最適化の基礎

博士（工学） 遠藤　靖典
工学博士 宮本　定明
共著

コロナ社

ま　え　が　き

本書は，筑波大学理工学群工学システム学類 3 年を対象として開講している「システム最適化」において，筆者らが用いてきたテキストを補筆したものである。1 章から 3 章は遠藤が，4 章から 6 章は宮本が担当した。

最適化の分野は長い歴史をもち，多くの研究が行われている。本書では，線形計画法，非線形計画法，組合せ最適化問題の 3 種類の最適化を扱うが，これらに関しても，理論面・実用面ともに非常に深化しており，関連文献も数多い。そこで本書では，前述のように大学 3 年への講義を念頭において，数理計画法におけるシンプレックス法，非線形計画法におけるラグランジュの未定乗数法，組合せ最適化におけるメタ戦略といった代表的な手法はもちろんだが，それらを裏付ける数学的定理についても，過不足なく，過度に詳細な記述にならないように配慮しつつ記述した。特に 5 章は，昨今のビッグデータ解析をはじめとした機械学習における重要性に配慮し，データ解析と最適化の関連を理論面から言及したものとして，本書の大きな特徴となっている。

本書の章末問題には解答がついていない。これは，講義での演習として出題するため，という理由もあるが，わからなければ何回も本書を読み直して，解けるまで考えてほしいからである。解答がわからないと解く気がしない，ということはあろうが，本書を読めば解ける問題ばかりなので，ぜひ取り組んでほしい。

本書を執筆するにあたり，適切なご助言をいただいただけでなく，執筆の遅れに対して忍耐強く接してくださったコロナ社に心から感謝する。

2018 年 1 月

遠藤 靖典・宮本 定明

目　　　次

1.　最　　適　　化

2.　線 形 計 画 法

3.　非線形計画法

4.　組合せ最適化問題

5.　最適化のデータ解析への応用

6.　補足：NP 完全性について

1 最　適　化

1.1 「最適化」の意味

本書の本題に入る前に，本書の題目である「最適化」について述べよう。

まず，「**最適**（optimal, optimum）」を辞書で引くと

（名詞・形容動詞）最も適している・こと（さま）。　（大辞林，三省堂）

と出る。「化」は

（接尾）主に漢語の名詞に付いて，そういう物，事，状態に変える，または変わるという意を表す。　（大辞林，三省堂）

なので，それらから考えると「**最適化**（optimization）」は

最も適している物，事，状態に変える，または変わる。

という意味になりそうだが，「最適化」を改めて辞書で引くと

システム工学などで，ある目的に対し最も適切な計画を立て設計すること。また，そのような選択を行うこと。　（大辞林，三省堂）

と出てくる。つまり「最適化」の対象は，対象をシステム工学をはじめとした工学に限定されており，ここでいう「適切」とは，対象が一般的な工学の場合，

「高効率」の意味で解される。ひるがえって工学的な立場からみると，「最適化」は「システムを最適化すること」の意味で用いられており，「システム最適化」の略としての「最適化」といっても過言ではない。すなわち**本書の目的は「システムを最適化する手法」について説明**することである。

そこでまず，「最適化」についてもう少し詳細に述べる。

ここで，一般的な工学における「最適化」について，いくつか注意しておこう。

まず第一に，最適化は必ずしも**定式化**（formulation）されるとは限らない。例として例 1.1 を挙げよう。

例 1.1

1. ある工場で，品質管理のためにいくつかの工夫を行ったところ，統計的に明らかな効率改善がみられた。これは，定式化されない最適化の一種である。
2. 熟練したプログラマーは，処理系の性質を考慮して，計算効率がよいようにプログラミングを行う。

第二に，最適化の定式化にはさまざまな種類がある，すなわち，いわゆる最適化問題のカテゴリーに属さないものも多い。例として例 1.2 を挙げよう。

例 1.2

1. プログラムをコンパイル時に最適化（効率化）することができる。
2. アルゴリズムにおける最適性：n 個のデータをソーティングする際，ヒープソートの計算量は $O(n \log n)$ である。しかもこれよりオーダーを低くすることはできない。よって，$O(n \log n)$ は最適なオーダーである。
3. ニューラルネットワークなどの学習では，最適性の概念が explicit（明示的）あるいは implicit に使われている場合がよくある。ホップフィールドネットワークは前者の例であり，バックプロパゲーショ

ンによる学習は後者の例である。

第三に，最適化問題には，時間を表す変数が明示的にはいらない**静的**（static）な最適化問題と時間を表す変数が明示的に含まれる**動的**（dynamic）な最適化問題がある。

では「最適化」に出てくる「システム工学」とはなにかというと，やはり辞書によれば

> ある目的のための組織体系であるシステムの分析・開発・設計・運用などを合理的に行うための総合的技術。（大辞泉，小学館）

である。細かくいえば，分析・開発・設計はシステム工学，運用はオペレーション・リサーチという分野になるが，それらをまとめてシステム工学といって差し支えない。

一般的な工学の枠で最適化を論じるときには，前述の「最適化」の意味で用いられるが，システム工学という限定した枠の中ではより狭義，すなわち「最大化」または「最小化」の意味で用いられることが多い。

本書で扱う最適化も，与えられた問題に対する**最大化**（maximization），または**最小化**（minimization）について述べる。すなわち，本書ではまずある問題が与えられ，その問題を与えられた条件下で最大化，または最小化するための方法について説明していく。与えられる問題の最大化，または最小化について述べるので，問題は数学の語法，すなわち関数の形で記述されている必要があり，結果として，最適化で述べられることは

