

理論家にとっての数理モデル

小島 政和

1. はじめに

この原稿は、特集「モデリング」の主旨からはかなりずれています。私自身は数理計画（最適化）の理論と手法が専門で、いわゆる実社会でのモデリングに携わった経験はほとんどありませんし、モデリング技術に対する知識も貧弱です。そんな理由で、タイトルを「理論家にとっての数理モデル」として、理論から応用にいたるまでの数理計画モデルの研究のさまざまな局面を私の経験を含めて述べてみたいと思います。数理計画の研究者を目指す“若い人へのメッセージ”になれば良いとも思っています。ただ、私にとって最適化を語るのには慣れていますが、若者へ伝わるようなメッセージが書けるかは、はなはだ不安です。文章はかなり皮肉っぽく聞こえるかもしれません。それは、私の個性の主張であり、一様な考え方への抵抗としてとらえて下さい。数学ではありませんので正しい結論はありませんし、考え方を押しつける気もありません。

2. 人生＝最適化モデル？

私が研究者を目指したのは学部4年の頃です。その頃すでに、最適化分野で伊理正夫先生、そして、新進気鋭の茨木俊秀先生、今野浩先生が国際的な活躍をなさっていらっしゃいました。「いつか私もこのような偉大な研究者に」との夢を持ったと同時に、私の能力では彼らに太刀打ちできないし、決して追いつけないだろうと強く感じました。特に、東大や京大出の秀才と全面的に競ったらず勝ち目はありません。ただ、私の能力をごく狭い範囲に集中し、他を切り捨てれば私にもチャンスがあるかもしれません。私が使える資源や能力は有限です。時間も有限です。したがって、互いに関連が薄い多様なことに資源、能力、時間を分散してしまえばどれも達成度は低くなるはずで、目標を絞ってそれに集中し、それ以外は極力切り捨てま

しょう。そんな理由で、研究以外のさまざまなものへ費やす時間が極めて少なく抑えられて来ました。そのような人生の送り方を若者に勧めているわけではありませんが、そのような人生を送る若者があってもよいでしょう。あなたが天才でない限り、多くのことで秀でることはできません。したがって、多様なことをバランスよく適当なレベルで楽しむのもよいし、絞り込んだことに全精力を集中して使うのも人生です。

最適化問題（数理計画問題）は

目的： $f(\mathbf{x}) \rightarrow$ 最小化

条件： $\mathbf{x}=(x_1, x_2, \dots, x_n) \in S$.

とかけます。ここでは、 f を n 個の実数の決定変数 x_1, x_2, \dots, x_n に関する実数値関数で目的関数、 S を許容領域（実行可能領域、制約領域）と呼びます。私が主として研究してきたのは連続最適化問題で、目的関数 f は連続微分可能な関数で、許容領域は有限個の不等式と等式を用いて、

$$S = \left\{ \mathbf{x} : \begin{array}{l} g_i(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (i=1, 2, \dots, l) \\ h_j(\mathbf{x}) = 0 \quad (j=1, 2, \dots, m) \end{array} \right\}$$

のように記述されます。ここで、 g_i, h_j は連続微分可能な関数です。最適化問題に登場するすべての関数が凸関数であるとき、最適化問題は凸最適化問題と呼ばれます。凸計画問題では、局所的な最適解が大域的な最適解に一致し、局所的に目的関数が小さくなる方向へ動き続けることで大域的な最小解まで到達できる比較的やさしい連続最適化問題です。これに対して、非凸最適化問題では局所的な努力では局所的な最小解までしか到達できず、大域的な最小解を計算するのは困難とされています。凸計画問題はそれ自身で実社会への非常に多くの応用があるし、より困難な非凸最適化問題や離散最適化問題を解くための道具としても重要な役割を果たしています。

人生をこのような単純な最適化問題で記述することはできません。ほとんどの目標は実数値では表せないでしょうし、決定も n 個の決定変数で制御することはできないでしょう。ましてや、局所的な努力で大域的な最適解に到達できるほど単純ではありません。そ

こじま まさかず

東京工業大学 大学院情報理工学研究所

〒152-8552 目黒区大岡山 2-12-1-W 8-29

れでも、さまざまな目標を数え上げることはできます。可能な決定の範囲を設定することや、よりよい決定を模索することができます。このような過程を通じて、本当にやりたいことに目的を絞り込むことや、冷静で合理的な判断に基づいたよりよい決定が可能になるのではないのでしょうか。

