

最適化

— ものごとを効率的に行うには —

宇野 毅明

(国立情報学研究所・情報学原理系・助教授)
(総合研究大学院大学)

2007年 2月14日 市民講座「8語で談じる情報学」第8回

簡単に自己紹介

名前: 宇野 毅明

年齢・職種: 36歳、助教授

研究分野: アルゴリズム理論

- コンピュータプログラムの設計手法の理論
- 速いコンピュータを作ったり、プログラミングの腕を競うのではなく、「設計方法の違いによる性能の向上」を目指す

最近の研究: ゲノム情報学やデータマイニングで出てくる巨大なデータベースの基礎的(とはいっても非常に時間のかかる)な解析を超高速で行うアルゴリズムの開発

日課: 子供と遊ぶこと

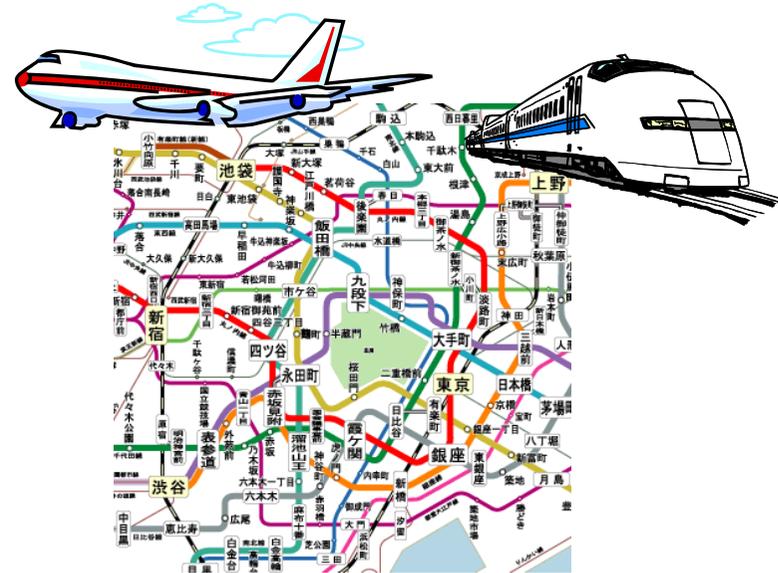
最適化とは

- 最適化とは「一番いいものを選ぶ」こと
- 「一番いいものを選ぶ」って、どういうことでしょうか？

今度、家を買おうと思う
どの家が一番いいかな？



明日大阪に出張だ
どうやって行くのがいいかな



他にも、いろいろな問題が考えられる

何が難しい

今度、家を買おうと思う
どの家が一番いいかな？



- **自分の要求がわからない**
(広い家がいい？
駅から近いのがいい？)
- **評価するのが難しい**
(すみ易さ, 安全, 雰囲気...)

明日大阪に出張だ
どうやって行くのがいいかな

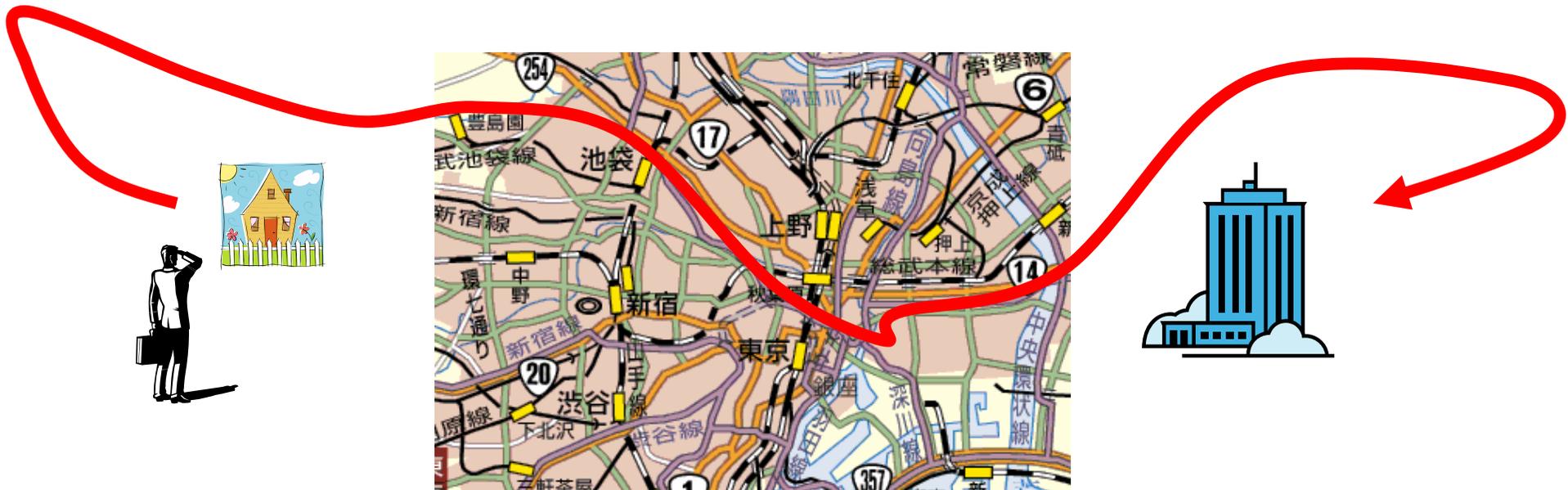


- **要求はわかる。評価も簡単**
(早く到着。安い)
- **選択肢が多いのが大変**
(どの道を通るか、どの交差点
を曲がるか...)

たくさんの選択肢からいかにいいものを選ぶか、が最適化

速いルートを探す

- 目的地まで一番近い(速い)道を探そう
 - ➔ 道の通り方はたくさんある。どの通り方がいい？



- ゴールの方角だけ見ればいい、というわけではない
- 全ての経路をチェックしないとわからない？

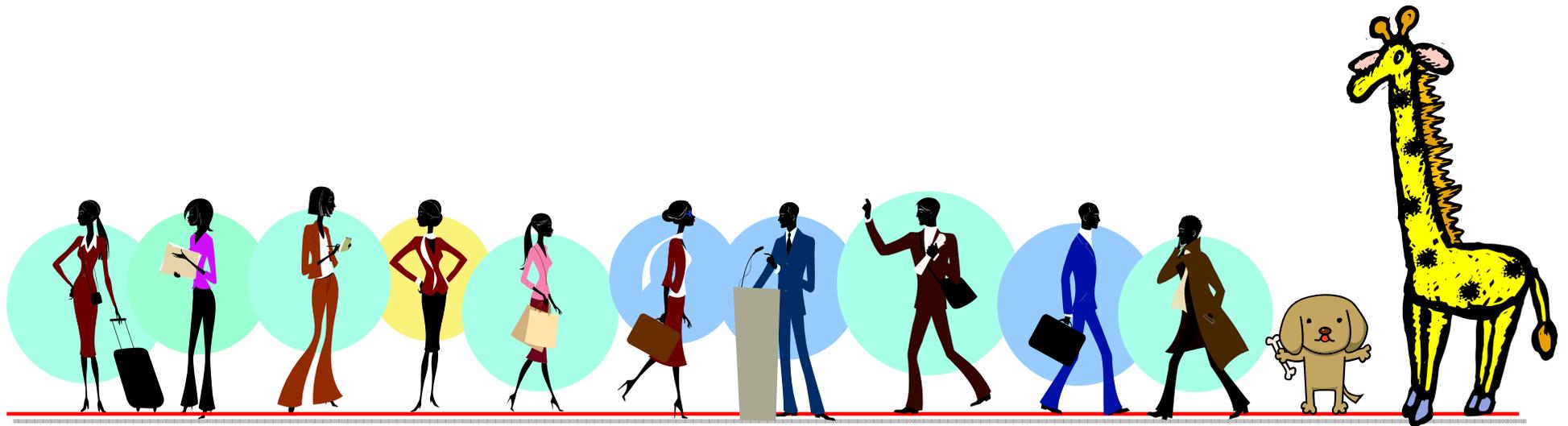
数多くの選択肢の中からベストを見つける、というのが難しい

データは手の中にあるが...

- 他の、選択肢の多い問題として、こんなものを考える

「世界で一番背が高い人を選ぶ」

選択肢(候補)がとてつもなく多くて大変だ



- しかし、この問題は先ほどとは本質的に違う
- この問題は「データを手に入れる」作業が大変なのだが、ルート検索は、道の長さは計算できる

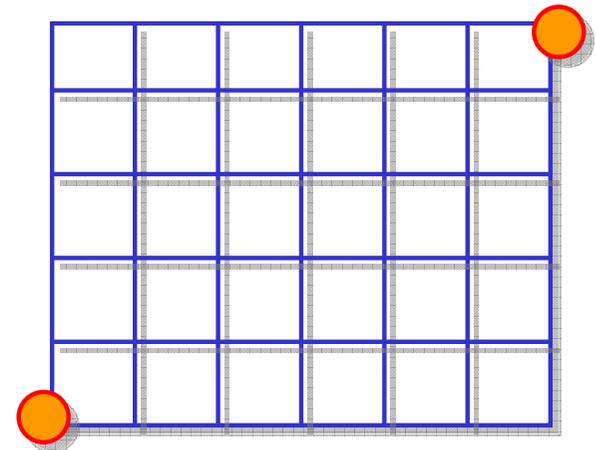
コンピュータなら

- 「時間はデータから計算できるし、カーナビはすぐ答えを見つけるんだから、コンピュータなら全部調べたって、すぐなんじゃない？」
 - ➔ そんなことはないです

- コンピュータの計算は1秒に1億回程度
- ルートの数は、爆発的に、指数的に増える
 - ← 20×20 の碁盤の目でも、ルートの数は1000億をゆうに超える



工夫しないと何もできない



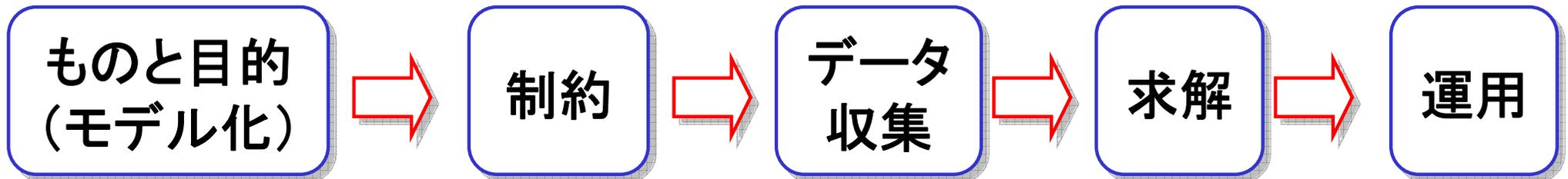
最適化とは

- 物の組合せの中から最も良いものを見つける問題、あるいは、「決めるもの(変数)の値をうまく調整して、状態を最も良くする問題」を最適化問題という
- 「現実の問題をどうやって最適化問題にするか」(モデル化)
「最適化問題をどうやって短時間で解くか」(解法・アルゴリズム)
という2つの難しさがある
- 「どのように最適化問題にするか」が最適化モデルの研究
- 「どのようにして短時間で解くか」が計算・アルゴリズムの研究
- 「どのような性質を持つか」が数理の研究

モデルと計算、それぞれを
いくつかの問題を例題として、見て行きましょう

最適化を使うには

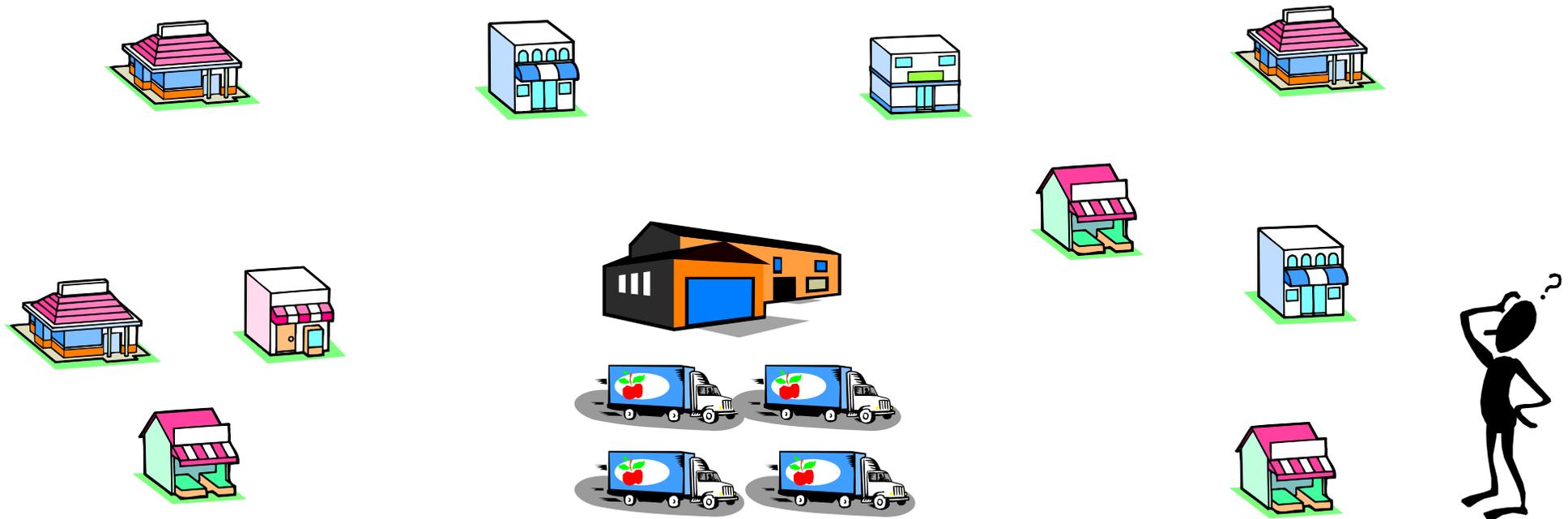
- 実際に最適化を使うには、どのようにするか？
- まず、求めるものと目的を決める（**問題発見**）
 - ➔ 何をを見つけるか、何が良いのかがわかる
- 条件・制約を考える ➔ 何ができるかわかる（**モデル化**）
- データを集める
- 最適化して解を求める（**解法 & 求解**、後で解説）
- 実際に使う（**運用**）



配送計画

配送計画(目的)

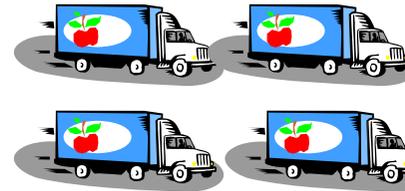
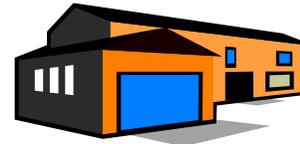
- 宅急便の集配所から、トラックでお客に荷物を配送する
- このコストを下げたい



配送計画(手段と見つけるもの)

