

數值解析法講座 5 基礎篇

基礎編

最適化手法

吉川和広*

1. まえがき

最適化の手法は数理計画法 (mathematical programming)ともいわれ、非常に広い応用範囲をもつ数学的手法である。ところで、この最適化の問題の歴史は、数学の歴史と同じ程度に古い。この種の問題に対する最初の系統的な試みは、ニュートン、ラグランジュ、コーチーらの名のもとに、微分学の発達に端を発している。しかしその後、実質的な進展はほとんどみられなかつたが、今世紀の中頃になって電子計算機が利用できるようになり、また、決定論の問題 (decision problem) の解法に対する要求が強くなるにつれて急激な発展をみるとなつた。

そして、最近発展のめざましいシステム設計、シンセシスなどと呼ばれる、いわゆる“創り出す”ことに関係する分野には、必ず最適化の問題があらわれる。

最適化の手法は、本来実際家のための手法であり、ダンチッヒ (G.B. Dantzig) の線形計画法、ベルマン (R. Bellman) の動的計画法、ポントリヤーギン (L.S. Pontryagin) の最大原理については理論が体系的に展開されている。これに対して、非線形計画法に関する研究としては、クーン (H.W. Kuhn) とタッカー (A.W. Tucker) の有名な理論があり、凹関数の場合の理論は一応体系づけられているが、それ以外の制約条件を陽な形で扱う手法は、どれも一般的に成功していないようである。

制約条件がない場合の非線形問題に対する解法は、直接探索法、傾斜法、ニュートンの反復法等、数多くの試みによって成功しているが、これらの方法の重要な応用として、制約条件のある非線形計画法の問題を、制約条件のない場合の非線形問題にうまく変換して解く方法が研究されるようになってきた。このような手法はSUMTと呼ばれている。

このように、広範囲にわたる最適化手法を古典から現

* 正会員 工博 京都大学教授 工学部土木工学科

在に至るまで、すべてを網羅して紹介することは紙数の制限によりとうてい不可能である。したがって、ここでは、線形計画法、動的計画法、最大原理および非線形計画法の基礎的な部分に焦点をしぼり、できる限り数値解法を例題によって示してゆくこととした。そして、より高度な理論とその拡張に関しては、末尾の参考文献にゆずらざるを得なかった。

2. 線形計画法

(1) 線形計画法の定式化

線形計画法 (linear programming) とは、ある制約条件 (constraints) にしたがう数多くの変数の相互作用を取り扱う最適化のための手法である。このような問題を解くにあたっては、目的とされるもの、たとえば利益・費用・生産量その他有効さの尺度となるものが、ある制約条件のもとに最適な方法で達成されなければならない。この場合の制約条件としては、政府の要請、法律上の制限、経済的な制約、生産活動の状況、資源上の制約、輸送上の制約などがあげられる。

線形計画法の問題は以下のように定式化される。

目的関数

制約条件

$$\left. \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \leq S_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \leq S_2 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n \leq S_m \\ x_1, x_2, \dots, x_n \geq 0 \end{array} \right\} \quad (2)$$

のもとで最大化すること

上式から明らかなように、線形計画法とは、正または0の値をとる、数個の連続変数に関する連立1次不等式の制約条件のもとで、それらの変数に関するある1次式(目的関数 objective function)を最大化することである。

実際に線形計画法の問題を解くにあたっては、式(2)の不等式を等式に直す必要がある。すなわち、式(2)の m 個の不等式のおのおのの両辺の差を $x_{n+1}, x_{n+2}, \dots, x_{n+m}$ とすれば

目的関数

$$f(x) = c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n$$

制約条件

$$\left. \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n + x_{n+1} = S_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n + x_{n+2} = S_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n + x_{n+m} = S_m \\ x_1, x_2, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+m} \geq 0 \end{array} \right\} \dots (3)$$

式(1)は、 $x_1, x_2, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+m}$ に関する一次式で、たまたま x_{n+1}, \dots, x_{n+m} の係数が 0 になったものと考えればよい。 x_{n+1}, \dots, x_{n+m} をスラック (slack) という。

(2) シンプレックス法

シンプレックス法 (simplex method) による計算手順を説明するために、次の線形計画法の問題を考えてみよう。

目的関数

制約条件

$$\left. \begin{array}{l} 0.9x_1 + 2.0x_2 + 2.2x_3 + 2.0x_4 \leq 24 \\ 1.5x_1 + 1.0x_2 + 1.8x_3 + 2.0x_4 \leq 23 \\ 1.1x_1 + 1.5x_2 + 2.4x_3 + 2.5x_4 \leq 25 \end{array} \right\} \dots (5)$$

式(5)にスラックを添加すると

ところで、表-1 のステップ1の行列は、第1行に目的関数の係数の負値ベクトルを、第2~4行には式(6)の係数行列をまとめて記入することにより作成したものである。この表をシンプレックス表(simplex tableau)といい、線形計画法の計算手順を方式化したものである。