3. 君の目的は何ですか？

夏の修士入試の直前にこの原稿を書き始めました。面接では、しばしば、“大学院に入る目的は？”，あるいは，“卒業後の将来の目標は？”と質問します。予期したこの質問に，“学部時代の勉強では不十分で、大学院でより高度な研究をしたい”というような典型的な答えが返って来ます。具体的に長期目標を挙げることができる学生は少なく、大半の学生は定まっています——多くの場合、だから大学院へ進むことを選んだのでしょう。彼らは真剣に自分の人生を意識しているのでしょうか？しかし、学生が“先生の人生の目標は何ですか？”と逆襲したとすると、具体的に即答できるのでしょうか。我々は目標、目的を持っているのですが、それらは曖昧で、明確に記述するのは容易ではありません。一人の個人をとっても多目的だし、その個人が集まった複雑な組織ともなれば目的を具体的に定めて全員の合意を得るのは至難の業でしょう。時間とともに変化をします。短期目標、中期目標、長期目標といろいろあります。国立大学の独立行政法人化に関わってこられた方は、大学の“中期目標”をいやになるほど見聞きしてきたことでしょう。

実生活では、明確な目的を意識することなく、前もって決められた手順、習慣にしたがって行動し、さまざまなことをやってのけています。朝起きて仕事に出かけます。時間が来れば昼食をとります。それでも、今日は何をしよう、今月中に論文を仕上げようと目的、目標を定めるでしょう。目的、目標を設定しない限り、“最適化”は始まりません。それらを明確にすることはあらゆる場面で最も重要なことでしょう。目的、目標を明確にしないで、手段やアルゴリズムを論じる人たちがいます。意外にも数学を専門とする研究者がそのような議論を開始したのに何回か遭遇しました。まず、何をやりたいのかで、次に、それを達成するための手段の話をしましょう。

4. 理論と応用

論文発表会で“どのような応用があるのですか”と

の質問がしばしば出ます。理論家は常に応用を意識すべきでしょうか。数理計画を工学としてとらえれば答えは“yes”だし、数学としてとらえれば“not necessary”でしょう。しかし、そんなに簡単な話ではありません。まず、応用という言葉が曖昧です。多くの場合、質問者の意図は工学的に実社会の進歩に貢献しますかとの意味でしょう。私の研究に関連していくつかの例を挙げましょう。私の学位論文、および、その直後の研究は相補性と不動点アルゴリズム (Brouwer や角谷の不動点を区分的線形近似を用いて解く狭い意味での不動点アルゴリズム) に関するものでした。一般の非線形計画問題の Karush-Kuhn-Tucker 条件が相補性問題に帰着されます。また、経済均衡等から生じる非線形方程式系の解が不動点アルゴリズムで計算できます。応用はあります。1960年代から1970年代後半にかけて多くの研究者がこのテーマの研究に携わり、大量の論文が生産されました。しかし、現在では、当時の不動点アルゴリズムは死滅してしまっています。理由は、非線形計画問題を相補性問題に帰着して解くことなどはしないし、数理経済では均衡の存在は議論するが数値計算にはほとんど興味がなかったことにありました。つまり、応用先での需要がなかったのです。上述した応用という側面からは不合格でしょう。しかし、後述するように、相補性と不動点アルゴリズムを理論的に支えるホモトピー法 (連続変形法) という考え方は私の将来のより重要な研究へと結びついています。

1978~1979年に Wisconsin 大学数学研究所に留学した際に非線形計画問題の解の安定性に関する研究をしています。これは理学的な色彩の強い仕事で直接は工学的な応用と結びついていません。非線形計画問題の解の安定性に関する基本的な仕事です。ここでは、応用という側面より普遍的な理論そのものが評価されています。

1984年に Karmarkar による内点法が発表されて、それを刀根薫先生が日本に紹介して下さいました。研究テーマの枯渇状態にあった私は、水野眞治君、吉瀬章子さんを誘って、内点法の研究を始めました。ここでは OR の最も基本的モデルである線形計画問題の数値解法が対象です。したがって、応用は？と聞かれる心配はありません。数年後に3人で主双対内点法を発表しています。この方法は、Karmarkar の内点法に双対性・相補性を持ち込んで作った非線形方程式系を、上述の死滅した不動点アルゴリズムで骨幹をなし