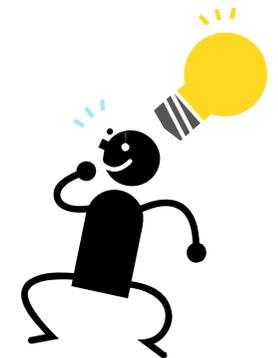
- コストを下げるには何をすればいいだろう？

- 従業員の給料を下げる。
- (コストのかかる)注文を断る
- 安い車・ガソリンを使う
- 配送拠点を変更



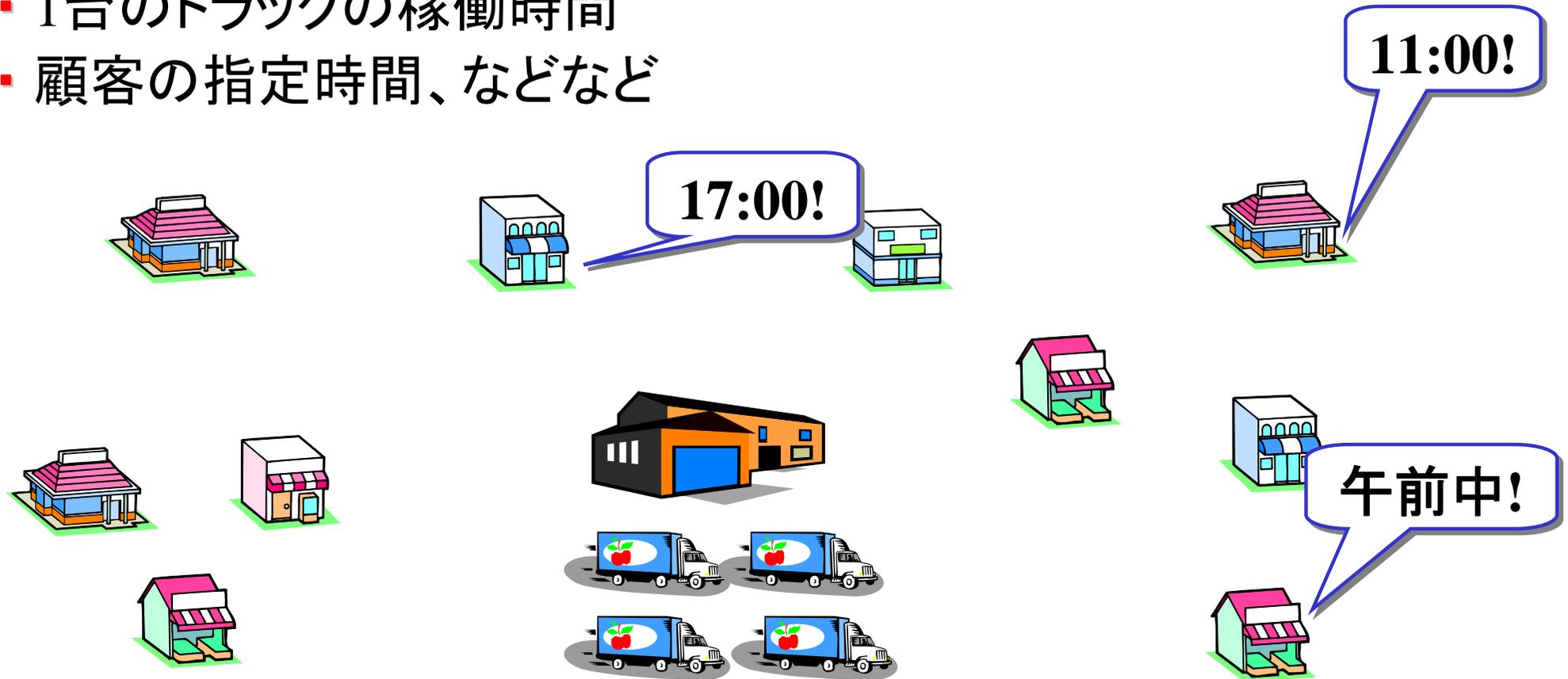
- 配送ルートを工夫

- 各顧客に行く順番を変えると走行距離が変わるので、
時間・ガソリンのコストが変わる
- ➔ 1台のトラックでより多くの配達ができるかも
- ➔ 他の人の分も配達できるかも
- ➔ 台数・人員を減らせるかもしれない



配送計画(制約)

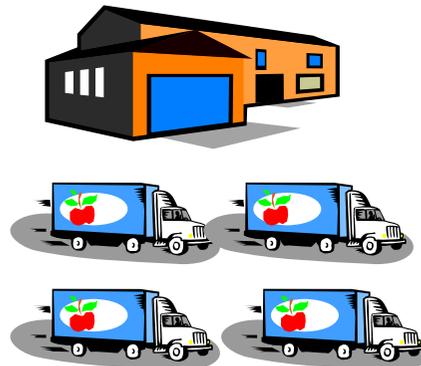
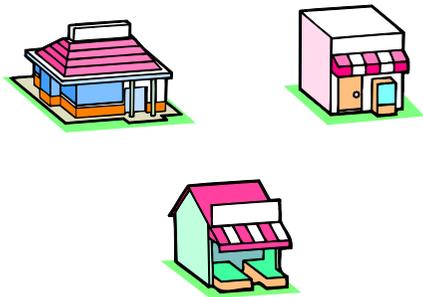
- 客から客への移動距離は直線距離で概算(またはナビで計算)
- 最大積載量(荷物の詰めこみには上限がある)
- 1台のトラックの稼働時間
- 顧客の指定時間、などなど



見つけるもの・目的・条件が整理できた
実際に解くにはどうしたらいいだろう？

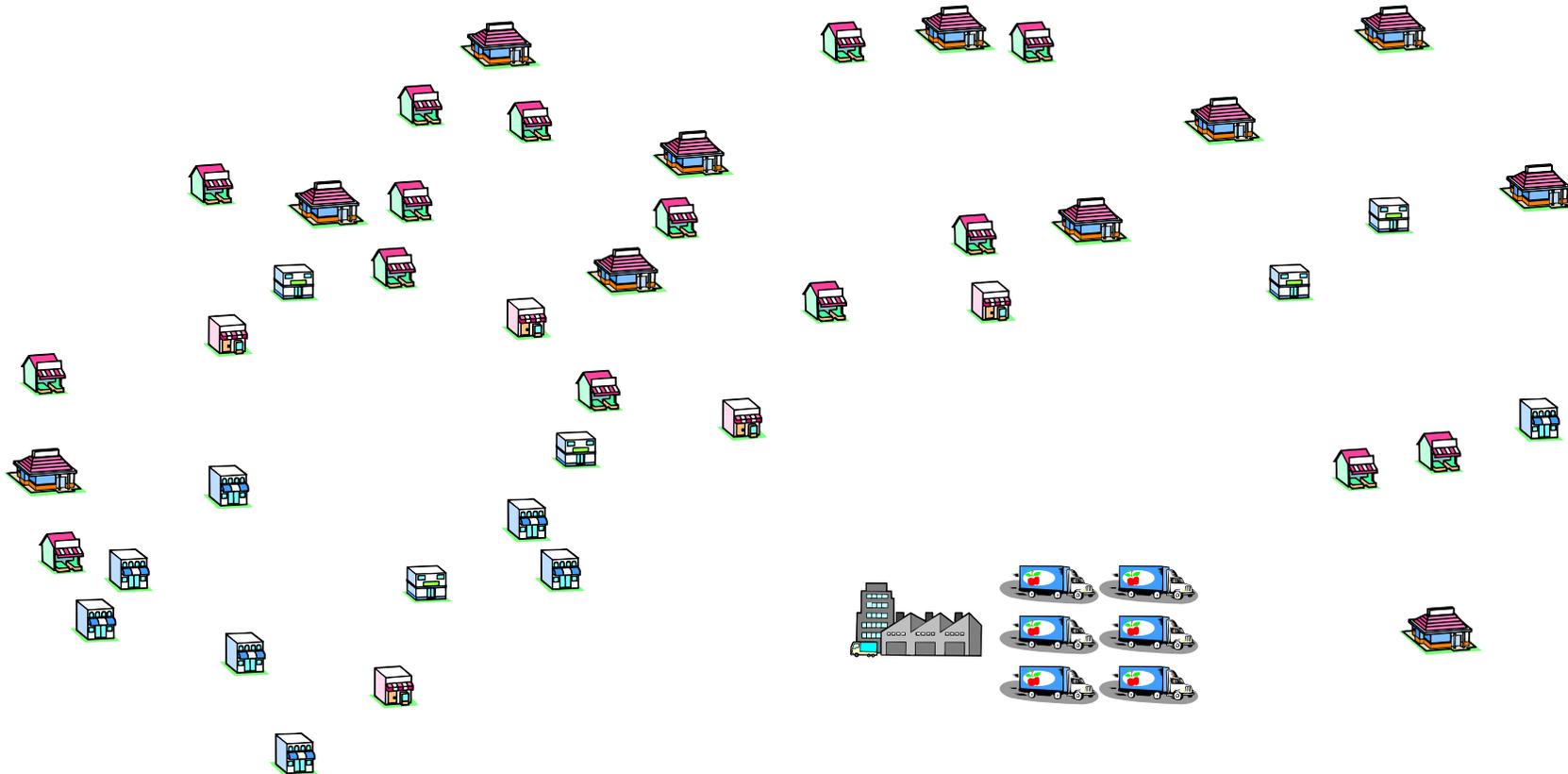
配送計画を解く: 難しさと要求

- ルートの候補は非常に多い
(2点間の最短経路がわかるだけではだめ。順番がわからないといけない)
- 1台のトラックが20軒の配達をするルートは、
 $20! = 243,2902,0081,7664,0000$ 通り
- 最短経路を見つけるときのような、良い構造はまだ知られていない
- 誤差が多いので、それほど厳密でなくて良い
- 毎日毎朝解きたいので、速く解けてほしい



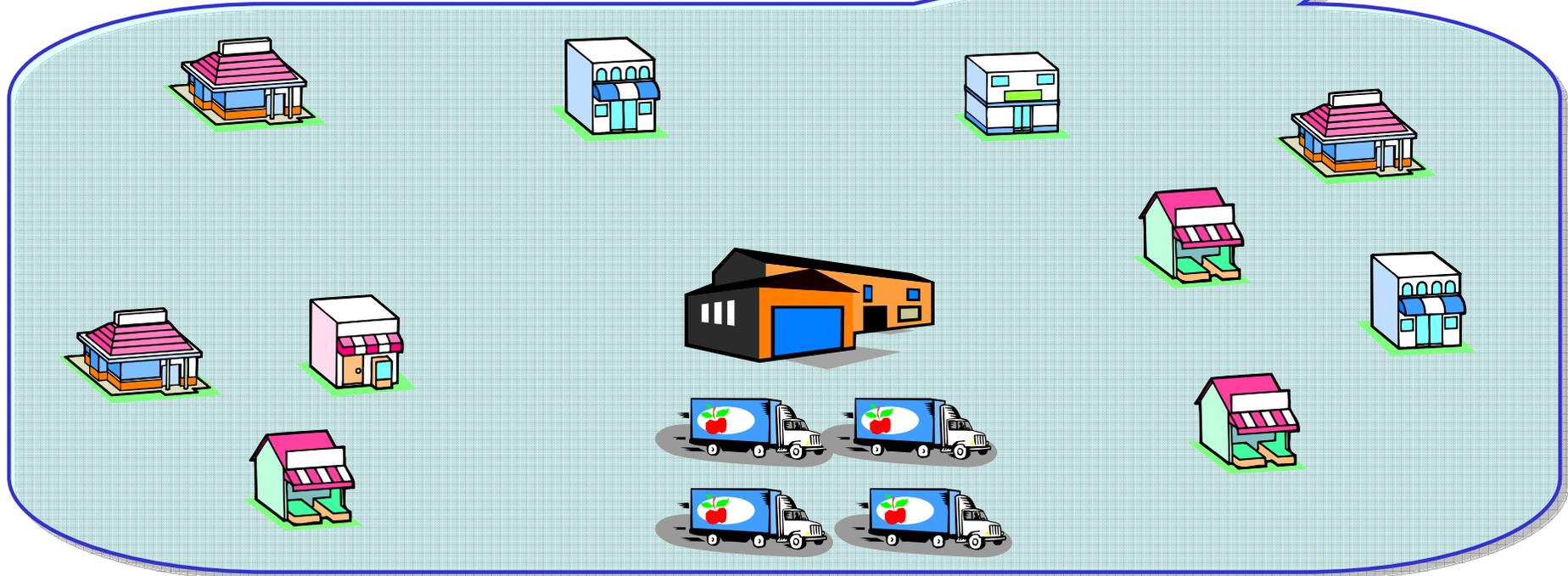
お客が沢山いると難しい

- 小さい問題は人手で簡単に解けるが、客が増えると、とりあえずのルートを見つけるだけでも大きな手間がかかる



人間の作業を真似る

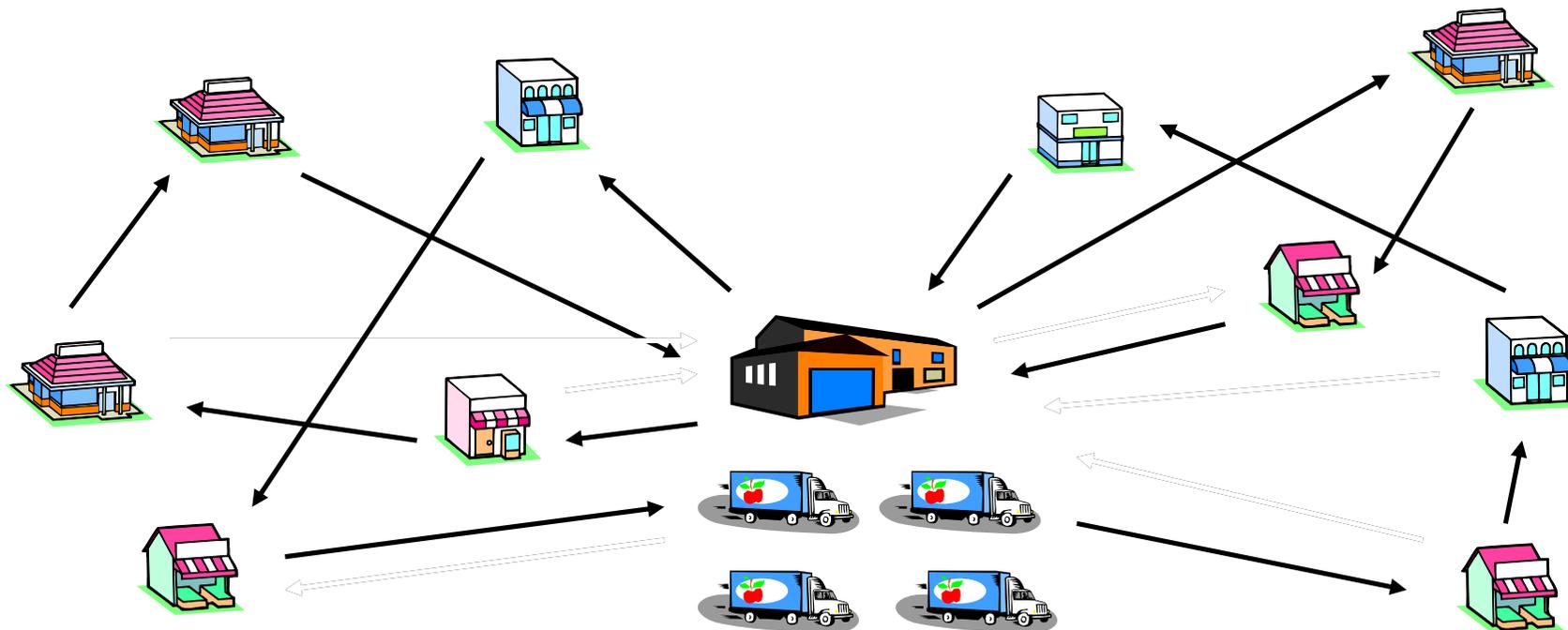
- 人間がこういった問題を解くときは、トライ＆エラーを繰り返す
 - ➔ 近いものから順に選んでみたり、
 - ➔ 1つずつ追加してみたり、
 - ➔ うまく行かない部分をちょこちょこ変更してみたり
- 人間は、じっくりやれば、かなり品質の高い解を得る
- このような操作をコンピュータにやらせてみよう



