8　最適化理論の概要

8.1　最適化とは

問題に直面したときに，やり方によっては，結果は良くもなるし悪くもなる，というのが世の中の一般則である．何をどうやったところで結果が変わらない，というのでは努力の甲斐もないし，さらに言えば問題に対処する意味もない．選択によって結果は変えられる，選択次第によって結果は良くも悪くもなる，というのは問題解決における極めて重要な性質である．

よって，最も望ましい結果，あるいはより望ましい結果を得るためには，どういう選択（あるいは行動）をとるのがよいのか，ということを事前に調べて知ることが重要となってくる．それが**最適化問題 (optimization problem)** である．

最適化問題にはさまざまなものがあるが，それを分類・整理することを試みてみよう．ここでは最適化問題に関わる以下の構造要素を考える．(図 8.1 参照）

選択する対象の集合（定義域）の性質:D 定義域が連続か離散か，有限か無限か，空間は一次元か多次元か，. . .

選択すべき対象への条件:C 制約付きであるのか無制約か，制約があるとき，それらの作る領域は凸かそうでないか，制約式は線形か非線形か，. . .

評価するメカニズム:M 評価を行うのは数式によるのか，データベースの検索か，シミュレーションの実行か，実験による検証か，. . .

評価値の性質:E 評価値の性質は線形であるか非線型か，連続か非連続，定量的に与えられるのか定性的なのか，スカラ量かベクトル量か，. . .

最適性の基準：G 最適とするのか最小値か最大値か，パレート最適 (Pareto's optimization) となるのか，. . .

こうした最適化問題の基本構造を理解するために，ここではつぎに挙げる具体的な最適化問題の例として構造を当てはめてみよう．

【食品選択問題】
食品 A は 1 グラムあたり，エネルギー 50cal で塩分を 2mg 含み，食品 B は 1 グラムあたり，エネルギー 40cal で塩分が 1mg を含む．食品 A と食品 B はそれぞれ値段が 1 グラムあたり

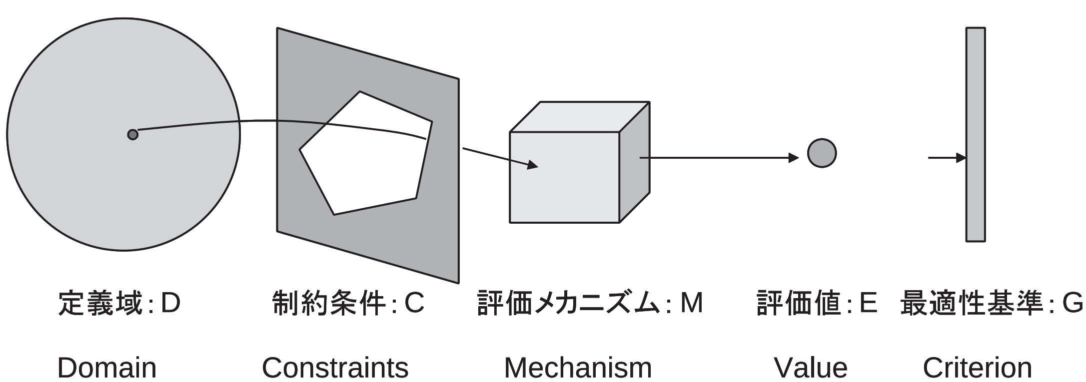
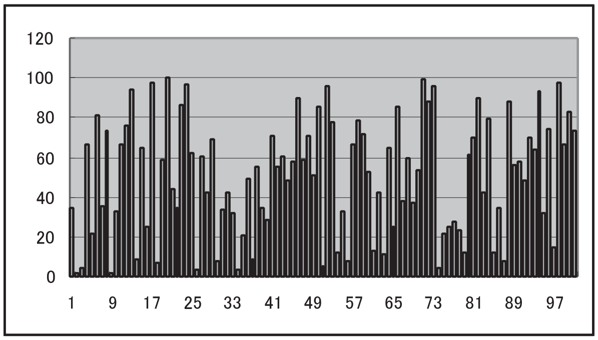
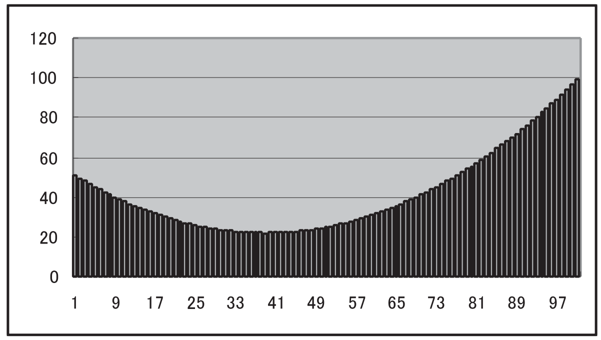