シンプレックス表のステップ1において x_1, x_2, x_3, x_4 は任意に定めることができる。これらを任意に1組定めたうえで、式(6)によって x_5, x_6, x_7 を定めれば、 x_1, \dots

x_7 が解となる。いま $x_1=x_2=x_3=x_4=0$ と定めると、もし S 列の数値が、すべて非負であるならば、 $x_5=24$, $x_6=23$, $x_7=25$ となる。このような式 (6) の制約条件を満足する x_1, \dots, x_7 を実行可能解 (feasible solution) という。

次に、このようにして求めた実行可能解と、それ以外の実行可能解との得失を比較することを考えよう。このためには、シンプレックス表の各ステップの第1行をみればよい。というのは、この行は、シンプレックス基準(simplex criterion) $w_j = z_j - c_j$ を表わし、すべての j について $w_j \geq 0$ が成立するならば、その実行可能解は最適解(optimum solution)となることがダンツィヒ(G.B. Dantzig)によって証明されているからである。

ステップ1の S 列がすべて非負であること、すなわち、この形が1つの実行可能解を表わしていることを確認したうえで、 w_j に負の数がないかを調べる。この場合、 $-8.5, -13, -15, -16$ の4つがある。このなかで絶対値の最も大きいもの (most negative), すなわち、 x_4 列の -16 に注目し、 x_4 列をマークする。次に x_4 列と S 列との数字から θ 列を

$$24/2.0=12, \quad 23/2.0=11.5, \quad 25/2.5=10$$

によってつくり、その大小を比較する。この場合は x_1 行に対応する 10 が最小であるから、 x_1 行をマークする。

この方法によって、ステップ2の基底に新しく取り入れるべき変数 x_4 、代わりに基底から追い出すべき変数 x_7 がきまる。すなわち、ステップ2の基底は x_5, x_6, x_4 となる。したがって、ステップ2の基底の欄にこれを記入し、これに伴う消去変換を行なう。

表-1 シンプレックス 表

ステップ	基底	S	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	θ
1	$f(x)$	0	-8.5	-13	-15	-16	0	0	0	
	x_5	24	0.9	2.0	2.2	2.0	1	0	0	12
	x_6	23	1.5	1.0	1.8	2.0	0	1	0	11.5
	x_7	25	1.1	1.5	2.4	2.5	0	0	1	10
2	$f(x)$	160	-1.46	-3.4	0.36	0	0	0	6.4	
	x_5	4	0.02	0.8	0.28	0	1	0	-0.8	5
	x_6	3	0.62	-0.2	-0.12	0	0	1	-0.8	
	x_4	10	0.44	0.6	0.96	1	0	0	0.4	16.7
3	$f(x)$	177	-1.375	0	1.55	0	4.25	0	3	
	x_2	5	0.025	1	0.35	0	1.25	0	-1	200
	x_6	4	0.625	0	-0.05	0	0.25	1	-1	6.4
	x_4	7	0.425	0	0.75	1	-0.75	0	1	16.5
4	$f(x)$	185.8	0	0	1.44	0	4.8	2.2	0.8	
	x_2	4.84	0	1	0.352	0	1.24	-0.04	-0.96	
	x_1	6.4	1	0	-0.08	0	0.4	1.6	-1.6	
	x_4	4.28	0	0	0.784	1	-0.92	-0.68	1.68	

$$\begin{aligned}
&= \max \{g_3(0) + f_2(10), g_3(1) + f_2(7), \\
&\quad g_3(2) + f_2(4), g_3(3) + f_2(1)\} \\
&= \max \{11.36, 12.70, 13.35, 12.70\} = 13.35
\end{aligned}$$

同様にして、前掲の $f_2(4)=4.8$ の計算は

$$\begin{aligned}
f_2(4) &= \max_{0 \leq x_2 \leq 2} \{g_2(x_2) + f_1(4 - 2x_2)\} \\
&= \max \{g_2(0) + f_1(4), g_2(1) + f_1(2), \\
&\quad g_2(2) + f_1(0)\} \\
&= \max \{4.0, 4.4, 4.8\} = 4.8
\end{aligned}$$

また、 $f_1(0)=0$

これより、最適生産数量は $x_1=0, x_2=2, x_3=2$ となる。

以上により、一次元配分過程の動的計画法による解法を明らかにしたが、二次元配分過程の問題は、ラグランジュ乗数を用いて次元を節減することにより、数多くの一次元配分過程の問題を解くことに変換することができる。さらに、一般の多次元配分過程 (multi-stage allocation process) の問題においては、次元の増加に伴う困難な問題を克服する方法として、逐次近似法の助けをかりることが行なわれている。

(2) 変分問題と動的計画法

汎関数

$$J(y) = \int_a^b F(x, y, y') dx \quad (18)$$

を最小にする変分問題への動的計画法のアプローチについて考えてみよう。

ここに関数 y は、 $y(a)=c$ を初期条件とする。最小値は x の初期値 a と y の初期値 c の関数である。そこで

$$f(a, c) = \min_y J(y) \quad (19)$$

について考える。最適性の原理により次の関数方程式が得られる。

$$f(a, b) = \min_{y[a, a+\Delta]} \left[\int_a^{a+\Delta} F(x, y, y') dx + f\{a+\Delta, c(y)\} \right] \quad (20)$$

