第 1 回 最適化ゼミ

ゼミ担当者　：　勝崎　俊樹，及川　政隆，谷口　義樹
指導院生　：　小野　景子，花田　良子
開催日　：　2002 年 4 月 11 日

ゼミ内容: 本ゼミでは，最適化とは何かについて理解を深め，代表的な最適化手法について学習する．なお，ここで扱うのは，決定的規則を用いた手法である．

1　序論

我々の研究室”知的システムデザイン研究室”の最終的な目的は，その名の通り”知的なシステムを設計する”ことにある．そして，その研究の柱は，
・知的化，コラボレーション
・最適化
・並列，クラスタ
の 3 つである．これらの 3 つのテーマは，それぞれ密接に関係している．その関係は，最適化という手法を用いることで，よりよいシステムの設計を目指すことができる．そのとき，システムの最適化を行うことになるが，それには大きな計算力が必要となるので，クラスタを用いた並列化を行う必要がある．そして，知的・コラボレーション班では，知的なシステムを構築するためのツールとして，最適化・クラスタを利用する．というわけである．

この最適化ゼミでは，この研究室の 3 つの柱の一つ，最適化について学ぶことになる．EC 説明するように，実際の研究では，SA，GA，強化学習のような進化的・創造的な手法を用いているが，このゼミではもっと基礎的な部分について担当する．

2　最適化とは何か

2.1　最適化の目的

私たちの日々の生活において，費用を最小に抑えて物を作ったり，限られた資源を有効に活用するといったように，ある制約条件の中で何らかの目的を達成しなければならないことはしばしばある．これらは，工学においてもいえることであり，このように「制約条件を満たした上で，最も適切な計画，設計を作成し選択すること」が最適化である．

2.2　最適化問題の定義

ある条件のもとで目的とするものを最小化（最大化）するような変数を決定する問題を最適化問題 (optimization problems) と呼ぶ．目的とするものを数式化したものを目的関数 (object function)，目的を達成するうえで満足させなければならない事柄を数式化したものを制約条件 (constraint) と呼ぶ．これらの用語を用いて最適化の定義を言い換えると以下のようになる．

「与えられた制約条件 $g(x)$ のもとで，ある目的関数 $f(x)$ を最小にするような設計変数を求めること」
また最適化問題は一般的に以下のように表される．

$$\begin{array}{lll} Minimize & f(x) & (x \in R) \\ Subject \quad to & g(x) \leq 0 & \end{array}$$

求まった $f(x)$ の値を最適値 (optimal solution) と呼ぶ．ここで、目的関数 $f(x)$ の最大値を求める問題であったとしても，$-f(x)$ の最小値を求める問題と解釈しなおせばよいので，この式では，目的関数の最小値を求める記述になっている．また，制約条件 $g(x)$ についても，例えば $x^2 + 6x \leq 3$ のように上記の形式に当てはまらない式は $x^2 + 6x - 3 \leq 0$ と変換することができる．

2.3　現実世界の現象への定式化の必要性

実世界には複雑な問題がたくさん存在するが，それらはほとんどの場合，定式で存在しているわけではない．このような問題をコンピュータを用いて解くには定式化する必要がある．現象の特徴を簡潔に記述するのに必要十分なパラメータを抽出し，目的関数および制約条件とよばれる式でモデル化したならば，その現象の最適化問題として扱うことができる．その様子を Fig1 に示す．

現在，最適化問題をコンピュータで解くための様々なアルゴリズムが存在する．目的関数，制約条件の数学的特徴により適切なアルゴリズムを選ぶと，コンピュータで解けるようになる．このようにコンピュータで現象を解析するには，モデル化，モデルに合ったアルゴリズムの決定の 2 段階のステップが必要である．

