最適化問題

[Wikipadia](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%9C%80%E9%81%A9%E5%8C%96%E5%95%8F%E9%A1%8C)

**最適化問題**（さいてきかもんだい、[英](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E8%8B%B1%E8%AA%9E): optimization problem）とは、特定の[集合](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E9%9B%86%E5%90%88)上で定義された[実数](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%AE%9F%E6%95%B0)値[関数](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E9%96%A2%E6%95%B0_(%E6%95%B0%E5%AD%A6))または[整数](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%95%B4%E6%95%B0)値関数についてその値が[最小](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%9C%80%E5%B0%8F)（もしくは最大）となる状態を解析する問題である[[1]](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%9C%80%E9%81%A9%E5%8C%96%E5%95%8F%E9%A1%8C#cite_note-%E7%9F%A2%E9%83%A82006-2-1)。こうした問題は総称して**数理計画問題**（すうりけいかくもんだい、[英](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E8%8B%B1%E8%AA%9E): mathematical programming problem, mathematical program）、**数理計画**とも呼ばれる[[1]](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%9C%80%E9%81%A9%E5%8C%96%E5%95%8F%E9%A1%8C#cite_note-%E7%9F%A2%E9%83%A82006-2-1)。最適化問題は、[自然科学](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E8%87%AA%E7%84%B6%E7%A7%91%E5%AD%A6)、[工学](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%B7%A5%E5%AD%A6)、[社会科学](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E7%A4%BE%E4%BC%9A%E7%A7%91%E5%AD%A6)などの多種多様な分野で発生する基本的な問題の一つであり、その歴史は18世紀の[変分問題](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%A4%89%E5%88%86%E5%95%8F%E9%A1%8C)に遡る[[2]](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%9C%80%E9%81%A9%E5%8C%96%E5%95%8F%E9%A1%8C#cite_note-%E7%9F%A2%E9%83%A82006-%E2%85%B3-2)。1940年代に[線型計画法](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E7%B7%9A%E5%9E%8B%E8%A8%88%E7%94%BB%E6%B3%95)が登場して以来、理論的な研究や数値解法の研究が非常に活発に行われ、その応用範囲はいろいろな分野に拡大されていった[[1]](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%9C%80%E9%81%A9%E5%8C%96%E5%95%8F%E9%A1%8C#cite_note-%E7%9F%A2%E9%83%A82006-2-1)。実世界の現象の数理的な解析に関わる問題や抽象的な理論の多くをこの最適化問題という一般的なくくりに入れることができる。[物理学](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E7%89%A9%E7%90%86%E5%AD%A6)や[コンピュータビジョン](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%B3%E3%83%B3%E3%83%94%E3%83%A5%E3%83%BC%E3%82%BF%E3%83%93%E3%82%B8%E3%83%A7%E3%83%B3)における最適化問題は、考えている関数を[モデル](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%A2%E3%83%87%E3%83%AB_(%E8%87%AA%E7%84%B6%E7%A7%91%E5%AD%A6))化された[系](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E7%B3%BB)の[エネルギー](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%A8%E3%83%8D%E3%83%AB%E3%82%AE%E3%83%BC)を表すものと見なすことによって、**エネルギー最小化問題**と呼ばれることもある。

----------------------------

最適化問題とは、関数の解が最小（または最大。これは関数にマイナスを乗算すれば同じ問題だ、ということ）となるパラメータを求める問題のこと。

例えば、２次関数F(x) = x^2 + 4x + 4が最小となるxは？（グラフを書けば一目瞭然のx=-2）

このように中学レベルでも最適化問題を解いてはいる。

高次関数（３次以上）の最適化問題では、値が収束しないため、最小/最大を求めることができない場合がほとんどである。

しかし、ある一定範囲内であれば、最小/最大を論ずることはできる。例えば、３次関数には必ず極値がある。

だから多くの最適化問題は次に述べる制約条件を立て、制約条件下での解を求めるのだ。

制約条件とは、関数パラメータに下限や上限があるということだ。

例えば、長さ10mの紐で面積が最大となる長方形を求めてみる。この時、紐の長さには10mという制限がある。これが制約条件だ。もし、紐の長さに制限がないなら、幾らでも巨大な長方形を作ることが可能になってしまう。しかし現実の問題では、紐の長さのようにリソースに限りがある場合がほとんどであるから、多くの最適化問題には制約条件がある。