$y(a)=c$ なる条件のもとで、 $[a, a+\Delta]$ での $y(x)$ の選択は、 $[a, a+\Delta]$ での $y'(x)$ の選択と解釈することができる。もし Δ が小であれば、 $[a, a+\Delta]$ での $y'(x)$ の選択は、 $y'(x)$ が連続と仮定したときの $y'(a)$ の選択に等しい。したがって、

$$\left. \begin{aligned}
&\int_a^{a+\Delta} F(x, y, y') dx = F\{a, c, y'(a)\} \Delta + O(\Delta) \\
&c(y) = a + y'(a) \Delta + O(\Delta)
\end{aligned} \right\} \quad (21)$$

と書いて、 $v \equiv y'(a)$ とすると式 (20) は

$$f(a, b) = \min_v [F(a, c, v) \Delta + f(a+\Delta, c+v \Delta)] + O(\Delta) \quad (22)$$

のように書ける。 $\Delta \rightarrow 0$ とすると、非線形微分方程式

$$-\frac{\partial f}{\partial a} = \min_v \left[F(a, c, v) + v \frac{\partial f}{\partial c} \right] \quad (23)$$

が限界内で生ずる。初期条件は、すべての c に対して $f(b, c)=0$ で、式 (23) における方程式は $a < b$ に対して成立すると考えられる。

式 (22) において、積分の下限 a を x にとり、 v を y' で表わし、これをべき級数に展開すると

$$\begin{aligned}
f(x, y) &= \min_{y'} \left[F(x, y, y') \Delta + f(x, y) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial f}{\partial x} \Delta + \frac{\partial f}{\partial y} y' \Delta + \dots \right] \quad (24)
\end{aligned}$$

ここで $\Delta \rightarrow 0$ とすると、これは次の非線形偏微分方程式となる。

$$0 = \min_{y'} \left[F(x, y, y') + \frac{\partial f}{\partial x} + y' \frac{\partial f}{\partial y} \right] \quad (25)$$

この方程式は、次の式 (26), (27) で表わされる 2 つの方程式と同等である。

$$F_{y'} + \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \quad (26)$$

$$F + \frac{\partial f}{\partial x} + y' \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \quad (27)$$

式 (26) を x について偏微分すると

$$\frac{d}{dx} F_{y'} + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} y' = 0 \quad (28)$$

式 (27) を y について偏微分すると

$$\begin{aligned}
F_y + F_{y'} \frac{\partial y'}{\partial y} + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} y' \\
+ \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y'}{\partial y} = 0
\end{aligned} \quad (29)$$

これら 2 つの方程式は、式 (26) と結びつけると

$$\frac{d}{dx} F_{y'} - F_y = 0 \quad (30)$$

となり、変分問題におけるオイラーの方程式 (Eular equation) が得られる。

最小値のために最も重要な 2 つの条件は、ルジャンドル (Legendre) の条件とワイエルシュトラス (Weierstrass) の条件であるが、ルジャンドルの条件

$$F_{y'y'}(x, y, y') \geq 0 \quad (31)$$

および、ワイエルシュトラスの条件

$$F(x, y, z') - F(x, y, y')$$

$$-(z' - y') F_{y'}(x, y, y') \geq 0 \quad (32)$$

はいずれも成立している。ここに、 $z(x)$ は極値関数 $y(x)$ と異なった関数、 $z'(x)$ は $z(x)$ の導関数である。

かくして変分問題は、最適性の原理により動的計画法の問題として定式化されることが明らかとなった。

以上、動的計画法の基本的な問題にしぼって説明したが、動的計画法の問題は、① 配分過程、② 平滑過程 (smoothing process), ③ ボトルネックの問題 (bottleneck problem), ④ 決定過程 (decision process), ⑤ 制

御過程 (control process) などに分類され、その体系化がはかれている。

4. 最大原理

(1) ポントリヤーギンの最大原理

n 個の状態変数で記述できる n 次のプロセスを考えてみよう。

a) 状態方程式

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(\mathbf{x}(t), \mathbf{m}(t), t) \quad \dots \dots \dots (33)$$

$$i=1, 2, \dots, n$$

ここに \mathbf{x} はプロセスの状態ベクトルであり、 \mathbf{m} は制御ベクトルである。

b) 初期条件

$$x_i(t_0) = x_i^0 \quad \dots \dots \dots (34)$$

c) 制御ベクトルに関する束縛条件

$$g_j(\mathbf{m}(t)) \leq 0 \quad \dots \dots \dots (35)$$

d) 積分範囲

$$t_0 \leq t \leq t_f \quad \dots \dots \dots (36)$$

ただし、 t_f は指定されていてもいなくてもよい。もし指定されていないならば、一般には最終状態が指定されるはずであるから、その状態に到達する時間を t_f (未知) と考えればよい。

e) 評価関数

$$P = \sum_{i=0}^n b_i x_i(t_f) \rightarrow \min_{\mathbf{m}(t)} \text{または } \max_{\mathbf{m}(t)} \dots \dots \dots (37)$$

自動制御工学の分野において、最適制御の問題は、① 最小時間制御、② 終端制御、③ 最終積分制御、という基本的な 3 種類の問題に分類されて、取り扱かわれている。ところで、式 (37) の b_i は、これら物理的に異なる問題を数学的に統一された問題に変換するとき既知となる定数である。