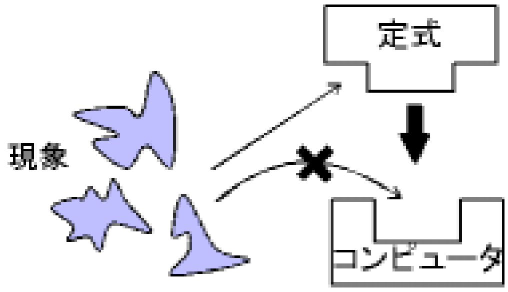

Fig. 1　現象の定式化

2.4　単峰性と多峰性の違い（大域的最適解と局所的最適解）

目的関数には様々な関数が使われる．使われる関数にはそれぞれ特徴があるが，単峰性・多峰性と呼ばれる，最適化問題を扱うときに重要な特徴がある．Fig2 と Fig3 はその一例である．この 2 つのグラフを比べると違いがあるのがわかる．それぞれの関数には山（凸の部分）あるいは谷（凹の部分）にあたる部分があるが，その個数が違う．Fig2 には谷が 1 つしかない．このように，山あるいは谷が 1 つしかない関数を単峰性の関数と呼ぶ．一方，Fig3 は山あるいは谷が複数個ある．このような関数を多峰性の関数と呼ぶ．多峰性の関数の場合，極小値（極大値）が複数個ある．局所的に見たときの，最小あるいは最大となるものを局所的最適解と呼び，定義域全体での最小値を大域的最適解と呼ぶ．Fig2,Fig3 において，○印は大域的最適解，×印は局所的最適解を示している．

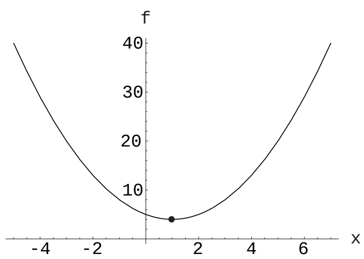

Fig. 2　単峰性の関数

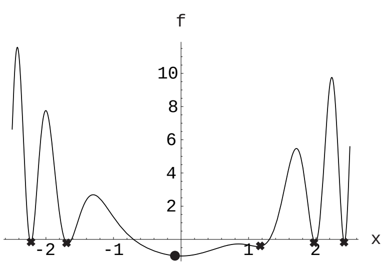

Fig. 3　多峰性の関数

3　最適化問題の例

3.1　最適化問題の例（制約条件と目的関数の違いについて）

最適解の例として，料理の栄養素問題を用いて考えてみる．

2 種類の食品 A と B があり，1 キログラムあたりの炭水化物，タンパク質の含有量と価格を Table1 に示す．

Table 1　食品 100g と必要な栄養素の関係

	炭水化物	タンパク質	価格
A	400 グラム	100 グラム	1000 円
B	200 グラム	300 グラム	1500 円

ここで炭水化物を 400 グラム以上，タンパク質を 300 グラム以上含む料理を作りたい．料理の価格を最も安くするために A と B をそれぞれ何グラムずつ使えばよいだろうか？

＜問題の定式化＞
・使用する A と B の量 (キログラム) をそれぞれ x,y とすれば，各栄養素の量に対する制約から次の 2 式が得られる．

$400x + 200y \geq 400$　（炭水化物）

$100x + 300y \geq 200$　（タンパク質）

・価格 $F(x, y)$ は，

$F(x, y)$=1000x+1500y

である．価格の式を簡単にするために 500 で割り，同様に質量に関しても 100 で割る．また，$\dfrac{F(x,y)}{100} = f(x,y)$ とおく．x,y は当然負でないという条件を付け加えると，結局次の問題になる．

$$Minimize \qquad f(x,y) = 2x + 3y \tag{1}$$

$$Subject \quad to \quad 2x + 3y \geq 2 \tag{2}$$

$$x + 3y \geq 3 \tag{3}$$

$$x \geq 0, y \geq 0 \tag{4}$$

(1) から (4) はすべて線形式であるから，この問題は，線形計画問題 (Linear Programming Problem) である．x,y が設計変数であり，(1) が目的関数，変数の範囲を限定する (2)〜(4) が制約条件である．(4) を特に決定変数の非負条件と呼ぶ．
(1) は目的関数の等高線を表している．これをグラフにすると Fig4 のようになる．