図 8.1: 最適化問題の基本構造



(a) 乱数的な振る舞いをする関数



(b) なめらかに値が変化する関数

図 8.2: 関数の性質と最適化の可否

１円とする．300 円の予算で最大のエネルギーを摂取するには食品 A と B とをそれぞれ何グラムずつ購入すればよいか．ただし，塩分の摂取は 400mg 以下とする．

この問題に対して先ほどの基本構造を当てはめてみよう．

D:対象 食品 A の購入重量と食品 B の購入重量の二つの実数値の組（x, y とする）

C:制約 価格の制約 $x + y \leq 300$ と塩分の制約 $2x + y \leq 400$．および重量の非負条件 $x \geq 0$, $y \geq 0$

M:評価メカニズム 数式 $50x + 40y$

E:評価値 摂取するエネルギー．線形，連続，定量的，スカラ

G:基準 摂取するエネルギーの最大化

【練習問題 8-1】

上に述べた最適化問題を実際に解いてみよ．

8.2 最適化は可能なのか

次に，問題に対して最適な解を求めることは，どういうことなのかを考えてみよう．今，簡単のために，$y = f(x)$, $0 \leq x \leq 100$, x は整数というもので，最小の y の値を与える x を求める問題を考えてみよう．ここで，関数 $f(x)$ として，図 8.2(a) のようなものを考えてみよう．この $f(x)$ は乱数的な振る舞いをする関数である．x の範囲の中で最小の y の値はどうやって探すことができるのだろうか？この場合には，取りうる x は有限個 (101 個）なので，すべてを網羅的に調べれば y の最小値とその時の x の値を求めることができる．これが全数探索 (exhaustive search) である．この場合は，選択の候補の数は 101 個でしかないのでさほどの手間ではないが，もしも $0 \leq x \leq 2^{50}$ だったら，あるいは，x が整数ではなく，有理数だったら？.... こうしたすべての選択の候補を調べることが（事実上）不可能である．

もしも関数 $F(x)$ が図 8.2(a) のような，なめらかなものであったならば，どうであろうか？ある x の値 $F(x)$ がわかっていれば，x の近く（近傍）ではさほど $F(x)$ の値が変わらない．こうした連続性が成立するということは，最適化を求める上では一般に不可欠なのである．

すなわち，最適化とは上記の D,C,M,E,G がどのようなものかによって，可能であったり，可能であっても非常に手間のかかるものであったり，さらには理論的に不可能であったりするものなのである．ま

た，可能なものに対しても，D,C,M,E,G の組み合わせに対して用いる手法（最適化法）が変わってくるのである．以下にその最適化法の代表例をいくつか列挙しよう．

8.3　最適化問題のいろいろ

ここでは，先ほどの最適化問題の基本構成の分類に従って，典型的な問題を見てみることにしよう．

1. D:実数，C:線形不等式，M:数式，E:一次式（スカラ），G:最小（最大）
このクラスの問題は線形計画問題 (linear programming problem) と呼ばれ，単体法（シンプレックス法：simplex method）や内点法と呼ばれる手法など，効率的な解法が存在する．最適な解が存在する時には，凸の領域の境界の頂点に存在するため，頂点を形成する境界（制約条件）の組を探すことが最適化の中心となる．

2. D:整数，C:線形不等式，M:数式，E:一次式（スカラ），G:最小（最大）
線形計画問題において，定義域が連続的な実数ではなく，離散的な整数となったもの．このクラスの問題は整数計画問題 (integer programming proglem) と呼ばれる．定義域が離散的である離散最適化問題 (discrete optimization problem) のひとつ．また，整数と実数が混じったものを混合整数計画問題 (mixed integer programming problem)，整数が 0 か 1 のみをとる場合は，全 0-1 整数計画問題，あるいは混合 0-1 整数計画問題と呼ぶ．連続的な値をとらないことで，一般に問題は線形計画法と比べて取り扱いが難しくなることが多い．

3. D:実数，C:線形不等式，M:数式，E:２次式（スカラ），G:最小（最大）
線形計画問題において，E が一次式ではなく，２次式で与えられるもので，２次計画問題 (quadratic programming problem) と呼ばれる．線形計画問題ではない問題–非線形計画問題（non-linear programming problem)–ではあるが，２次式がある条件を満たす凸２次計画問題は線形計画法と同様な考え方で解くことができる．

4. D:関数，C:境界条件，連続性など，M:数式，E:汎関数 (functional)，G:最小（最大）
これは定義域が数ではなく，関数を考えるもので，変分問題 (variational problem) と呼ばれる．例えば重力の働きだけで高さの違う２点を最速で結ぶなめらかな曲線（最速降下線）を求める問題は，その典型である．