セービング法

- 最初、すべてのトラックのルート为空にする
- 顧客を1つずつ、どこかのルートに挿入する

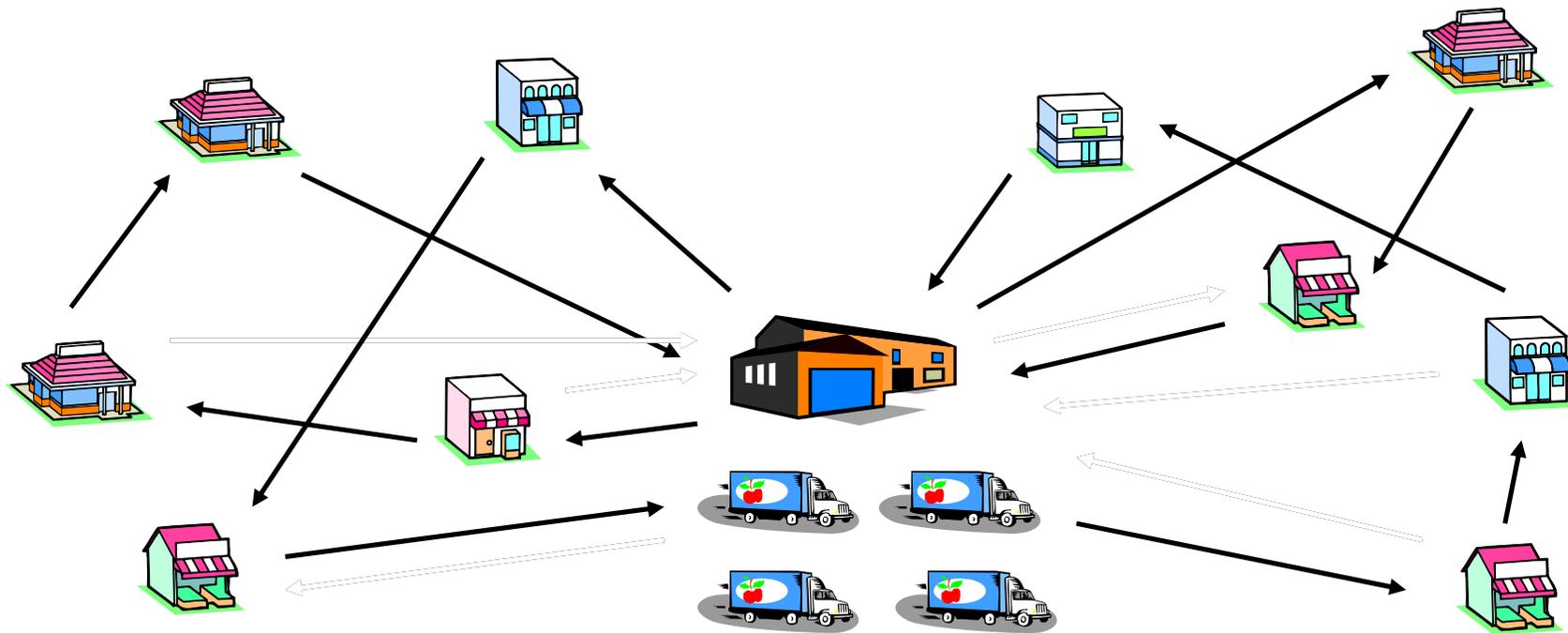
ただし、最大積載量や労働時間の制約を破らず、最も移動距離が増えない場所に挿入する



平均的に、最も良い解からの誤差が、10-20%くらいになる

セービング法の計算時間

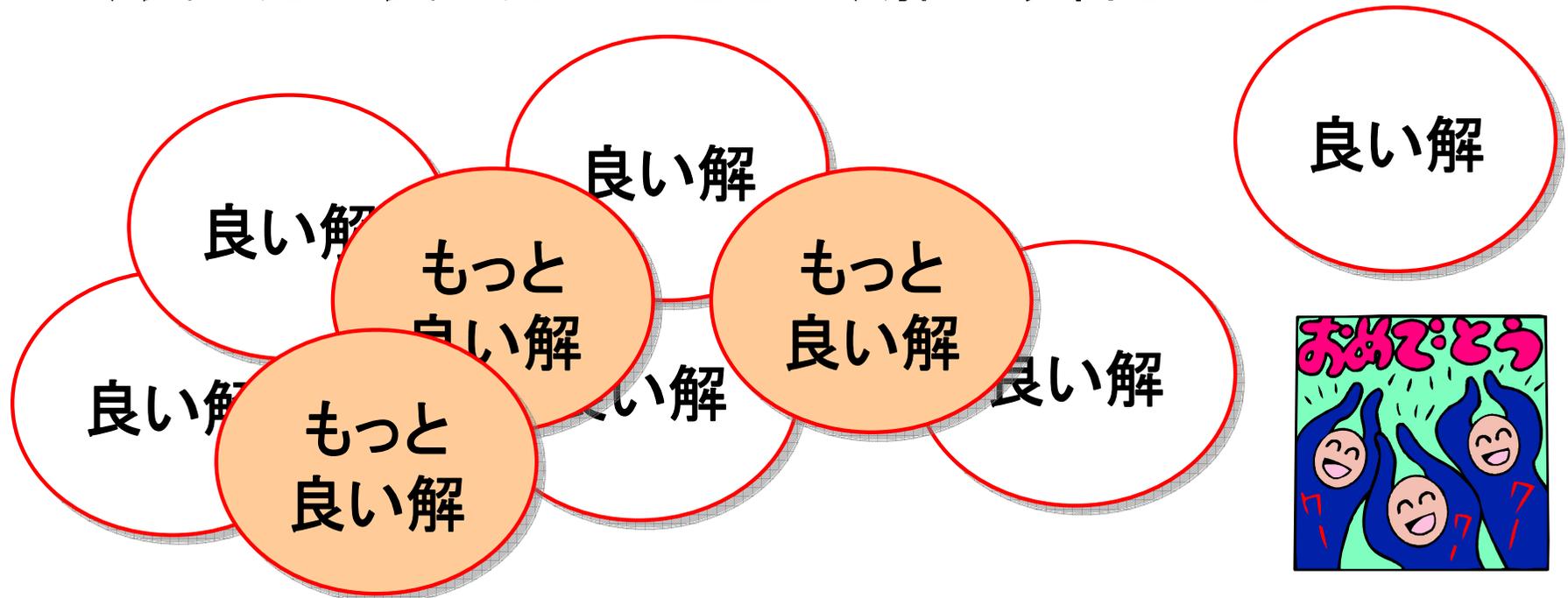
- セービング法は、お客を一人ずつ挿入する
- k 番目の客を入れる場所は、高々 $2k$ 通り
- 調べる候補は、全部で高々 $2+4+\dots+2n \doteq n^2$ 個



お客が1万人でも候補は 1億個、これなら解ける

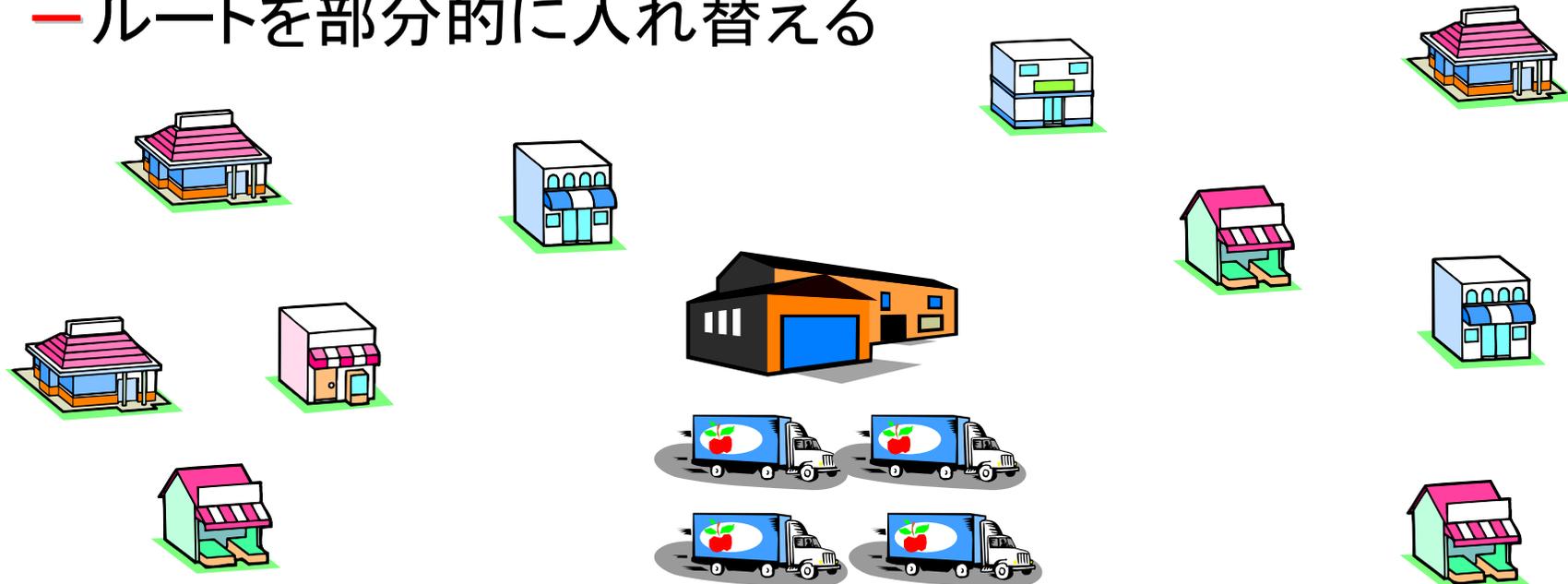
どうしてうまくいくのか？

- 「距離」「荷物の重さ」「労働時間」、これら全て、局所的な変化が全体に影響しない
- そのため、配送計画は「良い解は良い部分構造を持つ」「良い解のそばには、より良い解がある」という性質を持つ
- そのため、良い方へ良い方へと進むと、解が改善される

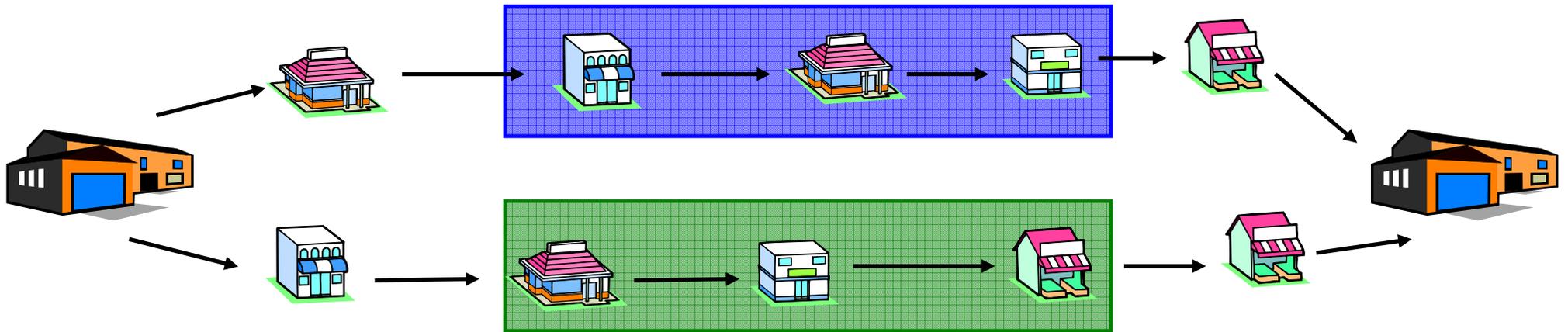


解の改善

- 人間は「うまくいっていない場所」を見つけて、改善する
この作業をコンピュータにやらせてみよう
- うまくない場所を見分けるのは大変なので、全部の場所をちょこちょこ変えて改良することにする
 - ➔ 試してみて、今よりよくなったら採用する
- 「ちょこちょこ変える」の部分は、変更のルールを作ろう
 - ー ルートから1つ抜いて他の部分に挿入
 - ー ルートを部分的に入れ替える



入れ替えの例

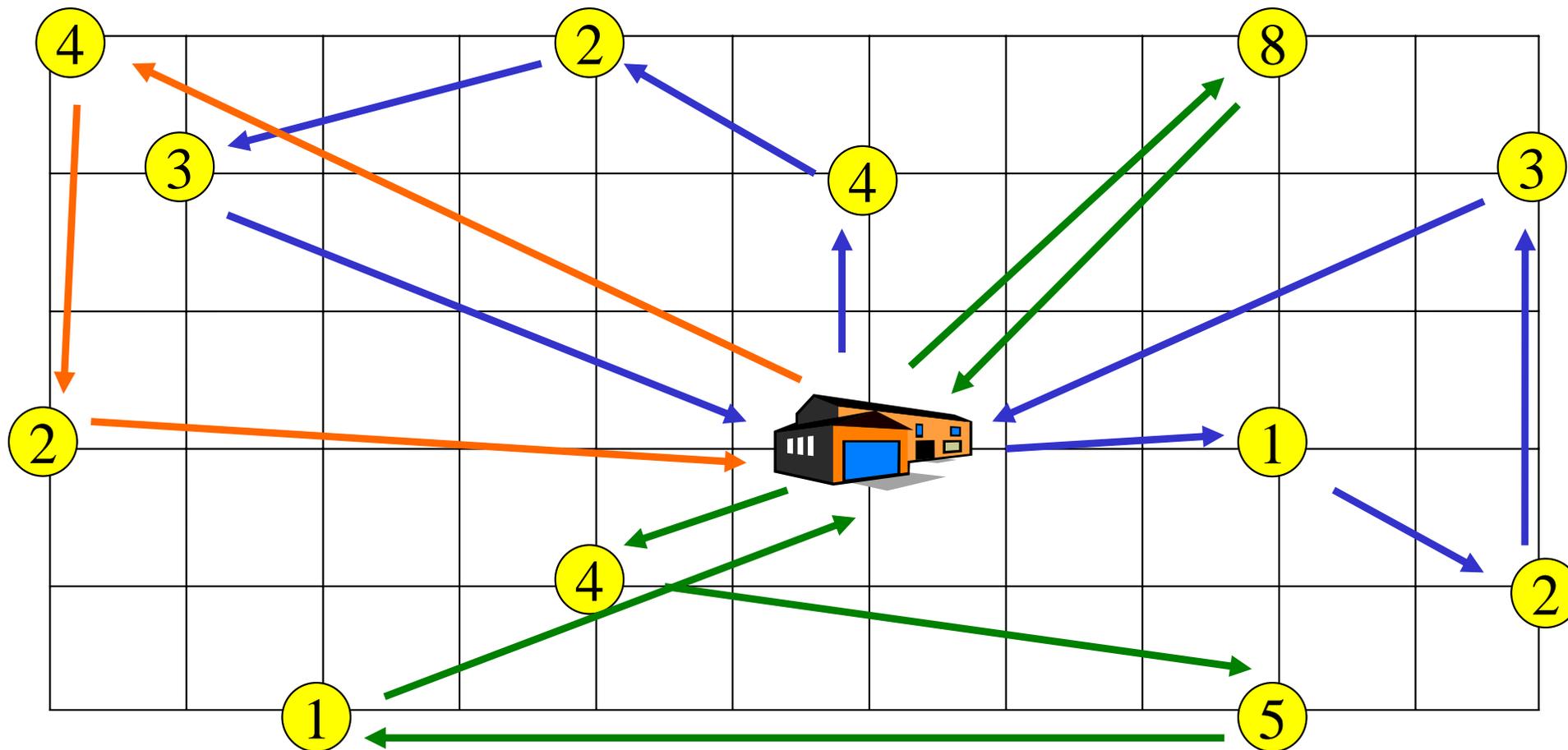


- 2つのルートから部分ルートを1つずつ選び、その部分を交換
 - ① ちょこちょこ変更してみて、改善されたら採用する
 - ② 変更してもいい解が得られなくなったら終了という仕組みだけでも、かなり良い解が得られる