ていたホトトピー法で解いていると解釈できます。この主双対内点法は超大規模な線形計画問題を高速に解く方法として定着しています。

1990年代に入って半正定値計画がはやり始めました。この問題は線形計画問題の変数ベクトルを対称行列変数に拡張した問題で、線形計画問題の他、凸2次計画問題をも含む一般的な凸最適化問題です。当時は、制御分野への応用はありましたが数学的な色彩の強い最適化問題として登場しました。しかし、面白いことに、主双対内点法がこの問題に拡張され、規模の大きい半正定値計画問題が解けると分かるにつれて、応用がどんどん増えていきました。現在では、ロボasts最適化問題や、より複雑な非凸最適化問題を解くための強力な道具として使う研究（半正定値計画緩和）も行われています。

さて、理論家はどんな数理モデルを対象として研究すれば良いのでしょうか、誰でも半永久的に残るような研究をしたいと思っていることでしょうか。そのためには、理論家は工学的に広い分野をカバーする普遍的な数理モデルを対象に選ぶことが重要だと思っています。普遍性を欠き、特殊な問題になるほど応用が問われるでしょう。不動点アルゴリズムが消滅してしまったのは、そこでの数学が先行して、工学的な応用が追いついて行かなかったことによるのでしょうか。

5. アルゴリズムの提案と実装

数理計画に限ったことではありませんが、ソフトウェアを公開し、それを維持するのは大変な仕事です。膨大な時間とマンパワーを必要とします。ここでは、提案したアルゴリズムのために行う計算実験と不特定多数のユーザを対象として公開するソフトウェアの区別をしなければなりません。前者は比較的容易な仕事です。解くべき問題のデータの疎性を無視し、MATLAB等の簡便な言語を使ってプログラムを組むことも許されます（数多くの本格的なソフトウェアがMATLABを用いて構築され、公開されていることも付け加えておきます）。実際、preliminary numerical resultsと称して、乱数を使った小規模な問題に対して、開発したアルゴリズムが有効に働くことを示す場合も多く見受けられます。より大規模な問題を解くためには、データの疎生、数値的安定性等のさまざまな要因に気を配らなくてはなりません。さらに、プログラムをソフトウェアとして公開する場合には、ユーザインタフェースを作り、マニュアルも

書かなければなりません。残念ながら、それだけの努力に対して報いるものが少ないのが現状です。つまり、優れたソフトウェアを研究業績として高く評価するという慣習が定着していません。皮肉な見方をすると、提案されたアルゴリズムのほとんどはソフトウェアにするだけの価値がないと言えるのかもしれませんが、いうまでもなく、優れたソフトウェアを残すことは非常に重要です。ソフトウェアは最適化の“最終生産物”、実際の応用とのインタフェースです。研究者を優れたソフトウェア作成に引きつけるには、ソフトウェアの評価を高める必要があると感じています。

主双対内点法を提案した数年後に、当時、修士の学生であった斉藤努君が主双対内点法を計算機に実装しました。この実装はかなり計算効率のよいものでしたが、彼が卒業してしまった後、ソフトウェアとしてそれを維持する努力をしませんでした。このことは、いまでも心残りです。もし、彼の作ったソフトウェアを維持し、改良することができていれば、米国の研究者によって実装されたソフトウェアと競っていたかもしれません。しかしながら、当時の私の研究室にそれだけの力はありませんでした。この苦い経験は提案したアルゴリズムの実装、ソフトウェア化が重要であることを私に教えてくれました。