最小時間制御・終端制御および最小積分制御ではすべて

$$P = 1 \times x_0(t_f) + 0 \times x_1(t_f) + 0 \times x_2(t_f) + \dots + 0 \times x_n(t_f)$$

であるから、 $b_i=0$ となる。この評価関数 P をポントリヤーギン関数と呼んでいる。

次に、ポントリヤーギンの最大原理 (Pontryagin's maximum principle) について説明しよう。

$\mathbf{m}^*(t)$, ($0 \leq t \leq T$) を許容制御ベクトルとする。もし、 $\mathbf{m}^*(t)$ が最適制御ベクトルであるならば、すなわち、ポントリヤーギン関数を最小または最大にするならば、 $\mathbf{m}^*(t)$ および対応する状態ベクトル $\mathbf{x}^*(t)$ について、次の条件を満足するゼロでない連続ベクトル $\mathbf{p}^*(t)$, ($p_0^*(t), p_1^*(t), \dots, p_n^*(t)$) が存在することが必要で

ある。

a) $\mathbf{x}^*(t)$, $\mathbf{p}^*(t)$ は次の微分方程式の解である。

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_i^*(t) &= \frac{\partial H}{\partial p_i} [\mathbf{x}^*(t), \mathbf{p}^*(t), \mathbf{m}^*(t), t] \\ \dot{p}_i^*(t) &= -\frac{\partial H}{\partial x_i} [\mathbf{x}^*(t), \mathbf{p}^*(t), \mathbf{m}^*(t), t] \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (38)$$

ここで、ハミルトニアン (Hamiltonian) H は

$$\left. \begin{aligned} H[\mathbf{x}^*(t), \mathbf{p}^*(t), \mathbf{m}^*(t), t] \\ = \sum_{i=0}^n p_i^*(t) f_i[\mathbf{x}^*(t), \mathbf{m}^*(t), t] \\ \mathbf{x}^*(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (39)$$

b) ($0 \leq t \leq T$) の任意の t において $H[\mathbf{x}^*(t), \mathbf{p}^*(t), \mathbf{m}^*(t), t]$ は、 $\mathbf{m}(t)=\mathbf{m}^*(t)$ のとき最大または最小になる。ポントリヤーギン関数 $P \rightarrow \min$ の場合

$$\begin{aligned} \max H[\mathbf{x}^*(t), \mathbf{p}^*(t), \mathbf{m}(t), t] \\ = H[\mathbf{x}^*(t), \mathbf{p}^*(t), \mathbf{m}^*(t), t] \end{aligned} \dots \dots \dots (40)$$

ポントリヤーギン関数 $P \rightarrow \max$ の場合

$$\begin{aligned} \min H[\mathbf{x}^*(t), \mathbf{p}^*(t), \mathbf{m}^*(t), t] \\ = H[\mathbf{x}^*(t), \mathbf{p}^*(t), \mathbf{m}^*(t), t] \end{aligned} \dots \dots \dots (41)$$

c) ① 終端状態 $\mathbf{x}(T)$, $(x_1(T), x_2(T), \dots, x_n(T))$ は指定、しかし終端時刻 T は未定の場合。このときは $0 \leq t \leq T$ にわたり、最適制御において $\max H=0$ ($\min H=0$) となる。

② 終端状態 $\mathbf{x}(T)$, $(x_1(T), x_2(T), \dots, x_n(T))$ および終端時刻 T がともに指定の場合。このときは $0 \leq t \leq T$ にわたり、最適制御において、 $\max H=\text{const.}$ ($\min H=\text{const.}$) となる。

③ 終端状態の一部、すなわち $(x_1(T), x_2(T), \dots, x_k(T))$ ($k < n$) が指定され、終端時刻 T も指定されている場合。このときは $0 \leq t \leq T$ にわたり最適制御においては、 $\max H=\text{const.}$ ($\min H=\text{const.}$) で、しかも指定されていない終端状態変数に対応する i について

$$p_i(T) = 0, i=k+1, k+2, \dots, n \dots \dots \dots (42)$$

④ 終端時刻 T を指定し、終端状態はまったく指定しない場合。このときは $0 \leq t \leq T$ にわたり最適制御においては、 $\max H=\text{const.}$ ($\min H=\text{const.}$) で、しかも

$$p_1(T) = p_2(T) = \dots = p_n(T) = 0 \dots \dots \dots (43)$$

である。

他方、実際に最大原理を用いて問題を解く立場から考えると、求める変数としては $n+1$ 個の x_i ($i=0, 1, 2, \dots, n$), $n+1$ 個の p_i ($i=0, 1, 2, \dots, n$) および 1 個の制御変数 $m(t)$ で合計 $(2n+3)$ 個がその数となる。制御変数が 1 個の場合は式 (40) は 1 個の方程式を、 n 個の場合には n 個の方程式を与えると考えてよい。たとえば、制御変数 $m(t)$ に束縛条件がない場合には、式 (40) は $\partial H / \partial m = 0$ とおきかえることができる。式 (41) に