到着時間の制約がなければ、誤差10%くらいに落ち着くそう

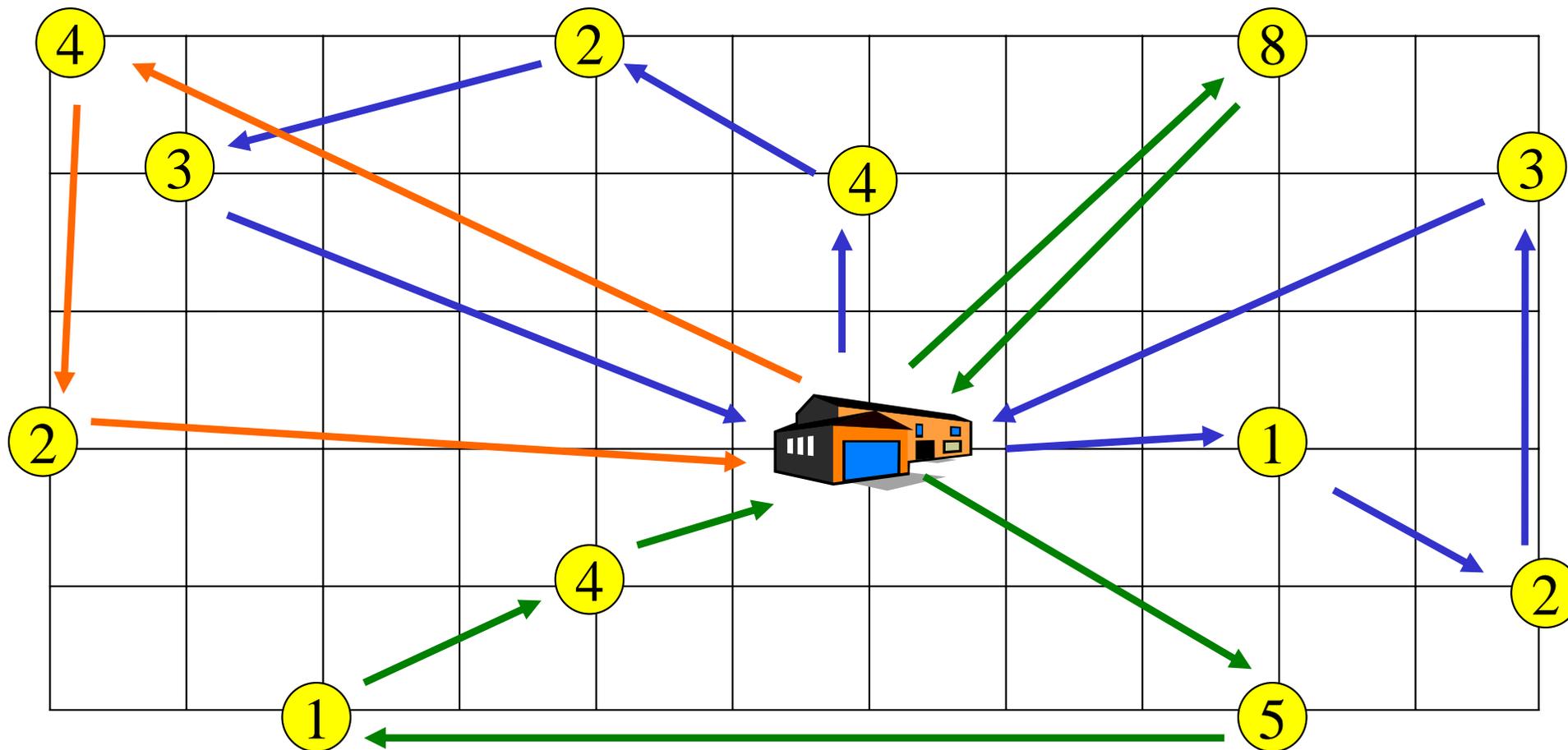
ちょこちょこ、の例題

- 距離は縦横に移動した数、最大積載量は10、最大移動距離は 20



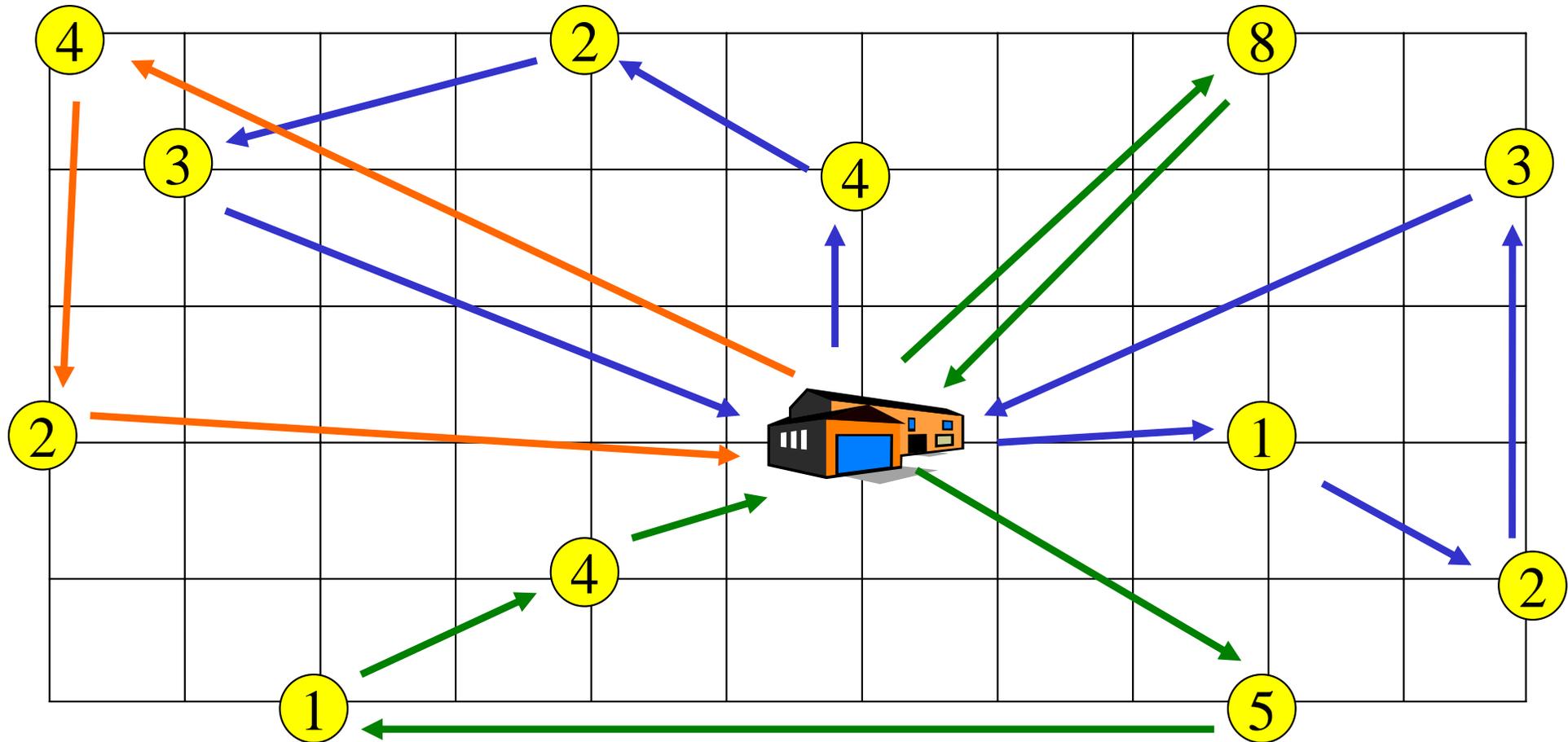
ちょこちょこ、の例題

- 距離は縦横に移動した数、最大積載量は10、最大移動距離は 20



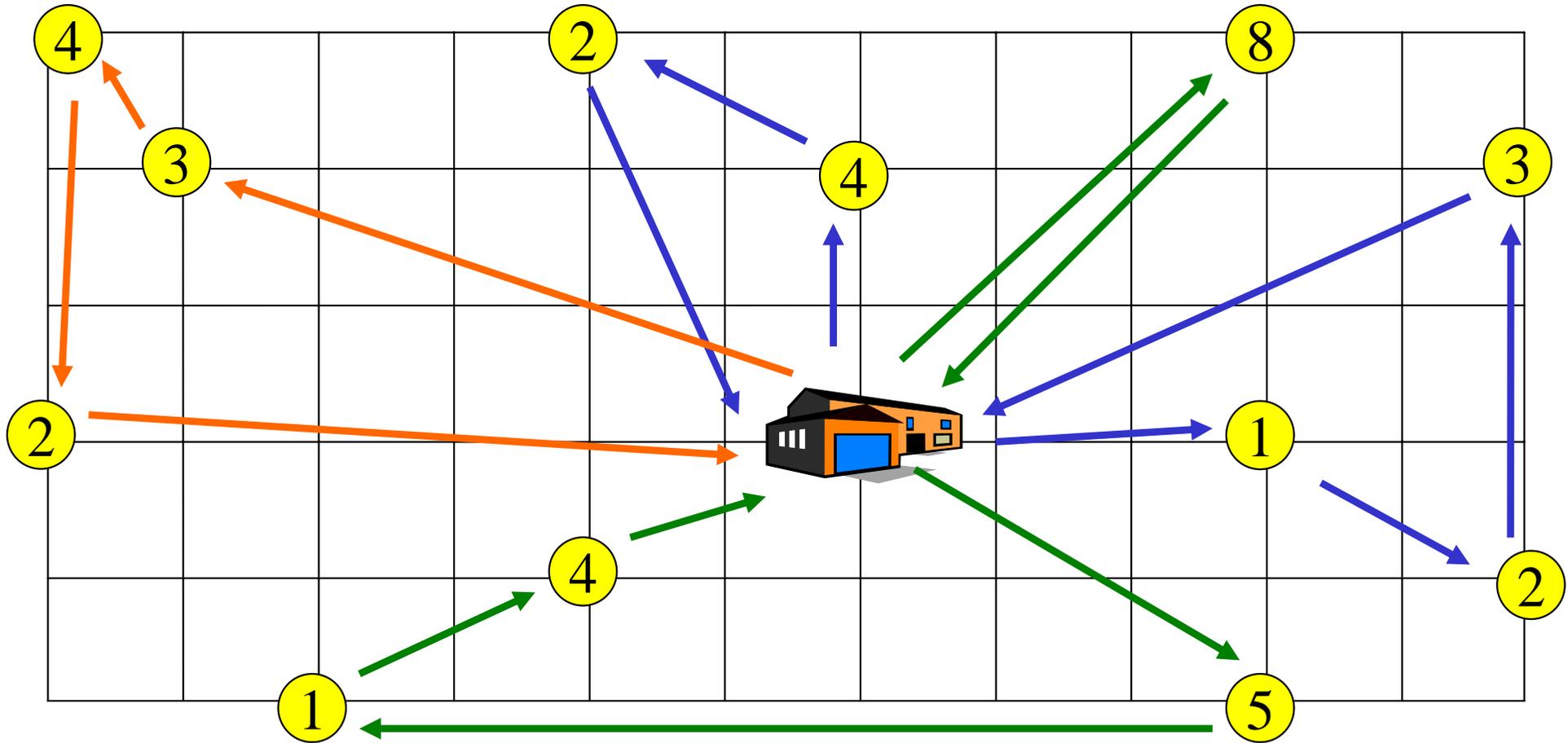
ちょこちょこ、の例題

- 距離は縦横に移動した数、最大積載量は10、最大移動距離は 20



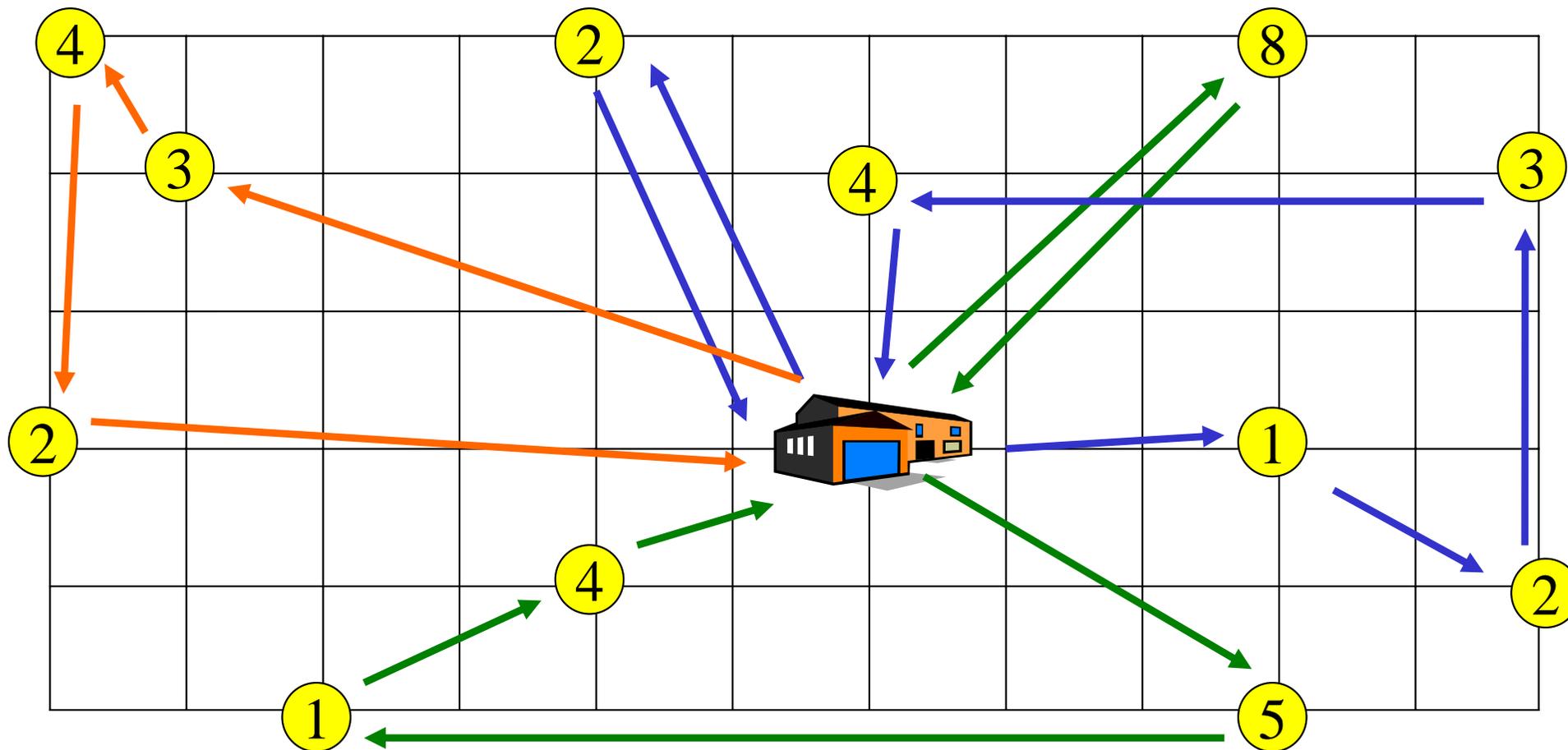
ちょこちょこ、の例題

- 距離は縦横に移動した数、最大積載量は10、最大移動距離は 20



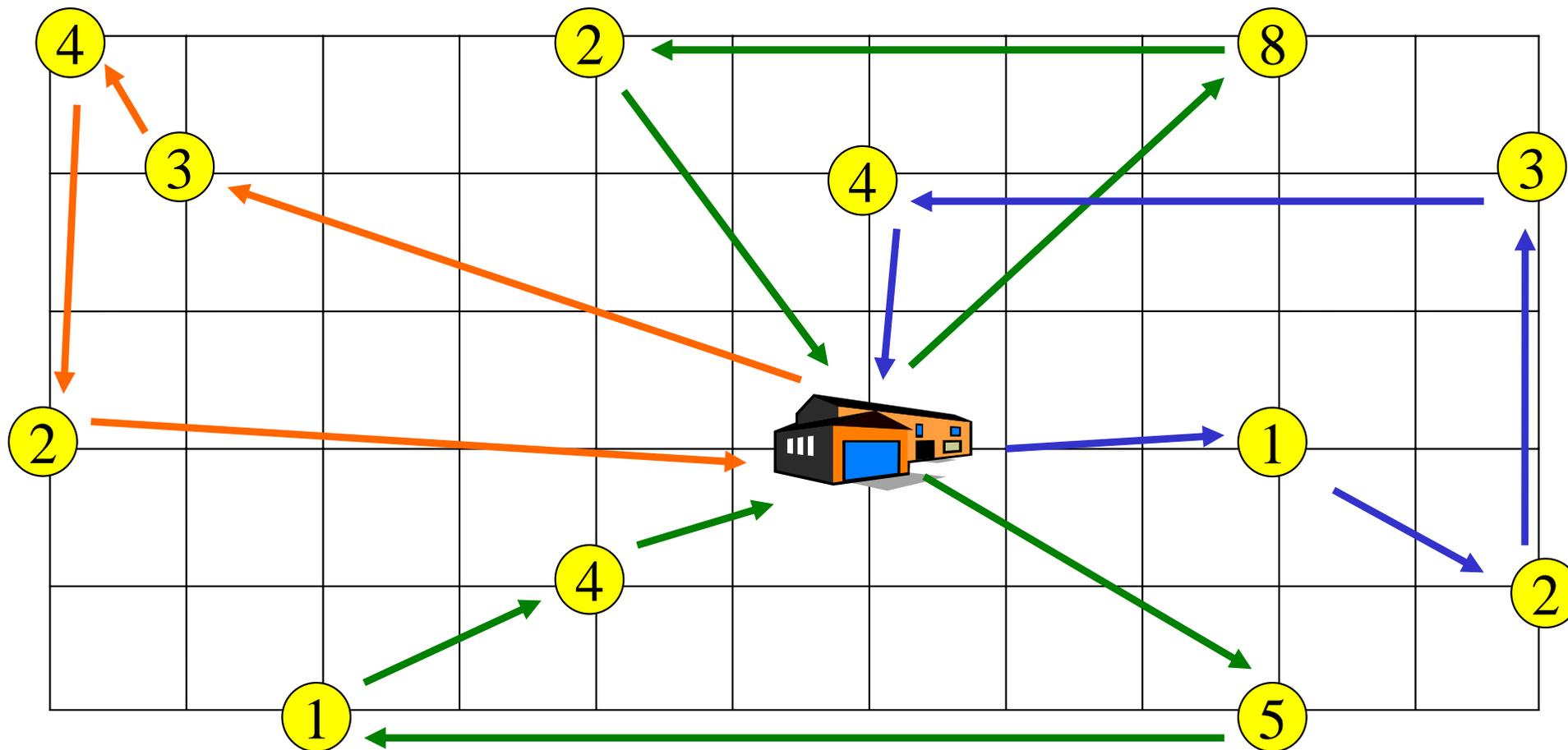
ちょこちょこ、の例題

- 距離は縦横に移動した数、最大積載量は10、最大移動距離は 20



ちょこちょこ、の例題

- 距離は縦横に移動した数、最大積載量は10、最大移動距離は 20

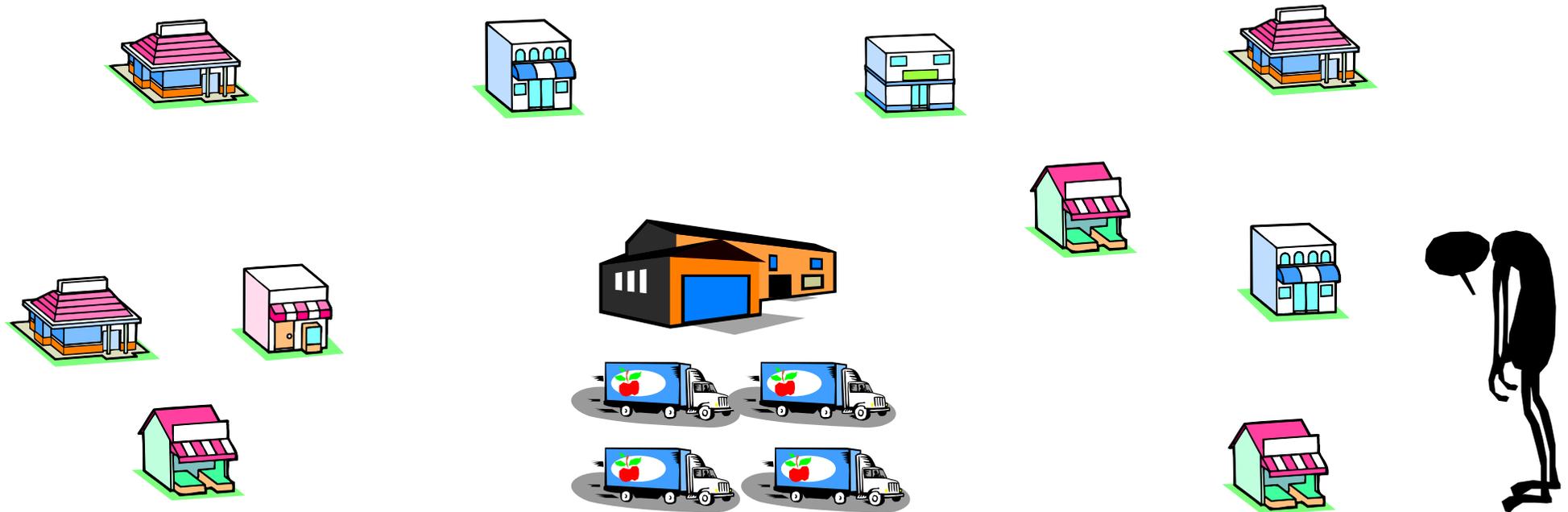


候補の数

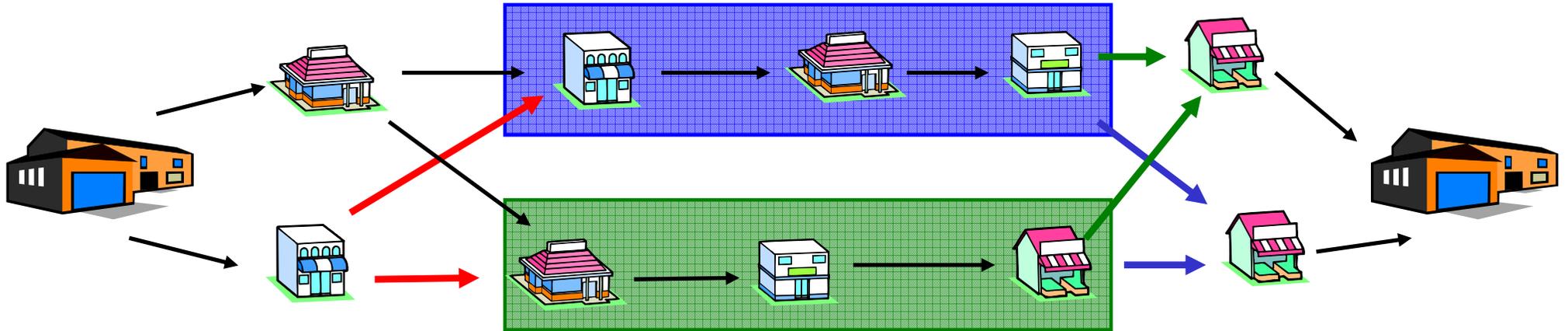
・候補の数 \equiv (客の数)² (ルート長さ)²

- お客が100人、1ルート10人配送、と思うと 100万程度
- お客が1000人、1ルート30人配送、と思うと 10億程度

→ 何回も改善しては、とても短時間で解けない