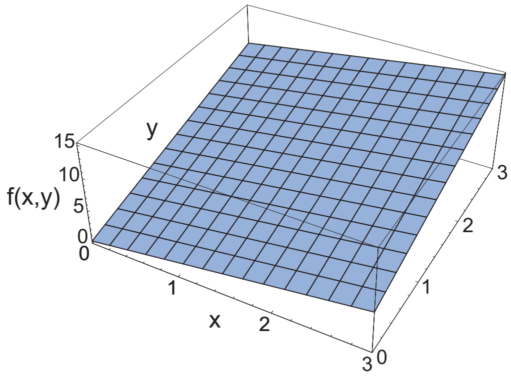

Fig. 4　目的関数のグラフ

まずこの問題を 平面上で幾何的に考察する．(2)〜(4) の条件はそれぞれ半平面を指定する．その共通部分が Fig5 における色付けした領域[1]である．

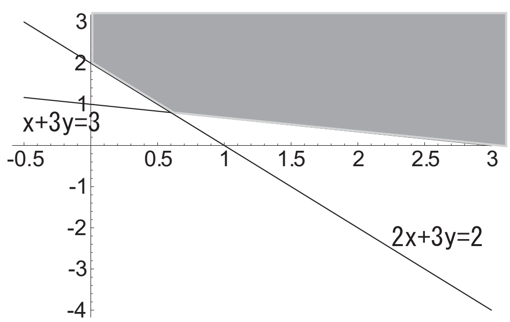

Fig. 5　制約条件のグラフ

ここで，図の上に $2x+3y=c$(定数) で表せる直線を c を変えながら描くと Fig6 のように並行直線群が得られる. これらは，目的関数の等高線を示している．

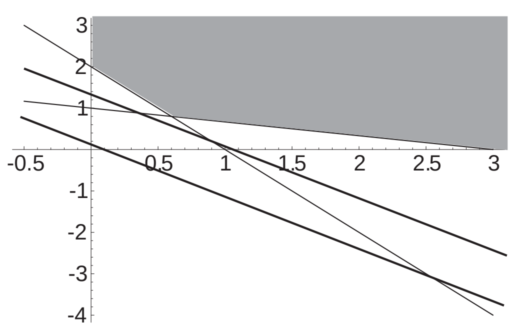

Fig. 6　目的関数が表す直線の平行移動

条件を満たす最小値は，色付け領域と少なくとも一つ以上の共通点をもつような直線を与える c の最小値である．この場合，c が最小となるのは Fig8 の破線の場合で，このときの交点が求める解となる．

[1]実行可能領域 (feasible region) という

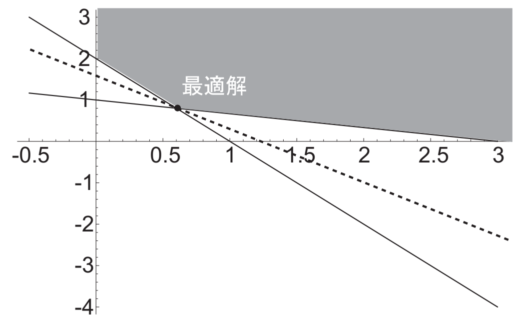

Fig. 7　求められる最適解

計算すると，座標値 $x=\dfrac{3}{5}, y=\dfrac{4}{5}$ が解で，そのとき $c=\dfrac{18}{5}$ となる．

x と y はそれぞれ A と B の量（キログラム）であったから，A を 600 グラム，B を 800 グラム使用すれば最も安くすることができ，1800 円で済ますことができる．

4　最適化問題の分類

4.1　連続問題と離散問題

最適化問題は，その数学的性質から，連続最適化問題と離散最適化問題の 2 つに分けることができる．連続最適化問題とは探す値が連続的に分布している問題であり，離散最適化問題とは探す値が離散的に分布している問題である．また，連続最適化問題はさらに線形計画問題と非線形計画問題との 2 つに分けることができる．これらの最適化問題の特徴は以下のとおりである．

- 連続最適化問題
  - 線形最適化問題（シンプレックス法など）
  - 非線形最適化問題（最急降下法，ニュートン法，準ニュートン法）
- 離散最適化問題（欲張り法，分枝限定法など）