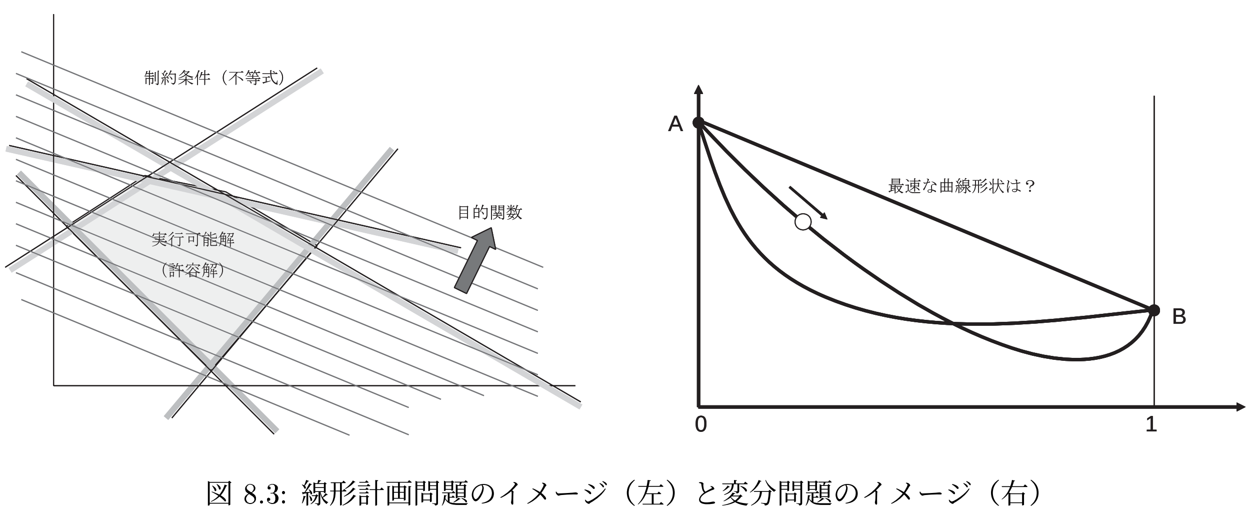


図 8.3: 線形計画問題のイメージ（左）と変分問題のイメージ（右）

5. D:対象の組み合わせ，C:各種条件，M:一般に数式，E:一般にスカラ値，G: 最小（最大）
   選択する候補の集まりが直積空間 $D_1 \times D_2 \times \ldots \times D_n$ として与えられるもの．すなわち，D_1 から a_1，D_2 から a_2，…，D_n から a_n をとりだし，それらの組み合わせ $a_1, a_2, \ldots, a_n$ の集合を定義域とするもので，組み合わせ最適化問題 (combinational optimization problem) と呼ばれる．すべての組み合わせを網羅的に調べることができないため，有望なものを選択的に探すことが重要となる．巡回セールスマン問題 (traveling saleman problem) はこの典型的な問題である．

8.4　最適化問題の解法

概要の最後して，最適化問題の解法について典型的なものを紹介しておこう．最適化問題の解法には大きく分けて，

- 大域的最適解を求めるのか，局所的最適解で満足するか.
- 厳密解を求めるか，近似解（準最適解）で満足するか.

という区別が存在する．理想としては大域的最適解–すなわち，定義域で制約条件を満足するもの（許容解，実行可能解）の中のすべてにおいて最適な解–を厳密解として求めることであるが，これが求められる問題は実はそれほど多くはない．逆にいうと，こうした問題はことさら最適化問題として取り上げるまでもなく，最適解が自明であったりする．

多くの最適化問題においては，局所的最適解の近似解を求めることで妥協しなくてはならない．従来は人間の"カン"に頼って探索していた部分に対して，強力な手段として使われるのがコンピュータである．コンピュータを用いた近似解の典型的な解法としては,

1. ランダム法 (random method)：許容解の中からランダムにサンプルとして選び，その中で最適な値を有するものを近似解とするもの．モンテカルロ法 (Monte Carlo Method) とも呼ばれる．単純な手法であるが，どのくらいのサンプルを選べばよいかという点に注意が必要となる．
2. 近傍探索法 (neighborhood search)：何らかの方法で得られた許容解に対して，その近傍を定義して，その近傍のなかでよりよい値を持つ可能解へと置き換える操作を繰り返して値を改善していくもの．関数の連続性が前提となる．
3. 緩和法 (relaxation method)：制約条件を緩和することで，一つの解を簡単に構成し，それに修正を加えて制約条件を満足する解を得る方法．適切な緩和の程度を選択することが重要.

などがある．また，また，こうした単一の解法ではうまく解けない場合，さまざまな解法を場合によって使い分けることで解けることもあり，そうした最適化問題の解法の適切な選択をメタ戦略と呼ぶ.

参考図書

(1) 今野浩，山下浩著：「非線形計画法」日科技連 ISBN4-8171-5306-7，4,725 円
非線形計画法について詳細に記した本.

(2) 今野浩著：「数理決定法入門　キャンパスのＯＲ」　朝倉書店 ISBN4-254-12608-5，3,675 円
大学のキャンパス内に生じるさまざまな意思決定問題（最適化問題）を数理的に解決する内容をわかりやすく解説.

(3) 松原望著：「意思決定の基礎」　朝倉書店　ISBN4-254-29511-1，3,360 円
意思決定に関する数理的な内容を詳しく解説.