進藤晋君、原辰次先生とともに主双対内点法を半正定値計画問題へ拡張したときには、幸運にも博士課程に藤澤克樹君がいました。彼は修士時代に組合せ最適化問題に対するアルゴリズムを計算機へ実装した経験を持っています。ソフトウェアを作ることに研究の価値を見い出しています。まず、Mathematicaを用いて半正定値計画法に対する主双対内点法をプログラム化しました。オブジェクト指向を勉強しながら、このプログラムをC++に移植したのが、現在のSDPA (Semidefinite Programming Algorithm) の原型です。この段階ではまだ計算実験用のプログラムでしかありませんでした。その後、藤澤克樹君、中田和秀君を中心として、データの疎性の有効利用技術が組み込まれ、大規模な半正定値計画問題を高速に、かつ、安定して解くことができるようになりました。さらに、Mituhiro Fukuda君、山下真君、二方克昌君、小林和博君も加わってSDPAの維持、改良を続けています。他とソフトウェアと競合する状況で、ソフトウェアを維持することは非常に大変な仕事ですが、我々のソフトウェアが使われているのを知るの大きな喜びです。

6. オリジナリティと評価基準

卒業論文や修士論文の発表会で“君の研究のオリジナリティは何かね”といった質問をよく耳にします。オリジナリティは“他人が考えつかないような斬新さ”とでもいった意味でしょうか。でも、曖昧です。先の質問に対して学生が答えた後に、教授が“それは当たり前ではないですか”と指摘し、一瞬の重苦しい沈黙が流れる場面にたびたび遭遇します。オリジナリティがあるか否かの評価は人によってさまざまです。まして、研究歴に大差がある大教授と学生では全く異なるでしょう。たいていの場合、言われてみれば当たり前ということが多いのです。あるいは、その学生が導出した経緯には斬新なアイデアが含まれてはいるのですが、結果は当たり前で、別な見方からは自明に導出されるということもしばしば起こります。

では、論文で一番大切なのはオリジナリティでしょうか。少なくとも論文の目的はオリジナリティではありません。論文が関与する分野、さらに、より広い学術の進歩への貢献、インパクトを狙っています。オリジナリティはその一側面にすぎません。オリジナリティがなくてもインパクトを与えることはできるでしょうし、オリジナリティがあってもインパクトを与えるとは限りません。例えば、上述したソフトウェアでは、オリジナリティという観点よりも、汎用性、計算効率、数値的安定性、使い勝手等がより重要な評価基準でしょう。ソフトウェアの背後にあるアルゴリズムやプログラミング技術のオリジナリティは、それらにプラスに働かない限り意味がありません。

7. 一般化と拡張の功罪

理論家はすぐに一般化しますが、それがインパクトを与えるとは限りません。さらに、それがマイナスとして働くこともあります。主双対内点法のときの経験を書きましょう。節4で述べたように、最初的主双対内点法は線形計画問題を対象として書きました。

その後の改良版、および、ポテンシャル減少主双対内点法は線形相補性問題を対象として書きました。線形相補性問題は線形計画問題凸2次計画問題を含む一般的な数理計画問題ですが、線形計画問題と比較するとポピュラではありません。改良版で理論計算量を高めたこと、およびポテンシャル関数を主双対内点法に導入したことで内点法の発展に貢献しています。この際、線形相補性問題へ拡張したことも理論家の間では評価されたようですが、線形計画に携わる他の多くの研究者への浸透度を低めてしまったように感じています。野間俊人君を含めて、主双対内点法をさらに非線形相補性問題に拡張しています。この問題は凸計画問題までを含むより一般的な問題ですが、研究者の数も少なく、数年後から始まった凸計画問題に対する主双対内点法への拡張では無視されてしまったようです。先の例が示しているように、需要のほとんどない一般化・拡張はあまり意味がありません。一般化・拡張が大きな意味を持つのは拡張先での需要に大きく依存しています。しかしながら、多くの場合、一般化あるいは拡張した時点でそれが有用か否かは見えません。前述したのは効果が上がらなかった例ですが、主双対内点法を半正定値計画問題に拡張したのは成功例です。いずれの場合にも拡張した時点では先が見通せた訳ではありません。最近、村松正和君との共同論文で半正定値計画緩和を対称錐上の多項式最適化問題に拡張しました。これがどのような評価を受けるかを楽しみにしています。

8. おわりに

数理計画法の研究のさまざまな話題を私の経験を交えて書いてきました。どの節でも多様な見方があることを指摘したのが主で、特に、結論はありません。私の基本的な考えを一つ選ぶとすると、“まず、何をしたいか、次にそれを達成するための最良の手段の選択”です。この特集に誘って下さった成蹊大学の池上敦子先生にお礼申し上げます。