ついても同様である。この $(2n+3)$ 個の方程式のうち微分方程式の数は $(2n+2)$ 個であるから、解を求めるためには $(2n+2)$ 個の境界条件が必要となる。ところで補助変数 $p(t)$ に関する微分方程式は次であるから、 $p(t)$ の境界条件でその要素の 1 個は任意にとってよい。したがって、境界条件 $(2n+2)$ 個のうち 1 個減り、合計として $(2n+1)$ 個が本質的な境界条件の個数となる。

(2) 離散型最大原理

ポントリヤーギンの最大原理は、時間に対して連続なプロセスの最適制御問題を解くために有効な手法であるが、その最大原理を拡張して、時間に対して不連続なプロセスおよび多段決定過程とみられるプロセスなどの最適制御問題の解法に適用可能な離散型最大原理 (discrete maximum principle) をケイツ (S. Katz) が開発した。

ケイツは、まず標準的な問題として、図-1 に示した多段決定過程のプロセスを考えた。

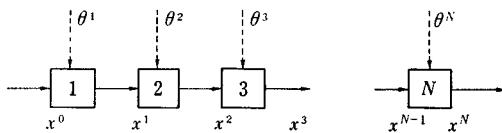


図-1 プロセスの概念図

図-1 で、 x^i は状態ベクトルで $x^i = (x_1^i, x_2^i, \dots, x_s^i)$ で与えられる。また、 θ^i は操作変数である。そうすると各段階における状態ベクトルと操作変数との関係は、一般に次の差分方程式で与えられる。すなわち

a) 状態方程式

$$x^i = F_i(x^{i-1}, \theta^n) \quad (44)$$

$$(i=1, 2, \dots, s, n=1, 2, \dots, N)$$

b) 初期条件

$$x_1^0 = a_i \quad (45)$$

各段階における式 (44), (45) および θ^n を与えれば、 x^n は一義的に定められる。そこで、次の評価関数 J を最小にするためには、各段階における操作変数 θ^n をいかにすればよいかを求ることになる。

$$J = x_1^N \rightarrow \min \quad (46)$$

この問題に対して、まず s 個の補助変数 $z_1^n, z_2^n, \dots, z_s^n$ を導入する。そして、この補助変数は次の差分方程式を満足するものとする。

$$z_i^{n-1} = \sum_{j=1}^s \frac{\partial F_j(x^{n-1}, \theta^n)}{\partial x_i^{n-1}} z_j^n \quad (47)$$

また、補助変数の境界条件は次式で与えられる。

$$z_i^n = \begin{cases} 1 & (i=1) \\ 0 & (i \neq 1) \end{cases} \quad (48)$$

そして問題は、各段階 n において θ^n の関数を最小にするよう

$$\sum_{j=1}^s z_j^n F_j(x^{n-1}, \theta^n) \rightarrow \min_{\theta^n} \quad (49)$$

より操作変数 θ^n を決定することとなる。以上が標準的な問題に対する離散型最大原理の概要であるが、この原理は表-2 のような広い範囲の問題にも適用できるよう容易に一般化される。

ケイツの離散型最大原理をさらに拡張したのがファン (L.T. Fan) およびワン (C.S. Wang) の離散型最大原理である。ファンおよびワンは、一般の複雑な多段決定過程の問題は、① 連結型段階、② 分離型段階、③ 結合型段階、④ 結合分離型段階、の 4 種類の基本的な型を適当に結合することによってあらわすことができるし、それについての最適制御問題の解法を示している。

(3) 離散型最大原理と動的計画法の比較

離散型最大原理による解法とは、数学的には差分方程式の境界値問題を解くことである。この場合、各段階でハミルトニアン H^n を最大または最小にするように決定変数を求ることと定式化される。

N 段階決定過程で r 個の状態変数からなるプロセスを例にとって、これに離散型最大原理を用いると、まず N 個の段階について一連の最適な決定変数を計算することから始め、この最適な方式を前に得た計算結果をもとに修正し、与えられた状態変数の境界条件を満足するように反復計算を進めることになる。

他方、動的計画法による解法は、最適性の原理より導かれる関数方程式を用いて列挙法を行なうことである。すなわち、まず最初の段階で r 個の変数のすべての格子

表-2

評価関数 $J = \sum_{i=1}^s c_i x_i^N \rightarrow \max$ の場合	補助変数の境界条件は $z_i^n = c_i$ となる
評価関数 $x_i^N \rightarrow \max$ の場合	式 (49) を $\sum_{j=1}^s z_j^n F_j(x^{n-1}, \theta^n) \rightarrow \max_{\theta^n}$ に変更
プロセスの状態方程式 $x_i^N = F_i(x^{n-1}, n, \theta^n)$ の場合	状態変数を 1 個増加する $n = x_{s+1}^N$ この結果 $(x_1^n, x_2^n, \dots, x_s^n, x_{s+1}^n)$ の ($s+1$) 次の状態ベクトルの標準形に変換される。状態変数の方程式および初期条件は、 $x_{s+1}^n = x_{s+1}^{n-1} + 1$ $x_{s+1}^0 = 1$
評価関数が $\phi(x_j^N) \rightarrow \min$ の場合	状態変数も 1 個増加し、 $x_{s+1}^n = \phi(x_j^n) = \phi(F_j[x^{n-1}, \theta^n])$ 初期条件は $x_{s+1}^0 = \phi(a_j)$ 評価関数 ($x_{s+1}^N \rightarrow \min$)