候補の絞込み



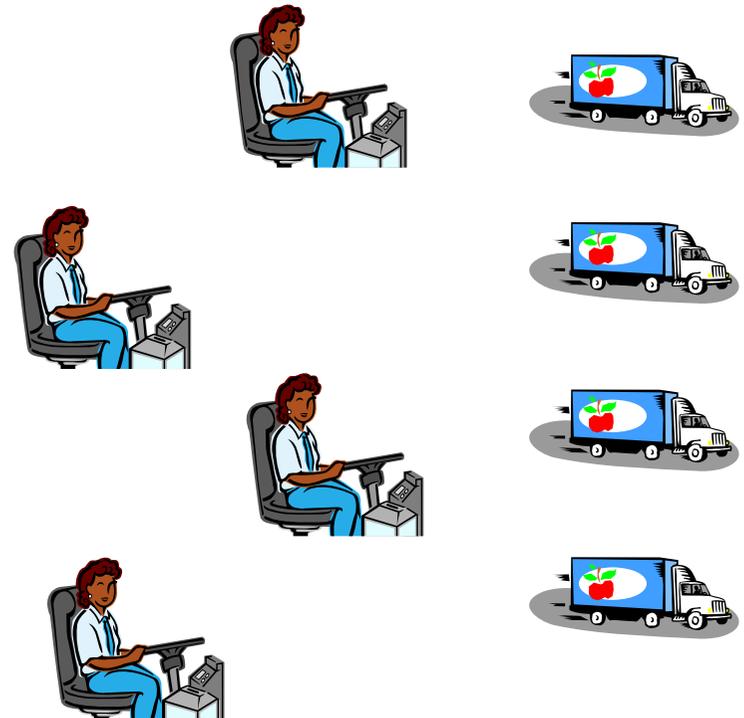
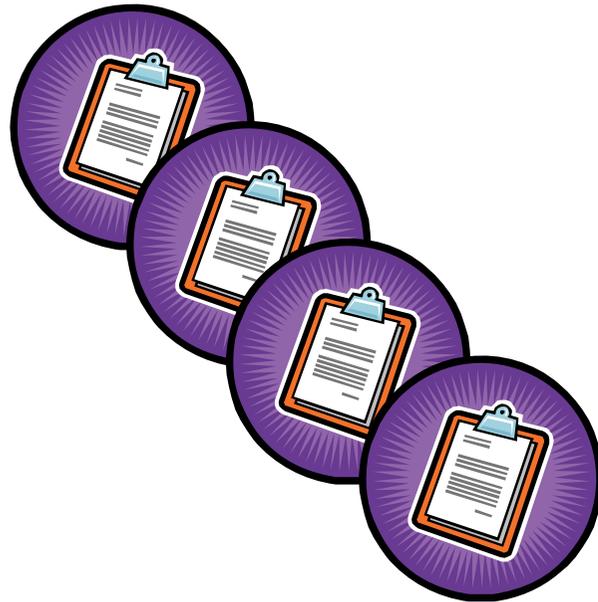
- 部分ルートを入れ替えて、長さの合計が短くなるためには、少なくともどこかひとつの変化で改善がなければいけない
- 「つなぎかえると短くなる場所」のみ調べればいい



候補の数が大幅に減る (客の数×少々、くらい)

最適解の運用

- ナビゲーションシステムと同じように
「出てきたルートはまあまあいいが、実際には道の通りやすさなど
他の要素もあるので、少々変更したほうがよりよくなる」
➔ そのまま指示に従ってもよいし、参考にしても良い
- 各ドライバーが他人に影響を与えることなく、独立してルート変更できるので、運用しやすい



配送計画、まとめると

- 目的がコストなので、扱いやすい
- 決めるものは、ルートと配送先
- 制約も、数理的に表現しやすい → モデル化がうまく行く

- 局所的な変更が全体に影響を与えない
 - 良い解のそばに良い解がある
 - 近視眼的に改善すると、比較的良い解が得られる
(到着時間の制約が入ると、こう簡単にはいかないが、工夫するとうまくいく)

- 短時間で計算するためには、候補を絞込む必要がある
(改善の可能性のあるところだけ調べる)



最短路問題

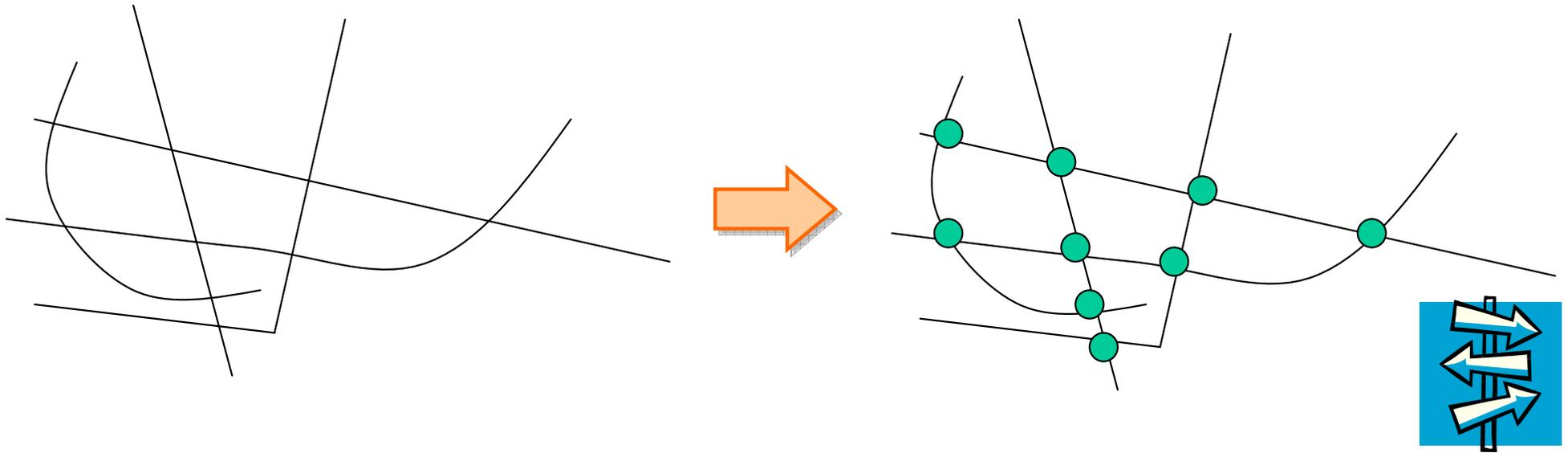
最短路問題

- 地図などのネットワークで、ある地点からある地点
(駅から駅)への最も短い(安い)経路を見つける問題
 - 最短のドライブルートが知りたい
 - 旅行先まで最も安く行く電車バスの乗り方が知りたい