現実の最適化問題は関数パラメータが複数ある。

例えば、長さ10mの紐で面積が最大となる長方形を求めてみる時も、「縦の長さ」と「横の長さ」の二つが必要だ。

現実の問題はもっと複雑で、

F(ベクトルx）、ベクトルx = (x1, x2, …, xn)

という風に、沢山のパラメータを扱うことになる。

最適化問題の解き方。

沢山のパラメータ、そして、パラメータ一つ一つに制約条件がついている場合、これは高校数学のように式を分解して解いていく、などということはできない。そんな簡単な問題ではないのだ。

だが、理論的には必ず解ける。

なぜなら、あらゆる最適化問題は「すべての組み合わせで解を計算すれば、最小/最大がどれか解る」からだ。

もちろん非現実的だ。組み合わせの数は、億、兆、京の世界。人間は解く前に寿命を迎える。ただし、これはコンピューターの得意分野だ。

コンピューターなら超高速に計算を進め、マシンパワーでいくつかの問題は解くことができるだろう。

しかし、現在のコンピューターでも現実的な時間で求めるのは難しい問題が世の中にはある。これをNP困難と呼ぶ。

ここからは、NP困難な最適化問題を解く方法、最適化アルゴリズムについて書く。

一番簡単なのは、勾配降下法。関数の「傾き＝微分」を求めて、最小化に進む方向へ探索する方法だ。

さて、傾き = 0、つまり勾配の平らな所にたどり着いたとしよう。

勾配降下法はそこを最適解と考える。しかし、そこは本当に最適解だろうか？たまたま小さな谷になっているだけで、谷を超えた先にもっと小さくなる箇所があるのではないか？

この疑いは正しい。このように小さな谷のことを局所解と呼ぶ。真の最適解を大局的最適解と呼ぶ。

重要なことは「局所解か大局的最適解かを確かめる方法はない」

なぜなら、大局的最適解であることを証明するには、「すべての組み合わせを計算して確かめる必要がある」。

この時、「いやもっと効率が良い方法があるだろう？」とは考えてはいけない。その方法が成立していないこと。それがNP困難という意味。もし、そんな方法があれば、その問題は簡単に解ける。

最適化アルゴリズムは、「局所解に嵌ることを避ける」と「短い時間で解く」ことをいかに両立させるか。これを突き詰めていく世界だ。

機械学習 = 最適化問題？

ニアリーイコールだ。

機械学習の多くは、「評価式に対して最小または最大となるパラメータを求める」という考えで学習を行っている。この部分は紛れもなく最適化問題だ。

しかし、機械学習は、学習データの質、評価式（モデル）構造の質といった面もあり、最適化問題がすべてではない。

ただ、関連分野ではあるので、機械学習の世界で最適化問題は急速に研究が進んでいる。

最適化問題の種類。多目的最適化問題。

最適化した関数が複数あることを多目的最適化問題とよぶ。

例えば、家で太陽光発電を導入するとき、「窓の大きさ」をパラメータに「日照時間」と「電気代」を関数に最適化したいなどが上げられる。

多目的最適化問題の難しさは、関数同士が「トレードオフ関係」にあることだ。

家の「日照時間」を最適化するなら、壁をすべて窓にすればいい。

太陽光発電による「電気代」を最適化するなら、壁一面に太陽パネルを貼り付ければいい。

このように、どちらかがよくなるともう片方は悪くなる関係。「トレードオフ関係」

この時の最適解は、「日照時間」と「電気代」のそれぞれの最適ではなく間にある何かであるはずだ。

これを求めるには、二つの関数を同時に評価できる別の指標が必要になる。ここが難しさだ。