点にわたって最適政策を決定し、かつ各格子点における最適解を記憶し順次つぎの段階へと進んでゆく。このようにして、 N 段階まで計算を進めることにより、ダイナミックテーブルが作成できる。次に、このテーブルを用いて与えられた境界条件を満足する最適解を N 段階目から順次逆に求めてゆく。

このように、両手法はそれぞれ特色があり、どちらがすぐれた手法であるかは一般にはいえないが、与えられた問題の状態変数や決定変数の数、プロセスの段階の数、使用する計算機の容量などによって、どちらの手法を用いたほうがよいかが決まつてくるであろう。

ともあれ、ハミルトニアン H^n の導入による汎関数の極値問題の解法の単純化、最適性の原理による計算量の減少化は、電子計算機の普及とあいまって、より現実的でより複雑な最適化問題を解くことを可能にしたといつてさしつかえないであろう。

5. 非線形計画法

(1) クーン・タッカーの定理による解法

非線形計画法 (non linear programming) という名前は、クーン・タッカー (H.W. Kuhn, A.W. Tucker) によって初めて使用されたものであり、不等式系の制約のもとで、必ずしも一次でない目的関数を最大または最小にすることを問題としている。すなわち

$$\left. \begin{array}{l} \text{目的関数} \quad f(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow \max \\ \text{制約条件} \quad g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \geq 0 \\ \quad \quad \quad x_j \geq 0 \\ \quad \quad \quad (i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, n) \end{array} \right\} \dots(50)$$

という形の問題である。

いま簡単のため、式 (50) を行列の記号を用いて書き改めると

$$\left. \begin{array}{l} f(\mathbf{x}) \rightarrow \max \\ \mathbf{G}(\mathbf{x}) \geq \mathbf{0}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{array} \right\} \dots(51)$$

となる。式 (50) において実行可能なベクトル全体の集合を実行可能集合 (feasible set) という。線形計画法の場合と違って、実行可能集合は、必ずしも凸集合ではない。実行可能なベクトルのなかで、目的関数 $f(\mathbf{x})$ を最大または最小にするベクトルを最適ベクトル、または解ベクトルという。

非線形計画法において、 $f(\mathbf{x}), g_1(\mathbf{x}), \dots, g_m(\mathbf{x})$ すべて凹関数 (concave function) の場合、これを concave 計画という。非線形計画法の一般的な解決はいまだに得られていないが、concave 計画に対しては多くの重要な結果が得られている。そのなかでも中心的な役割を果たしているのがクーン・タッカーの定理である。

a) クーン・タッカーの制約想定

(constraint qualification)

\mathbf{x}^0 を R の任意の境界点とすると

$$\left. \begin{array}{ll} g_i, \mathbf{x}^0 \cdot d\mathbf{x} > 0 & \text{もし } g_i(\mathbf{x}^0) = 0 \text{ ならば} \\ d\mathbf{x}_j \geq 0 & \text{もし } x_j^0 = 0 \text{ ならば} \end{array} \right\} \dots(52)$$

のような \mathbf{x}^0 からの任意の偏位 $d\mathbf{x}$ に対して、長さを十分微小にすれば、 $d\mathbf{x}$ は R 内にある。これはいいかえると、 $d\mathbf{x}$ が、 \mathbf{x}^0 を始点とする R 内のある微分可能曲線に \mathbf{x}^0 から引いた接線ベクトルの正の定数倍となっているということである。

このような制約を設けるのは、実行可能集合 R の境界点において、外向き尖点 (cusp) のような特異点の起ころを排除するためである。

b) クーン・タッカーの条件

式 (50) の最大化問題に対して、次のラグランジュ関数 (Lagrangian) を導入する。

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m u_i g_i(\mathbf{x}) \dots(53)$$

そして偏導関数を、次のように略記すると

$$\left. \begin{array}{l} L_{\mathbf{x}} = f_{\mathbf{x}} + \sum_i u_i g_{ix}, \quad L_{\mathbf{x}^0} = [L_{\mathbf{x}}]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^0, \mathbf{u}=\mathbf{u}^0} \\ L_{\mathbf{u}} = [g_1(\mathbf{x}), \dots, g_m(\mathbf{x})] \\ L_{\mathbf{u}^0} = [g_1(\mathbf{x}^0), \dots, g_m(\mathbf{x}^0)] \end{array} \right\} \dots(54)$$

ここに

$$f_{xj} = \frac{\partial f}{\partial x_j}, \quad g_{ixj} = \frac{\partial g_i}{\partial x_j} \dots(55)$$

連続的偏微分可能性とクーン・タッカーの制約想定のもとで式 (50) の最大化問題に対し、 R の境界上にある点 \mathbf{x}^0 が解ベクトルであるならば

$$\left. \begin{array}{l} \exists \mathbf{u}^0 \geq \mathbf{0}: L_{\mathbf{x}^0} \leq \mathbf{0}, \mathbf{x}^0 L_{\mathbf{x}^0} = 0 \\ L_{\mathbf{u}^0} \geq \mathbf{0}, \mathbf{u}^0 L_{\mathbf{u}^0} = 0 \end{array} \right\} \dots(56)$$