Fig. 8　最適化問題の分類

a) **線形計画問題**

線形計画問題とは，制約条件と目的関数がともに線形であるような問題のことをいう．この線形計画問題は，一般的な表現形式として，以下のように示すことができる．これは不等式条件で制約条件が構成されているが，等式条件を交えて扱うことも可能である．

$$
\begin{array}{ll}
\text{目的関数} & f = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \rightarrow min(max) \\
 & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \leq b_1 \\
\text{制約条件} & a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \leq b_2 \\
 & \cdots \\
 & a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \leq b_m
\end{array}
$$

これをベクトル表記を用いて変換すると，以下のようになる．

目的：目的関数 $f = c^T x$ を最大（最小）にすること
条件：$x \in X \equiv \{x \geq 0 : Ax = b\}$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} \tag{5}$$

$$c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \tag{6}$$

このとき，(5)，(6) に示すように，A は $m \times n$ 定数列ベクトル，b は m 次元定数列ベクトル，c は n 次元定数列ベクトル，x は n 次元変数列ベクトルである．

線形探索問題の例としては, 前章の問題が挙げられる．そして, 線形探索問題の中で，もっとも一般的なものがシンプレックス法（単体法）である．前章の問題のように，2 変数の線形計画問題においては，実行可能領域は凸多角形となり，目的関数の等高線は平行な直線となるので，最適解は実行可能領域である凸多角形の境界線上に存在する．さらに，その凸多角形の頂点のうち少なくとも 1 つが最適解になっていることが分かる．さらに，これらと同等の性質は一般のｎ変数の線形計画問題に対応して成り立っている．シンプレックス法についての詳しい解説は次回に説明する．

b) 非線形計画問題

非線形計画問題とは，目的関数または制約条件のうち少なくとも一方が非線形であるような最適化問題のことである．非線形問題の例としては,「均衡価格問題」,「ロケットの最適制御」,「化学平衡問題」などが挙げられる．線形計画法との一番の大きな違いは，微分値を採ることができるという点である．この性質を利用して最急降下法，ニュートン法，準ニュートン法などのアルゴリズムを用いることで，最適解を導くことができる．これらの手法については次回解説する．

4.2 離散最適化問題

離散最適化問題とは，目的関数や制約関数が離散的な関係を持っている場合の最適化問題のことである．離散的最適化問題の例としては,「ナップサック問題」と呼ばれるものや,「グラフの連結度問題」などが挙げられる．また，離散集合の性質としては,「連続性，微分，積分などの概念を直接適応できない」ことと,「パターンを数えることができ，総当りでそのパターンを調べれば，必ずその最適解を求めることができる」ことが挙げられる．しかし，現実にそれを行おうとすれば,「組み合わせ爆発」が起こってしまい，すべてのパターンを調べられる問題は少ない．そこで，離散最適化問題で必要となるアルゴリズムは,「いかに効率よく探索できるか」,「いかにかかる時間を短縮できるか」という 2 点がもっとも重要である．以下にこれらのアルゴリズムの例として，近似解法である欲張り法と完全列挙である分岐限定法を示す．

欲張り法

欲張り法とは,「解を段階的に構築していく際に，常にその時点で最善であると思われるものを取り入れていく」方法である．つまり「その時点での最善の解の集合体としての最適解」を得ようとする方法である．もちろん，単純かつ明快なこの方法では，問題の大域的最適解を求めることは難しい．それでも，ある種の問題（最小木問題など）に対して能率よく最適解（局所的最適解）を得られる．

分枝限定法

分枝限定法とは「実行不能解を計算する手間を省くために場合分けを行っていき，最適解の得られる見込みのない不必要な場合分けをできるだけ省略して検索する範囲を絞り込むことによって，計算時間を短縮しようとする方法である．しかも，これは「完全列挙による解法」のため, 欲張り法と違い, 大域的最適化を得られる保証がある．

離散最適化問題は，工学のほとんどすべての分野に登場してくるほど重要な問題である．しかし，離散最適化問題には連続性や微分といった古典的な手法をとることができない難しさがある．