> 与えられた関数を，与えられた条件下で，最大化または最小化するための数学的方法

となる。「与えられた関数を，与えられた条件下で，最大化または最小化する」問題を**最適化問題**（optimization problem）という。ではつぎに，最適化問題を考えていくために必要な数学の記号と記述について説明していこう。

1.2　最適化問題の記述

ここでは，本書を読み進めていくのに必要な数学の記号と，最適化問題の記述について説明する。

1.2.1　記　　号

以下，本書で用いる基本的な記号について列挙しておく。

- $\Re^n$：n 次元ユークリッド空間を表す。他に $\Re^m$, $\Re^p$ などを用いる。
- x：$\Re^n$ の要素，すなわち $x \in \Re^n$ である。成分は $^\top$ を転置記号として，つぎのように表す。

$$\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n)^\top = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

- $f(\boldsymbol{x})$, $g(\boldsymbol{x})$：$\boldsymbol{x}$ の実数値関数，すなわち $f(\boldsymbol{x}) \in \Re, g(\boldsymbol{x}) \in \Re$ である。一般に，h が空間 X で定義され，空間 Y に値をとる写像のとき，$h : X \to Y$ と書く。したがって，$f : \Re^n \to \Re$, $g : \Re^n \to \Re$ である。$f(\boldsymbol{x})$ は後に述べる目的関数あるいは評価関数，$g(\boldsymbol{x})$ は制約関数の意味で用いられることが多い。
- $F(\boldsymbol{x})$, $G(\boldsymbol{x})$：ベクトルの値あるいは行列の値をとる関数。これに対して前述の $f(\boldsymbol{x})$, $g(\boldsymbol{x})$ はスカラー値の値をとる関数である。
- ∇f：f のグラディエント（gradient）を表す。ここで ∇ はナブラという。行ベクトルであることに注意する。

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$

- $\nabla^2 f$：f のヘッセ行列（Hessian matrix）を表す。ラプラシアンではないことに注意する。

$$\nabla^2 f = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\right) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

- $\|\boldsymbol{x}\|$: $x \in \Re^n$ のユークリッドノルムを表す。すなわち

$$\|\boldsymbol{x}\| \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_n^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$$

ここで，$\stackrel{\text{def}}{=}$ は「左辺を右辺と定義する」という意味の記号である。

1.2.2 最適化問題の記法

前述のように，最適化問題とは「与えられた関数を，与えられた条件下で，最大化または最小化する」問題である。「与えられた関数」を**目的関数**（objective function）といい，「与えられた条件」を**制約条件**（constraint），制約条件を表す関数を**制約関数**（constraint function）という。目的関数を f，制約関数を g_i $(i = 1, \ldots, m)$, h_j $(j = 1, \ldots, l)$ としたとき，最適化問題は

> 制約条件 $g_i(\boldsymbol{x}) \leqq 0$ $(i = 1, \ldots, m)$ および $h_j(\boldsymbol{x}) = 0$ $(j = 1, \ldots, \ell)$ のもとで，目的関数 $f(\boldsymbol{x})$ を最小化（または最大化）せよ。

となる。ただし,「$f(\boldsymbol{x})$ の最大化」は，$f(\boldsymbol{x})$ の符号を変えることにより,「$-f(\boldsymbol{x})$ の最小化」と変換できるので，一般に最適化問題を考えるときには，最大化と最小化のどちらかを考えればよい。そこで以下，本書では特に明記しない場合，最小化の場合の最適化問題について述べることとし，最適化問題の表現として，以下の 3 種類を扱う。

(P1) 目的関数の最小化を

$$\text{minimize} \quad f(\boldsymbol{x})$$

$$f(\boldsymbol{x}) \to \min$$

索　引

著者略歴

遠藤　靖典（えんどう　やすのり）

1990年　早稲田大学理工学部電子通信学科卒業
1994年　早稲田大学助手
1995年　早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了（電気工学専攻）
　　　　博士（工学）
1997年　東海大学講師
2001年　筑波大学講師
2004年　筑波大学助教授～准教授
2013年　筑波大学教授
　　　　現在に至る

宮本　定明（みやもと　さだあき）

1973年　京都大学工学部数理工学科卒業
1975年　京都大学大学院工学研究科修士課程修了（数理工学専攻）
1978年　京都大学大学院工学研究科博士課程修了（数理工学専攻）
　　　　工学博士
1978年　筑波大学研究専従技官（準研究員）
1981年　筑波大学講師
1987年　筑波大学助教授
1990年　徳島大学教授
1994年　筑波大学教授
2017年　筑波大学名誉教授

最適化の基礎

Introduction to Optimization Methods　© Yasunori Endo, Miyamoto Sadaaki 2018

2018 年 3 月 20 日　初版第 1 刷発行　★

検印省略

著　者　遠　藤　靖　典
　　　　宮　本　定　明
発行者　株式会社　コロナ社
　　　　代表者　牛来真也
印刷所　三美印刷株式会社
製本所　有限会社　愛千製本所

112–0011　東京都文京区千石 4–46–10
発行所　株式会社　コロナ社
CORONA PUBLISHING CO., LTD.
Tokyo Japan
振替 00140–8–14844・電話(03)3941–3131(代)
ホームページ　http://www.coronasha.co.jp

ISBN 978–4–339–02884–3　C3055　Printed in Japan　（大井）