が成立する。式 (56) はしばしばクーン・タッカーの条件と呼ばれている。

c) クーン・タッカーの同値定理

$f(\mathbf{x})$ および $g_i(\mathbf{x})$ がすべて凹、かつ連続的偏微分可能で、さらにクーン・タッカーの制約想定が満たされているとする。

$\mathbf{x}^0 \geq \mathbf{0}$ が式 (50) の解ベクトルであるための必要十分条件は、 $\mathbf{u}^0 \geq \mathbf{0}$ が存在し、 $(\mathbf{x}^0, \mathbf{u}^0)$ が

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m u_i g_i(\mathbf{x})$$

の非負鞍点となっていることである。そして、 \mathbf{x}^0 が式 (50) の解ベクトルであるということと、 \mathbf{x}^0 が次の最大化問題

$$\left. \begin{array}{l} \text{目的関数} \quad \mathbf{x} f_{\mathbf{x}^0} \rightarrow \max \\ \text{制約条件} \quad \mathbf{G}(\mathbf{x}) \geq \mathbf{0} \\ \quad \quad \quad \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{array} \right\} \dots(57)$$

の解ベクトルであるということとは同値である。

一例として、次の非線形計画法の問題を考えてみよう。

$$\begin{array}{l} \text{制約条件} \quad \left. \begin{array}{l} x_1 + x_2 \leq 6 \\ x_1 - x_2 \leq 1 \\ 2x_1 + x_2 \geq 6 \\ x_1 - 2x_2 \geq -8 \\ x_1 \geq 1, x_2 \geq 0 \end{array} \right\} \\ \text{のとで, } f(\mathbf{x}) = 10(x_1 - 3.5)^2 + 20(x_2 - 4)^2 \end{array} \quad \dots \quad (58)$$

を最小にせよ。

実行可能集合は、図-2における5辺形の周上および内部であるから、中心が(3.5, 4)、2つの径の長さの比が $1/\sqrt{10}:1/\sqrt{20}$ であるような長円のうちで5辺形に接するものを求めると、接点は $(x_1^0, x_2^0) = (2.5, 3.5)$ である。

ここで、式(57)の最大化問題は、双対線形計画法

$$\begin{array}{ll} (\geq 0) & x_1 \quad x_2 \\ \begin{array}{|c|c|} \hline u_1 & 1 & 1 \\ u_2 & 1 & -1 \\ u_3 & -2 & -1 \\ u_4 & -1 & 2 \\ u_5 & -1 & 0 \\ \hline \end{array} & \leq \begin{array}{|c|} \hline 6 \\ 1 \\ -6 \\ 8 \\ -1 \\ \hline \end{array} \\ \geq & \\ f_{\mathbf{x}^0} & (20, 20) \end{array}$$

を考えることによって

$$\mathbf{x}^0 = (2.5, 3.5)$$

$$\mathbf{u}^0 = (u_1^0, u_2^0, \dots, u_5^0) = (20, 0, \dots, 0)$$

$$\mathbf{x}^0 g_{\mathbf{x}^0} = 6u_1^0 + u_2^0 - 6u_3^0 + 8u_4^0 - u_5^0 = 120$$

を得る。またラグランジュ関数は

$$\begin{aligned} L(\mathbf{u}, \mathbf{x}) = & 10(x_1 - 3.5)^2 + 20(x_2 - 4)^2 \\ & + u_1(6 - x_1 - x_2) + u_2(1 - x_1 + x_2) \\ & + u_3(2x_1 + x_2 - 6) + u_4(x_1 - 2x_2 + 8) \\ & + u_5(x_1 - 1) \end{aligned}$$

であって $L_{x_1} = 0 \quad x_1^0 > 0$

$$L_{x_2} = 0 \quad x_2^0 > 0$$

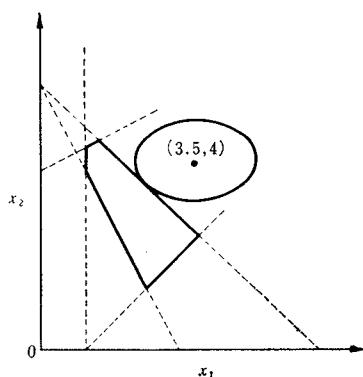


図-2 双対線形計画法の概念図

$$\begin{array}{ll} L_{u_i} = 0 & u_i^0 > 0 \\ L_{u_i} > 0 & (2 \leq i \leq 5) \end{array}$$

となっている。

(2) SUMT (サムト) による解法

制約条件がない場合の非線形問題の解法に対しては、①直接探索法 (direct search method), ②傾斜法 (descent method), ③最大傾斜法 (method of steepest descent), ④Powell の共役傾斜法, ⑤非線形方程式に対する Newton の反復法, ⑥Gauss の反復法, などをはじめとして数多くの試みがなされており、それが成功している。

