第 1 回 最適化ゼミ

ゼミ担当者　：　日和　悟，細江　則彰，服部　宣隆
指導院生　：　勝崎　俊樹，佐藤　史隆
開催日　：　2004 年 4 月 12 日

ゼミ内容: 本ゼミでは，最適化とは何か，最適化の目的について理解を深め，最適化問題の種類とそれに対する代表的な最適化手法などを紹介する．

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．また，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．その関係は次の通りである．まず，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，知的化，コラボレーションにおいては，知的なシステムを構築するためのツールとして，最適化・クラスタが必要となる．

この最適化ゼミでは，知的システムデザイン研究室の３つの柱の１つ，最適化について学ぶことになる．実際の研究では，(Simulated Annealing：SA)・(Genetic Algorithms：GA) などを用いているが，これらについては，SA・GA ゼミに委ねる．本ゼミでは，最適化の基礎的な部分を説明する．

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がしばしばある．これらは，工学においてもいえることであり，「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」を最適化という．

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), またこれらに用いられる変数を設計変数 (design variable) と呼ぶ．これらの用語を用いると，最適化の定義は以下のようになる．

「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．

$$
\begin{array}{lll}
Minimize & f(x) & (x \in R) \\
Subject \quad to & g_i(x) = 0 & (i = 1, 2, 3 \cdots n) \\
 & g_i(x) < 0 & (i = n+1, \cdots m)
\end{array}
$$

$f(x)$ の値を最適解 (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すことができるので，この式は目的関数の最大値・最小値どちらを求める問題にも対応できる．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．

3　最適化問題の例

ここでは最適化問題の例として，次のような問題を考える．

＜問題＞

ある工場では，２種類の製品 A と B を生産している．製品 A を 1kg 生産するには，材料 A が 3t，材料 B が 1t 必要であり，製品 B を 1kg 生産するには，材料 A が 2t，材料 B が 2t 必要である．材料 A，B の１日あたりの使用限度量は，それぞれ 12t，8t である．また，製品 A と B の 1kg あたりの利益はそれぞれ１万円である．このとき，工場全体の利益を最大にするには，製品 A，B をそれぞれどの程度生産すればよいか．

Table 1　製品 A，B の材料構成

	材料 A [t]	材料 B [t]
製品 A	3.0	1.0
製品 B	2.0	2.0
使用限度量	12.0	8.0

設計変数の設定

まず，最適化を行う上で必要となるパラメータを設定する．ここでは，製品 A，B の生産量をそれぞれ x, y とし，これらを設計変数とする．

目的関数の設定

この問題の目的は利益を最大にするような設計変数の値を見つけることなので，目的関数は製品 A と製品 B の利益の和となる．ここで，製品 A，B の 1kg あたりの利益はそれぞれ 1 万円であるから，目的関数 $f(x, y)$ は次のようになる．

$$f(x,y)=x+y$$

以下，この目的関数を最大化する x, y の値を求めることを目的とする．

制約条件の設定

最後に，この問題を解く上での制約を定式化すると以下のようになる．
材料 A に関する制約： $3x + 2y \leq 12$
材料 B に関する制約： $x + 2y \leq 8$
また，設計変数はいずれも 0 以上でなければならないので，次の式も制約条件となる．

$$x \geq 0, y \geq 0$$

以上をまとめると，この問題を定式化したものは次のようになる．

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

$$Subject \quad to \qquad 3x + 2y \leq 12 \tag{2}$$

$$x + 2y \leq 8 \tag{3}$$

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

式 (1) から式 (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：LP) である．式 (4) を特に設計変数の非負条件と呼ぶ．

4　最適化問題の分類

4.1　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することにより，その現象の最適化問題として扱うことができる．よって，いかに対象問題をモデル化するか，ということが非常に重要である．その様子を Fig. 1 に示す．

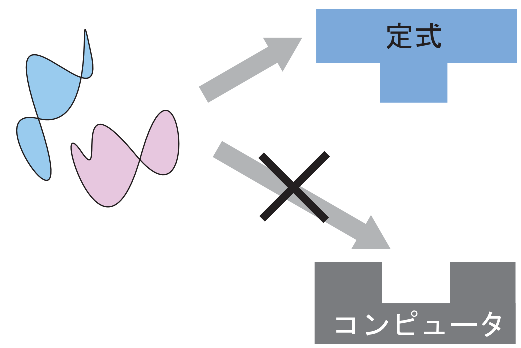

Fig. 1　現象の定式化

4.2　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．さらに，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を Fig. 2 に示す．

- 最適化問題
  - 連続最適化問題
    - 線形最適化問題
    - 非線形最適化問題
  - 離散最適化問題

Fig. 2　最適化問題の分類

4.3　連続最適化問題

連続最適化問題とは，探索する値が連続的に分布している問題である．連続最適化問題は，目的関数の特徴によってさらに単峰性の目的関数のものと，多峰性の目的関数のものの 2 つに分けることができる．