何を見つける問題か？

- 電車の経路は、乗換駅を出せばわかる
- 地図などの幾何学的なデータも、道案内をする立場からは、交差点ごとにどちらに行くかを示せばいい
- 地図も交差点の隣接関係のみに注目して、抽象化できる
(交差点から交差点へ必ず進み、Uターンはしない)



つまり「交差点・乗換駅ごとに、どちらに行くべきかを定める」問題

最適化の問題としてまとめると

目的: 現在地から目的地へ向かう最短(最安)の経路



決めるもの: 交差点ごとに、どちらに進むか

制約: (高速道路・特急を使うか、値段はいくらまで、など)



解法: ボタンを押したらすぐに答えが出てほしい

(ダイクストラ法を使うとうまく解ける)



データの収集: 地図・路線図の電子的なデータを使う

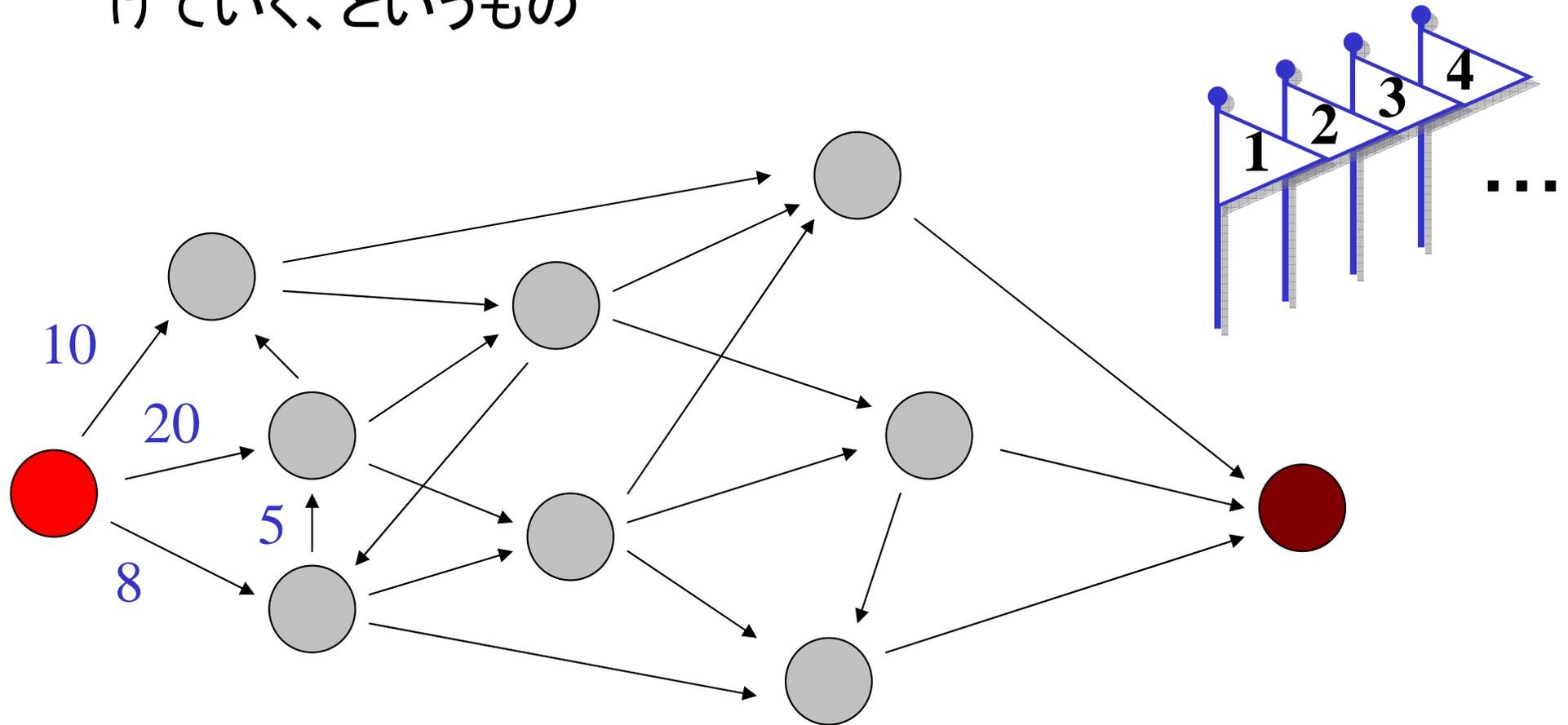
運用: 教えられた通りそのままは知ってもいいし、参考程度にしてもよい



ダイクストラ法がどのようなものか、見てみましょう

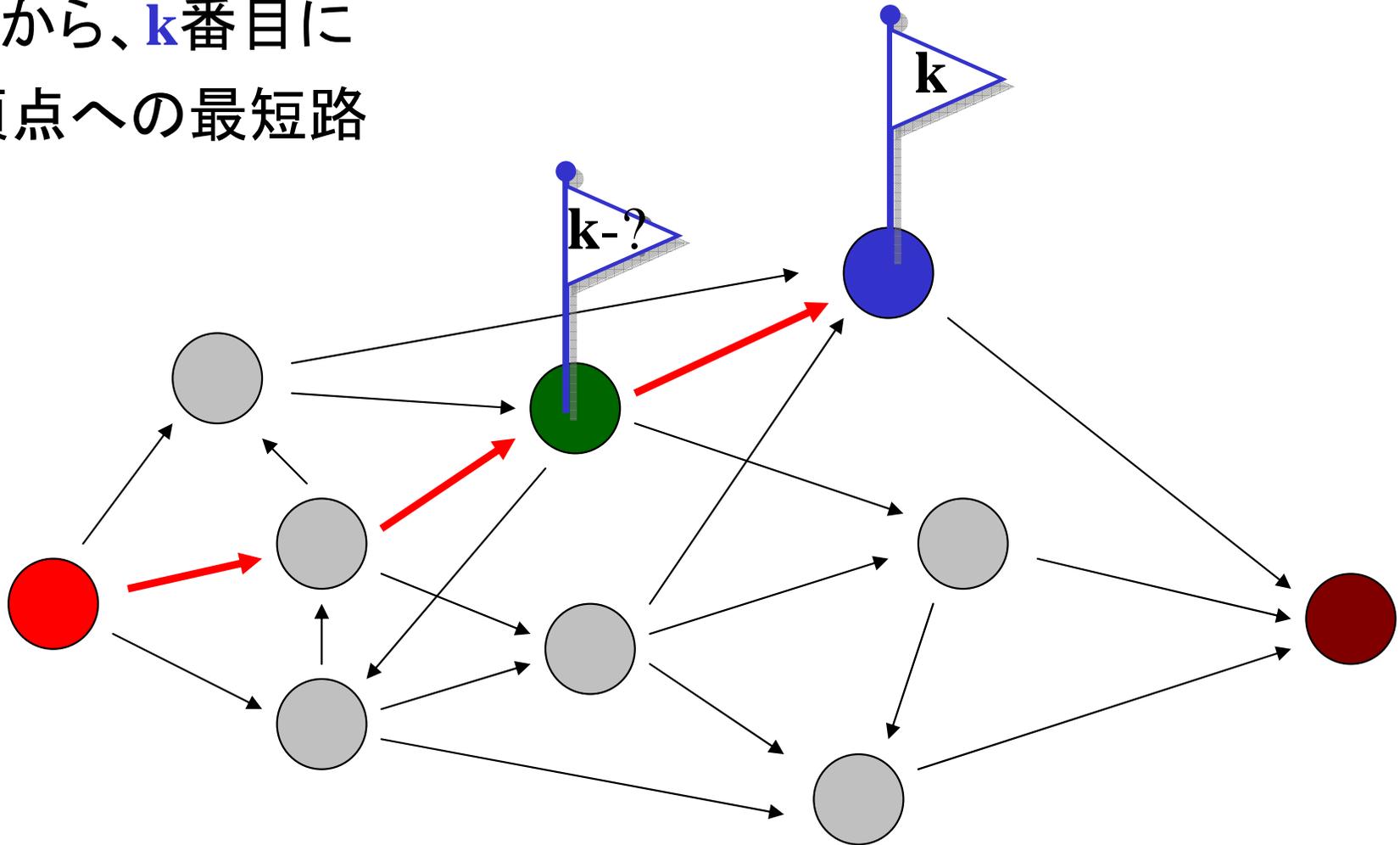
ダイクストラ法

- ダイクストラ法のアイデアはとても簡単
- 始点に一番近い頂点、2番目に近い頂点、と順番に見つけていく、というもの



ダイクストラ法で使う性質 (1)

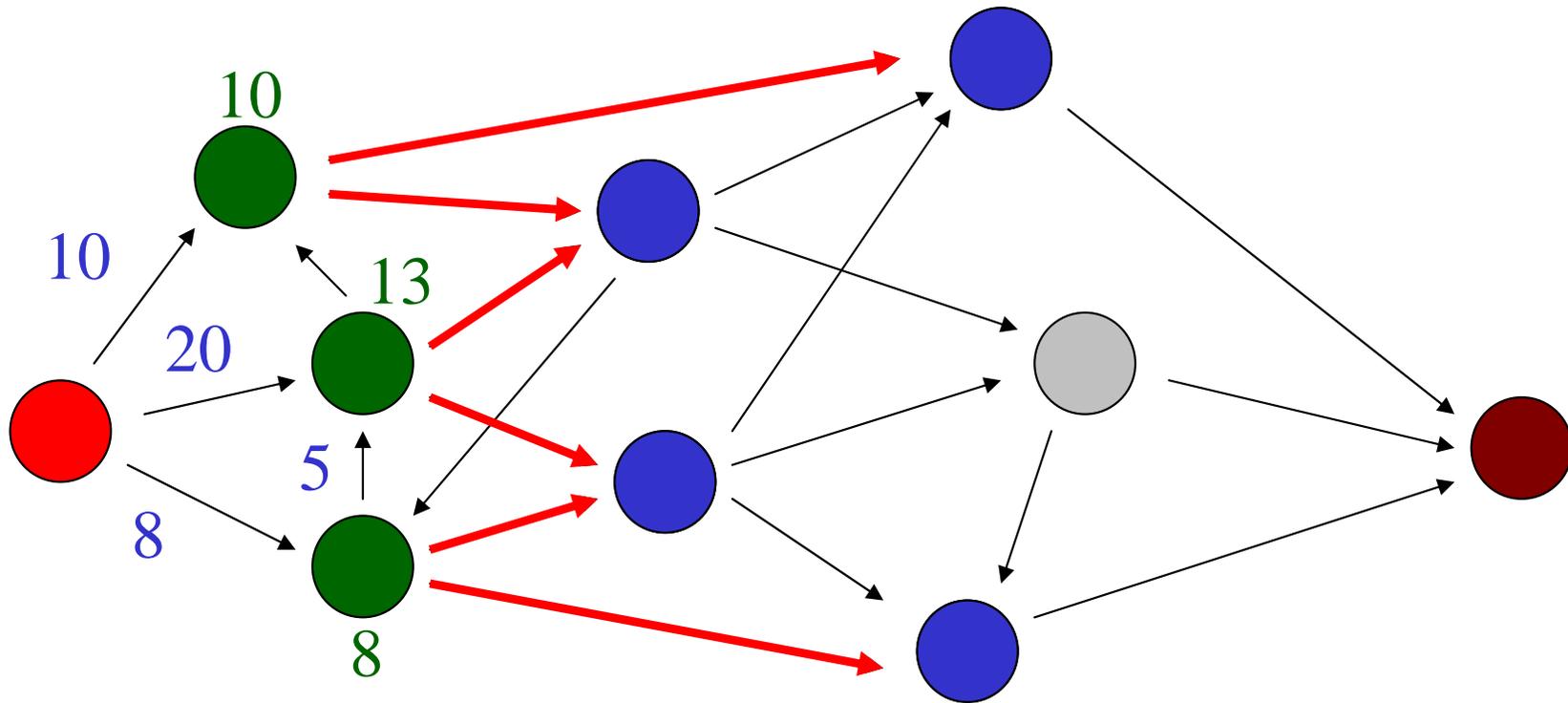
- 始点から、 k 番目に近い頂点への最短路



- 緑の頂点は、 $k-1$ 番目以下に近い

ダイクストラ法で使う性質 (2)

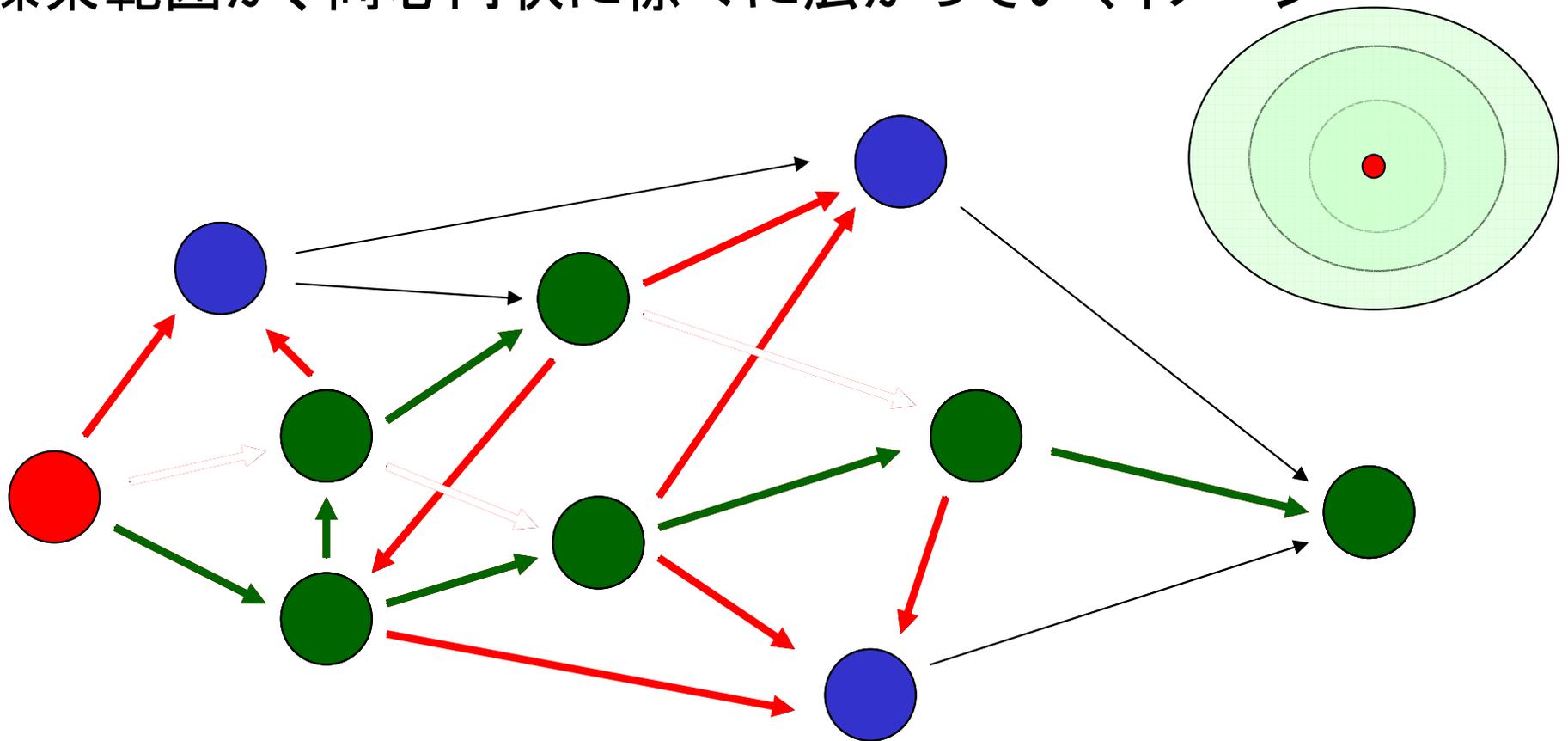
- 距離 $k-1$ 番目までの頂点・距離がわかっている
- 距離 k 番目の頂点はどこにあるでしょう？



