下界値 LB_j があったときに、 $L_s < LB_j$ ならば、その先を調べる必要はないことがわかる。このように、下界値で調べることでその先を調べることをやめることを限界操作 (bounding operation) という。図 11.2(b) のグレーの部分限界操作により調べることをしなかった部分を表している。また、下界値より小さい場合に、選択枝を調べて解の分岐を作ることを分岐操作 (branching operation) と呼ぶ。分岐限界法とは、この分岐操作と限界操作を組み合わせることで、全数探索を行わずに最適解を求める手法である。

下界値をもとめるために、制約条件(例では道の連結性)を緩めた問題—緩和問題 (relaxation problem)—で組み合わせのよる解の分岐を回避しながら解を求め、それを下界値とすることがよく行われる。また、限界操作を有効に行うために、なるべく正確な下界値を求めるとともに、なるべく早い段階に小さな値をもった解を見つけておくことも重要である。そのため、最も小さな下界値をもった部分が優先的に探索される(最良優先探索)。

11.3 動的計画法

上で述べた最短経路決定問題は、ある段階での決定が次の段階に影響を与えるという過程—多段階決定過程—を持った問題である。分岐限界法とならび、こうした問題に対する典型的な手法が 1957 年に Richard Bellman によって提案された動的計画法 (dynamic programming) である。

動的計画法においては、第 i 段階 ($i = 1, \dots, N$) における対象の状態 v_i と、そこにおける操作(あるいは選択) x_i を考え、次の条件を満足するものとする。

- 第 $i+1$ 段階の状態 v_{i+1} は、第 i 段階の状態 v_i とそこで行った操作 x_i によってのみ一意に決定され、 $i-1$ 段階以前の状態と操作には影響されない。

$$v_{i+1} = T(v_i, x_i) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (11.1)$$

- n 段階全体での評価関数 f の値は、各段階の状態と操作の関数の和として与えられる。

$$f = g_1(v_1, x_1) + \dots + g_N(v_N, x_N) \quad (11.2)$$

こうした条件を満足する問題に対して、以下にあげることが成り立つ。

【最適性の原理】(principle of optimality)

第 i 段階の状態 v_i から最終段階にいたる最適な選択があったとき、それは第 $i+1$ 段階の状態 $v_{i+1} = T(v_i, x_i)$ から最終段階にいたる最適な選択となっている。

これを数式で表現すると、

$$f^{(n,N)}(v_n) = g_n(v_n, x_n^*) + f^{(n+1,N)}(T(v_n, x_n^*)) \quad (11.3)$$

となる。ただし、 $f^{(n,N)}(v_n)$ は第 n 段階から出発して最適な選択による最適値、 x_n^* は第 n 段階における最適選択を表す。

このことを、先の最短経路問題で考えてみよう。図 11.2(a) のノード 5 に注目してみよう。ノード 5 では右の選択でノード 8 に、下の選択でノード 9 に移る。最適性の原理の述べていることは、ノード 5 から最後のノード 16 に至る最短の経路は、ノード 8、ノード 9 のどちらを経由するにしても、それぞれのノードからノード 16 に至る最短経路を必ず部分として含んでいる、ということである。ノード 8 からノード 16 に至る最短経路は 8 → 11 → 14 → 16 で経路長は 5、ノード 9 からノード 16 に至る最短経路は

9 13 15 16 で経路長は 11 ということがわかっているとすると、ノード 5 における最適な選択は右でノード 8 に至るものであり、最適経路は 5 8 11 14 16 となる。

もう少し違った例題に動的計画法の考え方を適用してみよう。

【販売計画問題】

1 月から 4 月までの期間限定で物品販売をする。毎月初めに商品の仕入れを行い、販売する。物品の販売と仕入れ価格は予め以下のように決まっている。ただし倉庫の容量は 1 万個で 1 月最初には在庫は 0 個とする。また、販売したい個数だけ販売できるものとする。

	1 月	2 月	3 月	4 月
仕入れ価格	15 円	18 円	17 円	20 円
販売価格	17 円	19 円	19 円	21 円

このとき、最大の利潤が得られるように各月の仕入れ数と販売数を決定せよ。

ここでは i 月初め（仕入れ前）の在庫量を s_i 、仕入れ量と販売量をそれぞれ x_i, y_i 、仕入れ価格と販売価格を p_i, q_i とすると、次の式がなりたつ。

$$s_{i+1} = s_i + x_i - y_i \quad (11.4)$$

$$g_i(s_i, x_i, y_i) = q_i y_i - p_i x_i \quad (11.5)$$

ただし、 $x_i, y_i, s_i \geq 0, x_i \leq 10,000 - s_i, y_i \leq s_i + x_i, s_1 = 0$ である。

動的計画法では最終段階から順に最適化問題を解いていく。すなわち、4 月においては、

$$f^{(4)}(s_4) = 21y_4 - 20x_4 \quad (11.6)$$

$$0 \leq x_4 \leq 10,000 - s_4, \quad 0 \leq y_4 \leq s_4 + x_4 \quad (11.7)$$

これの最大値を求めると、 $x_4 = 10,000 - s_4, y_4 = 10,000, f^{(4)}(s_4) = 10,000 + 20s_4$ となる。

同様に、3 月から 4 月の 2 ヶ月間を考えると、

$$f^{(3,4)}(s_3) = (19y_3 - 17x_3) + (10,000 + 20(s_3 + x_3 - y_3)) = 3x_3 - y_3 + 20s_3 + 10,000 \quad (11.8)$$

$$0 \leq x_3 \leq 10,000 - s_3, \quad 0 \leq y_3 \leq s_3 + x_3 \quad (11.9)$$

最大値を求めると、 $x_3 = 10,000 - s_3, y_3 = 0, f^{(3,4)}(s_3) = 40,000 + 17s_3$ となる。同様に、2 月から 4 月、1 月から 4 月を求めると、

$$x_2 = 10,000 - s_2, \quad y_2 = 10,000, \quad f^{(2,4)}(s_2) = 50,000 + 18s_2 \quad (11.10)$$

$$x_1 = 10,000 - s_1, \quad y_1 = 0, \quad f^{(1,4)}(s_1) = 80,000 + 15s_1 \quad (11.11)$$

今、1 月初めの在庫は $s_1 = 0$ であるから、最大の利潤は 80,000 円、各月の仕入れ量と販売量、利潤は、

	1 月	2 月	3 月	4 月
仕入れ量	10,000	0	10,000	0
販売量	0	10,000	0	10,000
利潤	-150,000	190,000	-170,000	210,000

となる。毎月、倉庫一杯に仕入れて販売したときの利潤は $(17 - 15) \times 10,000 + (19 - 18) \times 10,000 + (19 - 17) \times 10,000 + (21 - 20) \times 10,000 = 60,000$ であるのとは比べると 33% 増となっていることがわかる。