4.3.1　単峰性と多峰性の違い (大域的最適解と局所的最適解)

最適化を行うには，目的関数を定めなければならないが，目的関数には様々な関数が使われる．関数には特徴があるが，その中で特に重要なのは単峰性・多峰性と呼ばれるものである．Fig. 3 と Fig. 4 はその一例である．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 個数が異なる．まず，

Fig. 3 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，Fig. 4 は山あるいは谷が複数個存在する．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．Fig. 3，Fig. 4 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．

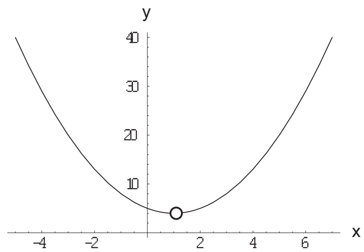

Fig. 3　単峰性の関数

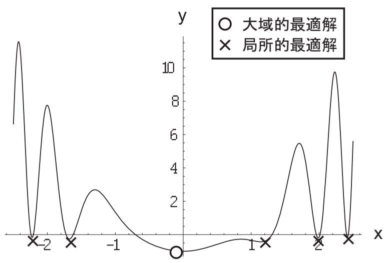

Fig. 4　多峰性の関数

4.3.2　線形最適化問題

線形最適化問題とは，制約条件と目的関数がともに線形 (設計変数に関する 1 次式で表現可) であるような問題のことをいう．線形計画問題とも呼ばれ，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．

目的関数　$f = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n \rightarrow min(max)$

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \leq b_1$$

制約条件　$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \leq b_2$

$$\cdots$$

$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \leq b_m$$

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 $f = c^Tx$ を最大 (最小) にすること

条件：$x \in X \equiv \{A_x \leq b\}$

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

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

このとき，式 (5)，式 (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．

線形最適化問題の例としては，3 節に示した問題が挙げられる．線形最適化問題に対する最適化手法の中で，一般的なものとして，シンプレックス法 (単体法) などがある．3 節の問題のように，2 変数の線形最適化問題においては，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．その状態を Fig. 5 に示す．図を見ると，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．これらと同等の性質は一般の n 変数の線形最適化問題に対応して成り立っている．

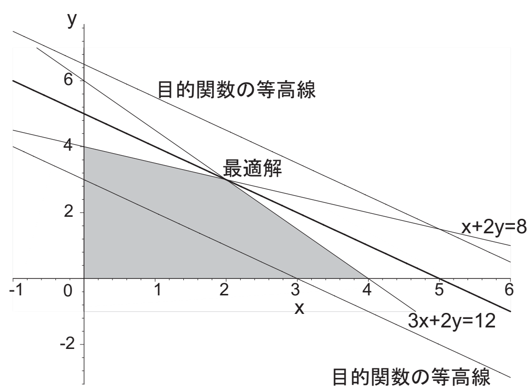

Fig. 5　3 節の例題における実行可能領域

4.3.3　非線形最適化問題

非線形最適化問題とは，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．非線形最適化問題の例としては，「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．線形計画問題との一番の大きな違いは，微分値を取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，局所的最適解を導くこ

とができるが，大域的最適解を導くことはこれらの手法では難しい．より精度の高い解を求める手法としては，GA・SA などが挙げられる．

4.4　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．離散的なものの例としては整数の集合, グラフにおけるノードなどが挙げられる. 以下が離散的最適化問題の例である.

- 「ナップサック問題」(x 以下という条件の下でより多くのものをナップサックに詰めるためにはどうしたらよいか)
- 「最短経路問題」(A → B までの最短経路を求める)
- 「巡回セールスマン問題 (TSP)」(複数の都市を巡回するための最短ルートを見出す問題)

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，現実世界でそれを行おうとすれば,「組み合わせ爆発」が起こるため，すべてのパターンを調べられる問題は少ない．そこで，離散最適化問題で扱うアルゴリズムは,「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」という点がもっとも重要である．これらのアルゴリズムとして，近似解法である欲張り法や完全列挙型の分岐限定法などがある．

5　おわりに

最適化という手法を用いるとき，重要なことは，まず「対象問題をいかにしてモデル化・定式化するか」ということである．4.1 節でも述べたが，現実世界において，ほとんどの問題は定式で存在していないので，それらをモデル化しなければ最適化を行うことはできない．問題が複雑であれば，そのモデル化も非常に困難である．

次に,「定式化された問題に対してどの最適化手法を用いるべきか」も重要である．大域的最適解を得るためには，対象問題の性質を見極め，問題に適した最適化手法を用いる必要がある．