青のどれか。赤線を使った経路の中で最短なものを見つける

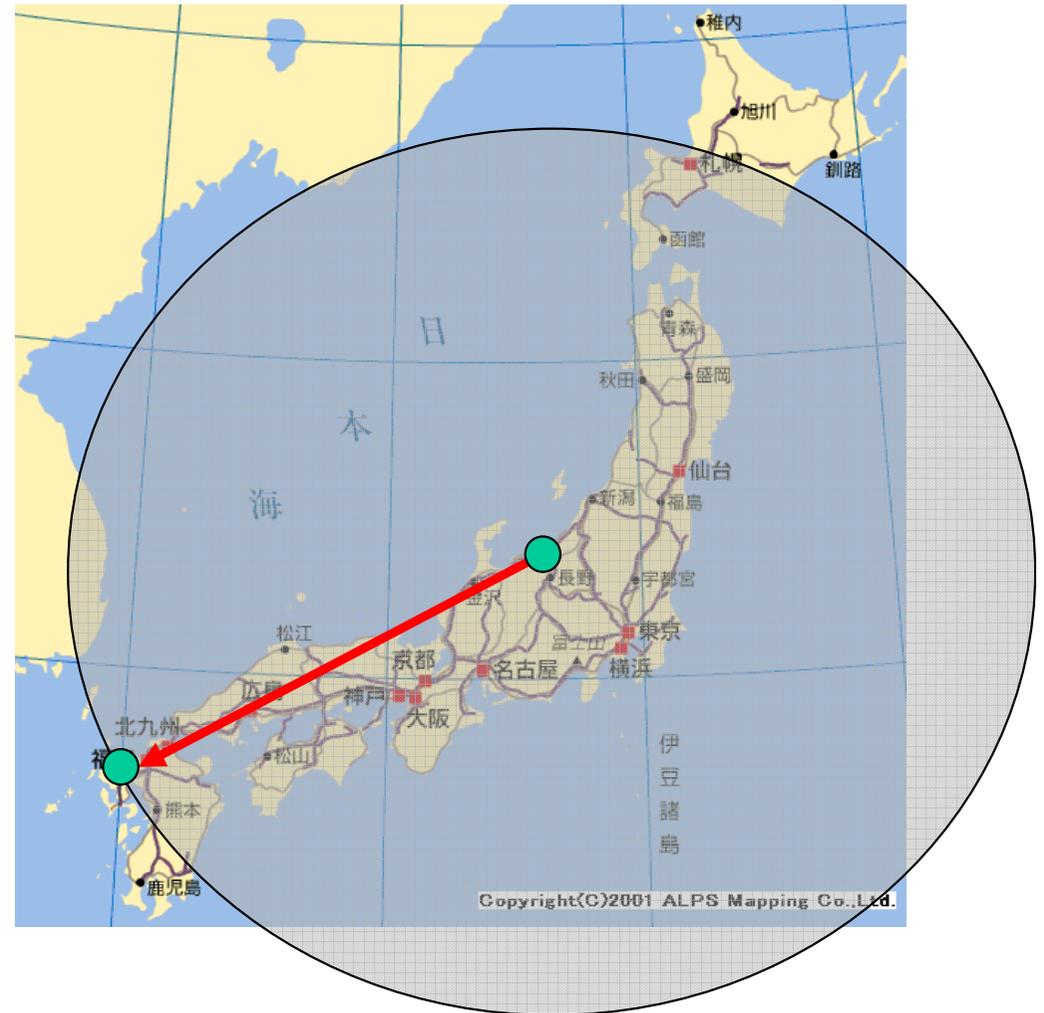
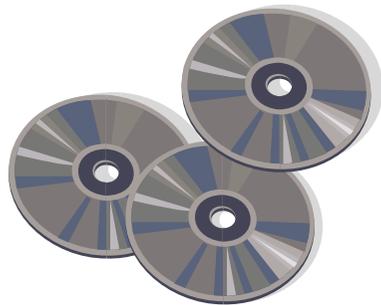
ダイクストラ法

- 以下同様に、始点が一番近い頂点、2番目に近い頂点、と順々に見つけていく
- 探索範囲が、同心円状に徐々に広がっていくイメージ



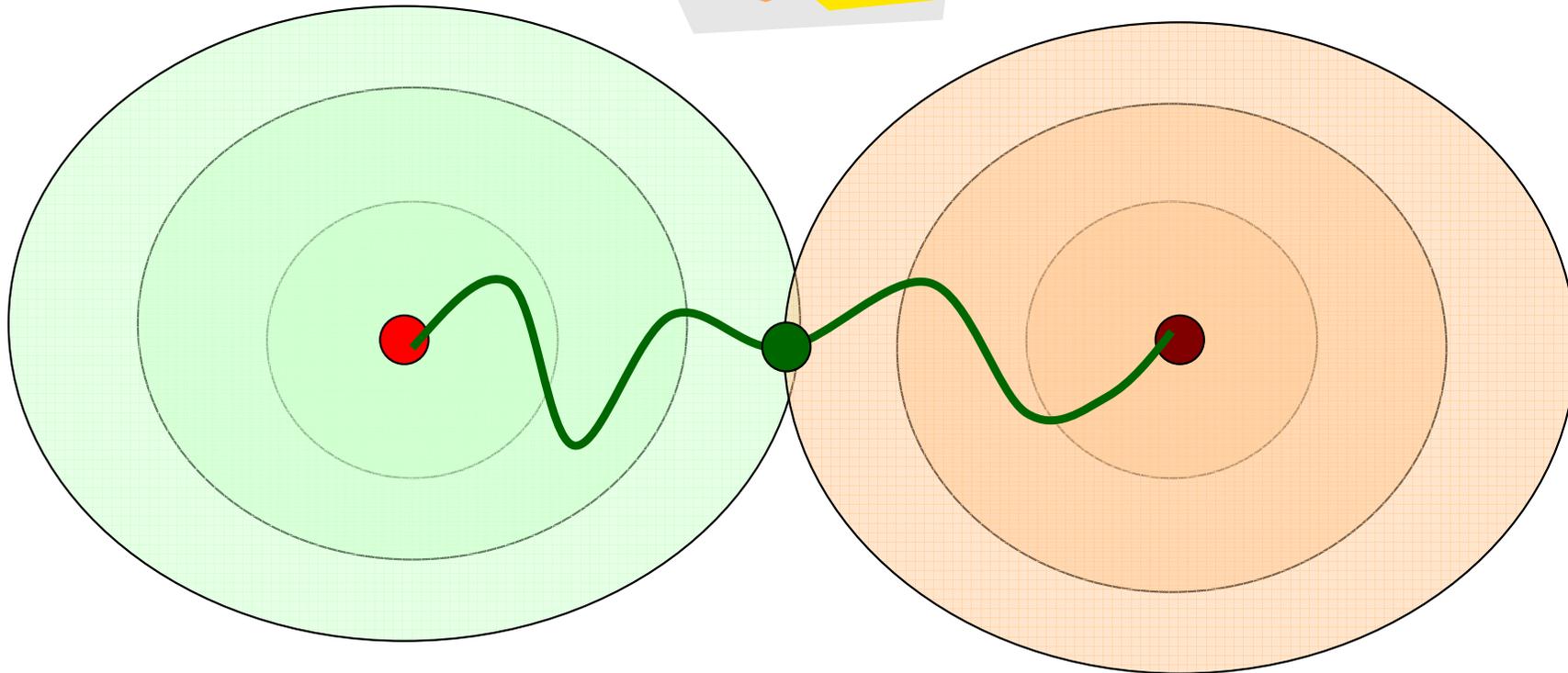
問題点

- ナビゲーションシステムで、
実際使う場合を考える
 - 離れたところへの最短経路
を求めると、非常にたくさん
のデータを読む
- ← ダイクストラ法は目的地より
近い所は、全て探索する



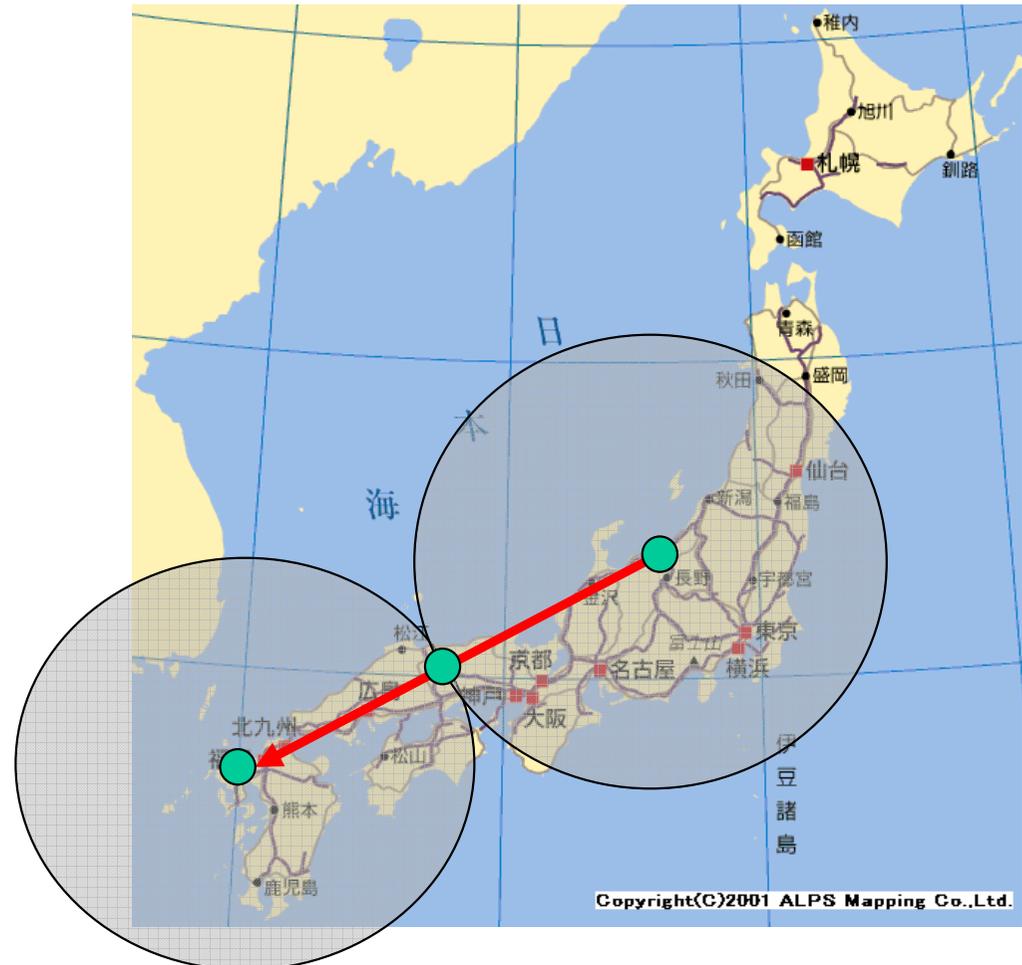
始点終点両方から探索

- 始点と終点、両方から同時にダイクストラ法を動かす
- 出会った所で最短路が得られる



少々改良

- 読み込む範囲が多少、少なくなる

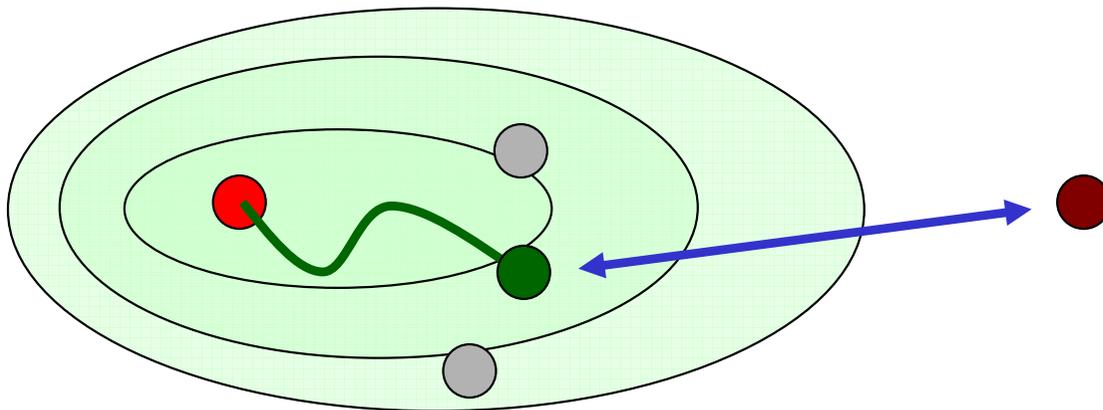


幾何学的な情報の利用

- ダイクストラ法は、問題の持つ幾何学的な情報をまったく利用していない
 - ← 普通、目的地から遠ざかる方向へは探索しない
 - 目的地に近いところから優先的に、探索の手を伸ばしていきたい
 - ダイクストラ法をベースにするには、出発点からの距離が短い順に探索をしたい
- 間を取って、
(始点からの距離) + (終点までの直線距離)
が小さい頂点から順に見つけていこう

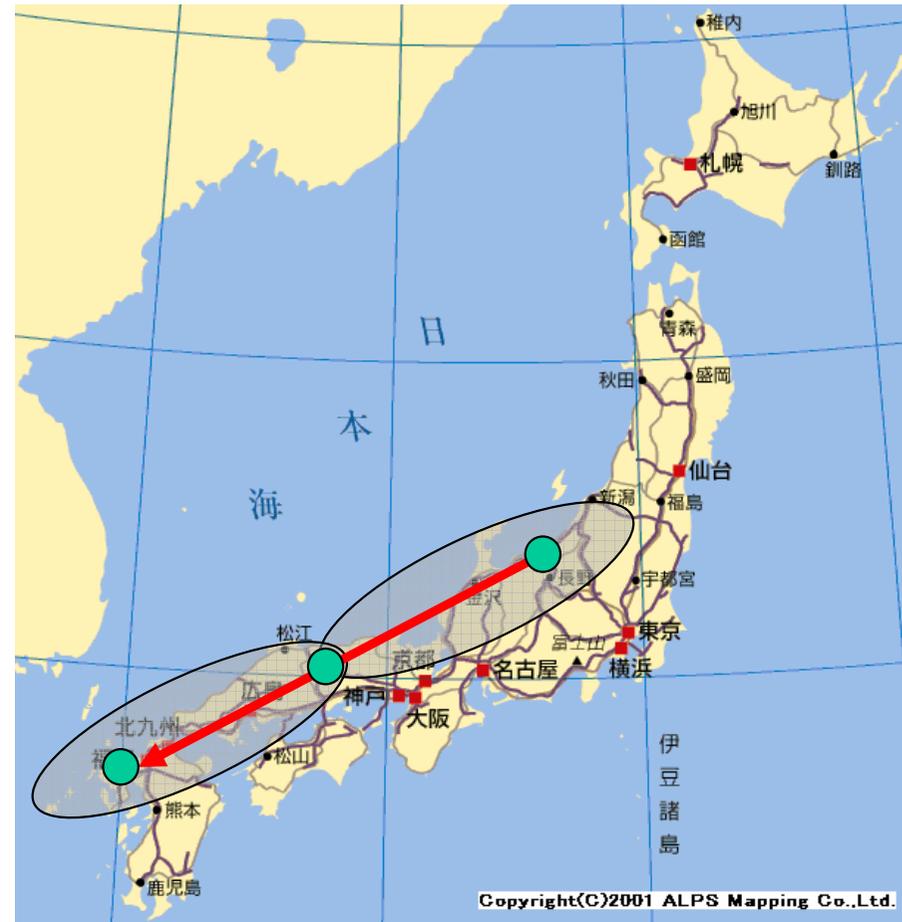
A*アルゴリズム

- (始点からの距離) + (終点までの直線距離)
が小さい頂点から順に見つけていこう
(探索範囲が、目的地方向に伸びやすくなる)
- 実際の距離 \geq 直線距離
が成り立つので、これを利用すると、最適性が証明できる
(実際には、「実際の距離」の下界を用いることができる)



だいぶ改良される

- 読み込む範囲がだいぶ、少なくなる
- しかし、読み込む範囲に関しては、細い道まで含め、全部のデータを読む
- 通常、遠距離の移動には、細い道は使わないので、これは明らかに無駄



2つのレイヤーに分ける (2)

- では、2つのネットワーク(レイヤー)に分けましょう

① 高速道路(+太い道)のレイヤー

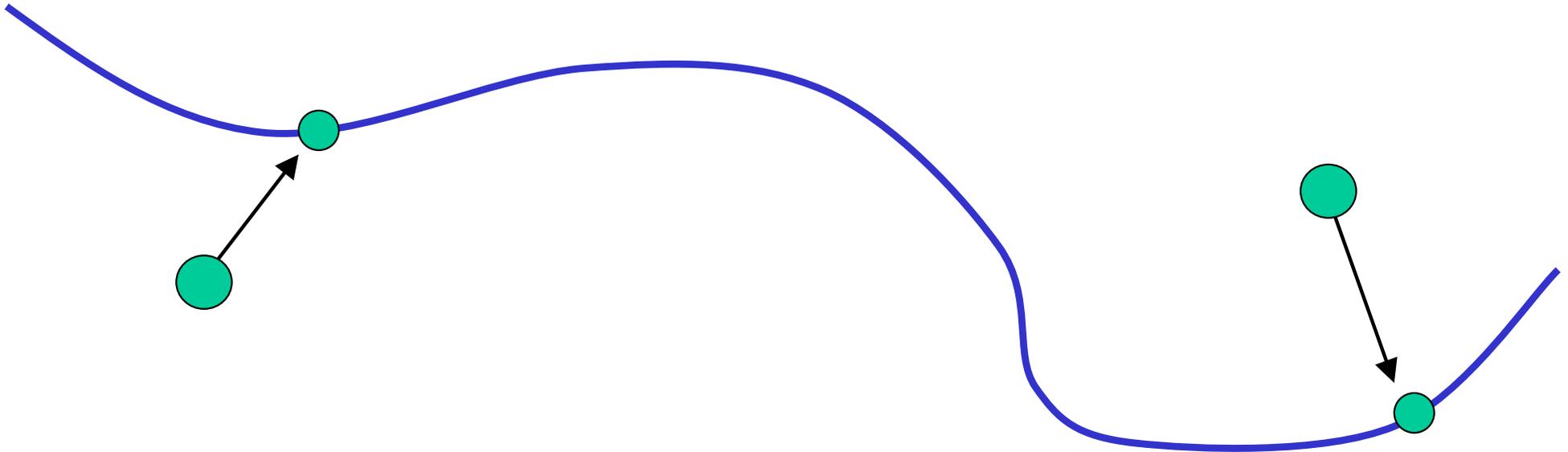
② 全ての道のレイヤー

2つのレイヤーをどのようにつなぐか



レイヤーの使い方

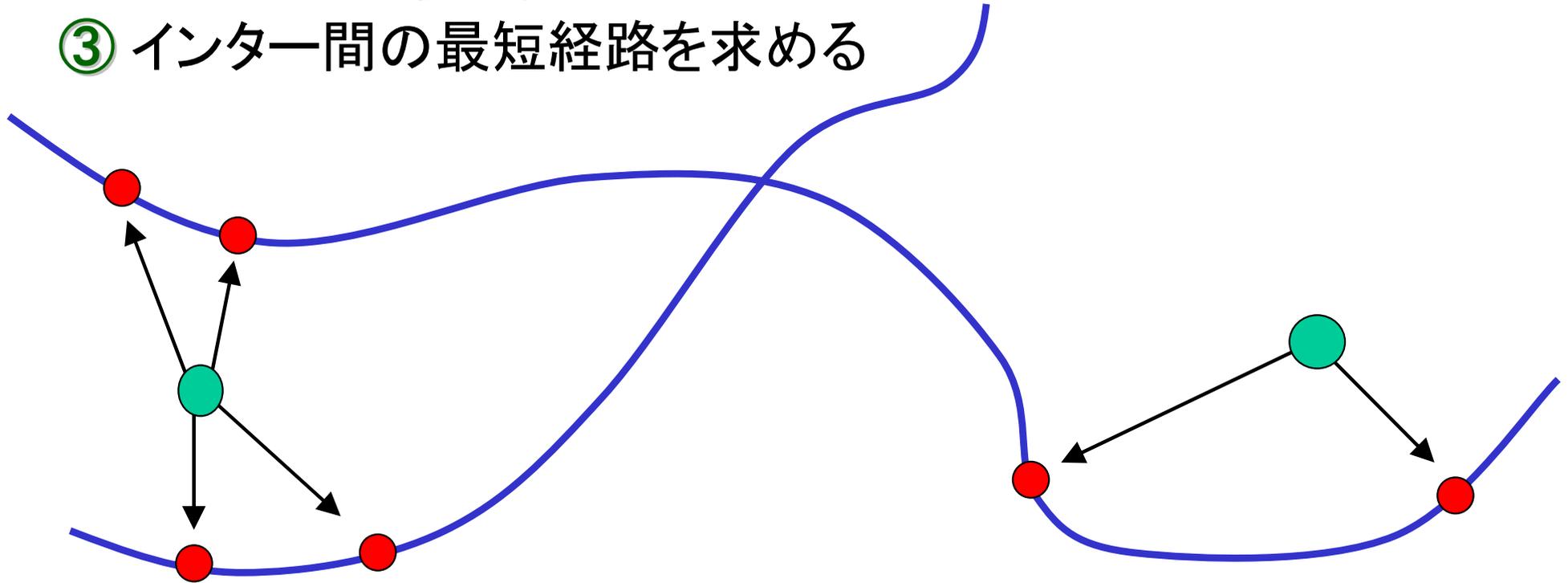
- ① 現在地から、最寄のインターを見つける
- ② 目的から最寄のインターを見つける
- ③ インター間の最短経路を求める



しかし、最寄インターを使うルートが最適とは限らない

レイヤーの使い方 (2)

- ① 現在地から最寄のインター(複数)までの最短経路を求める
- ② 目的地から最寄のインター(複数)までの最短経路を求める
- ③ インター間の最短経路を求める



出てきた経路の中の最短経路を選べばよい

最短路問題のまとめ

- 目的が距離や値段の減少なので、扱いやすい
- 決めるものは、交差点の曲がり方
- 制約は、ゴールに到着すること。簡単

- 現在地から近い順番に見つげいくと、必ず最短経路が見つかる、という良い性質がある
 - ➔ ダイクストラ法ですばやく解ける
- (例えば、値段が××以内で最も速いルート、というような検索をさせたいときには、こうはいかない)

- (データが巨大なため)短時間で計算するためには、なるべく必要な部分しか見ないように、解法を工夫する必要がある

そのほかの問題

生産計画

(サプライチェーンの輸送・在庫コスト最適化)

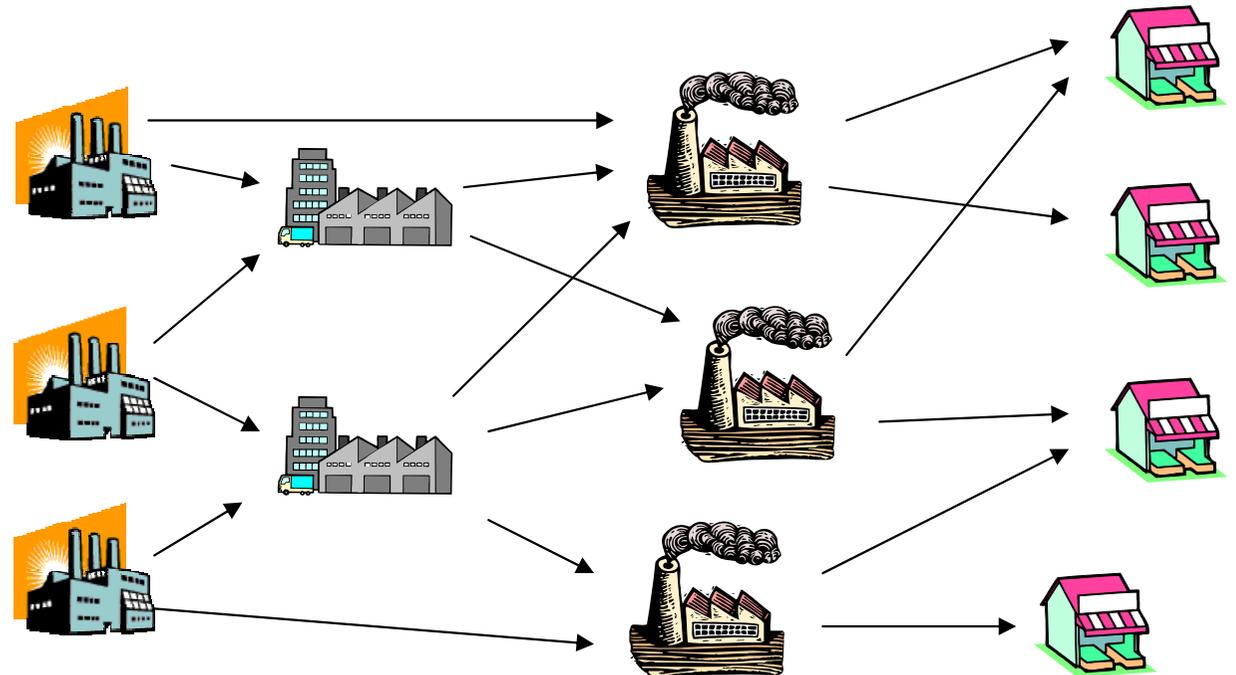
- いくつかの部品工場を持つメーカーを考える
- 各工場は、他の工場から部品を持ってきて、加工・組立てし、できた部品・製品を他の工場へ送り出す(あるいは在庫として蓄える)
- 輸送 & 在庫コストを最小化する

決めるもの:

工場間の輸送量と時期

制約: 必要な部品が
足りていること

解法: 凸性という、近視眼的
に進むと必ず最適解に行く
といういい性質があり、それ
を用いた**線形計画**で解ける



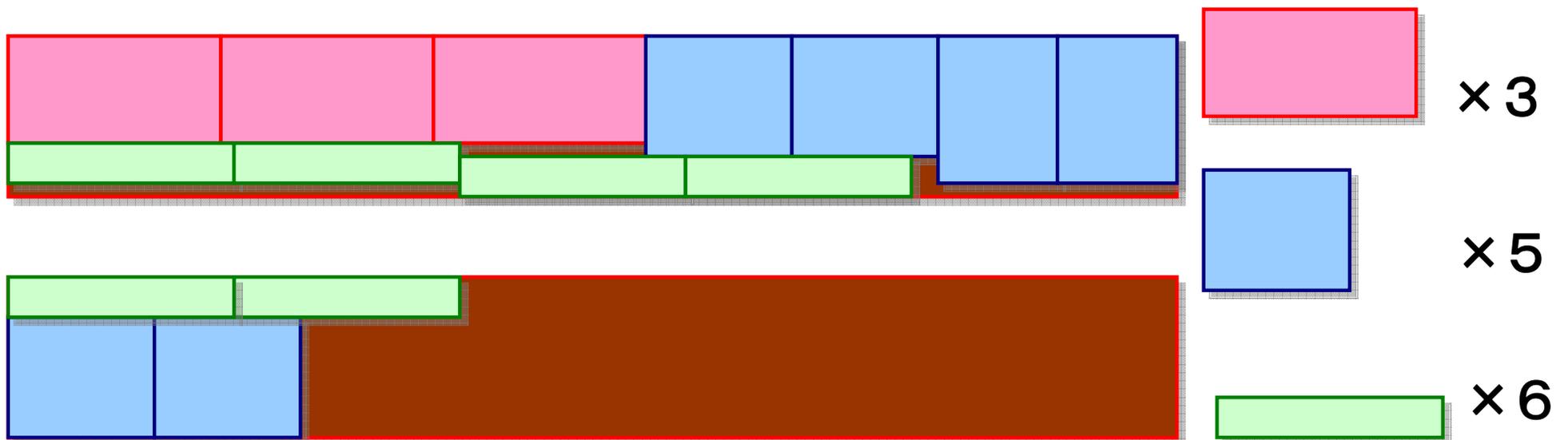
板取計画最適化

- 製鉄所の鉄板、あるいは布地を作る工程の最適化
- 作る鉄板・布地の大きさは一定。ここから、顧客が注文した大きさの、あるいは布地を切り取る
- なるべく無駄なく切り取るよう、切り取り方を最適化する



板取計画最適化

- 製鉄所の鉄板、あるいは布地を作る工程の最適化
- 作る鉄板・布地の大きさは一定。ここから、顧客が注文した大きさの、あるいは布地を切り取る
- なるべく無駄なく切り取るよう、切り取り方を最適化する
- 「良い解のそばにより良い解がある」が成り立つので、近視眼的な解法でうまく解ける。運用もやり易い



スタッフのスケジューリング

問題: パイロットや客室乗務員、あるいは看護師の勤務表を作る

目的: 各個人の負担・休日の希望をなるべくたくさんかなえたい

制約: 複雑な制約が数多くある

— 遠くに行ったら、その日はそこに宿泊しなければいけない

— 電車で帰ってきてても良い

— 各人の宿泊は多くなりすぎない

— 各人に土日の休日がある

— 夜勤や準夜勤の数がたくさんになるといけない

...

▪ 1ヶ月に一回解く程度、じっくり時間をかけて良いものを作りたい

▪ いい解のそばにいい解がある、という性質があまり成り立たない

▪ 実際に解を求めるのは大変。そもそも制約を満たす解が見つからない

▪ 技術の粋を集めると、何とか解ける



たんぱく質の形状

- たんぱく質はアミノ酸がつながった鎖状の物質
 - 鎖が折れ曲がって、電氣的に安定した状態になる。
 - たんぱく質の機能は形で決まるので、形の解析はとても重要
 - しかし、アミノ酸のつながりは解析しやすいが、形の解析は難しい
- ➔ 最適化で何とかしよう

目的: たんぱく質のなるべく安定した形状を求める

決めるもの: 鎖の各点での折れ曲がりの角度

制約: 原子がぶつからないこと

データ: 実験で入手

運用: 機能の推測 & 参考にする

- データが3次元なので、扱いづらい
- 1部の変更が全体に影響を及ぼす
- 最適化は、非常に難しい