そこで、これらの方法の重要な応用として、制約条件のある非線形最小化問題を、上記の制約条件のない非線形最小化問題に変換して解く方法が研究されるようになってきた。このような手法は SUMT (sequential unconstrained minimization technique) と呼ばれているが、以下にその概要を紹介しよう。

C.W. Carroll は、制約条件のある最小化問題

$$\begin{array}{ll} \text{目的関数} & f(\mathbf{x}) \rightarrow \min \\ \text{制約条件} & g_i(\mathbf{x}) \geq 0, \quad i=1, 2, \dots, I \end{array} \quad \dots \quad (59)$$

の解が、次の制約条件のない最小化問題

$$T(\mathbf{x}, r_k) = f(\mathbf{x}) + r_k F(g_i(\mathbf{x}), \text{all } i) \rightarrow \min \quad \dots \quad (60)$$

の解の、 $r_k \rightarrow 0$ の極限値として求められることを示した。関数 $T(\mathbf{x}, r_k)$ によって定まる曲面を応答曲面 (created response surface) という。ここに、関数 $F(\mathbf{g}) = F(g_i(\mathbf{x}), \text{all } i)$ は次の性質をもつものとする。

① $F(\mathbf{g})$ は、 $g_i(\mathbf{x}) > 0$ を満足するすべての点で定義されかつ有界である。

② 1つの i について $g_i(\mathbf{x}) \rightarrow 0$ となるとき、 $F(\mathbf{g}) \rightarrow \infty$ となる。

慣用パラメータ r_k は正で単調に減少し

$$\lim r_k = 0, \quad k \rightarrow \infty \quad \dots \quad (61)$$

である。Carroll は $F(\mathbf{g})$ の最も簡単な形として

$$F(\mathbf{g}) = \sum_i g_i^{-1}(\mathbf{x}) \quad \dots \quad (62)$$

をとったが、他の形のもの、たとえば

$$F(\mathbf{g}) = -\sum_i \log(g_i(\mathbf{x})) \quad \dots \quad (63)$$

のような $F(\mathbf{g})$ も可能である。

Carroll の変換法の数値例として、次の簡単な非線形計画法の問題を考えてみよう。

$$\begin{array}{ll} \text{制約条件} & 4x_1 + 4x_2 - x_1^2 - x_2^2 - 7 \geq 0 \\ \text{のとで} & f(\mathbf{x}) = x_1 + x_2 \end{array} \quad \dots \quad (64)$$

を最小にせよ。

この問題の実行可能な領域は(2, 2)を中心とする単位円の内部で、最適解は

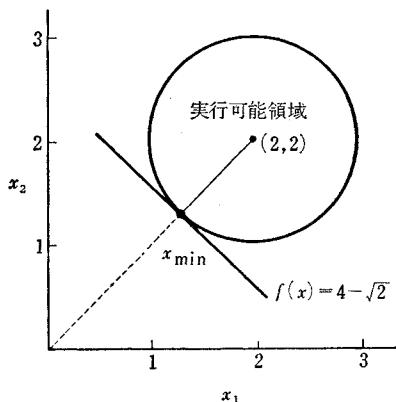


図-3 式(64)の非線形問題の最小化

$$x_1 = x_2 = 2 - 1/\sqrt{2} \quad f(\mathbf{x}) = 4 - \sqrt{2}$$

である。この問題の変換された目的関数は

で、 $T(\mathbf{x}, r)$ が最適となるための必要条件は

$$\frac{\partial T}{\partial x_1} = 1 - r(4 - 2x_1)(4x_1 + 4x_2 - x_1^2 - x_2^2 - 7)^{-2} = 0$$

である。これより $x_1(r)=x_2(r)=x$ である。ここに x は、

$$8x - 2x^2 - 7 - \sqrt{r} \sqrt{4-2x} = 0$$

を満たす。ここで $x=2-1/\sqrt{2}+u/\sqrt{2}$, $r=s/\sqrt{2}$ とおくと

$$u = \frac{1}{2} (u^2 + s\sqrt{1-u})$$

が得られる。 s が十分小であれば、この式の解を逐次代入法によって求めることができ

$$u = \frac{s}{2} - \frac{s^3}{32} + O(s^4)$$

となる。したがって、 $r \rightarrow 0$ のとき $x_1(r) = x_2(r) \rightarrow 2 - 1/\sqrt{2}$ となり、その誤差は $r^{1/2}$ の程度である。

A.V. Fiacco と G.P. McCormic は Carroll の変換法の理論的裏づけとその拡張を行ない、凸極性の条件(convexity)が、この変換法に対して本質的であることを示したが、一般に凸極性の条件が満たされないときでも、局部的最小解を求めるために SUMT を用いることができる。しかし、この場合は、局部的最小解が同時に大局的最小解になると、理論的に保証することはできない。しかし、多くの実際の応用に対しては、異なる出発点から始めて、システィマティックな反復を行なうことによって、いくつかの局部的最小解を求めることにより、大局的な解を得ることのできる場合が少なくない。

参 考 文 献

2. 線形計画法

- 1) G.B. Dantzig : Linear Programming and Extensions, Princeton University Press, 1963.
 - 2) R. Dorfman, P.A. Samuelson and R.M. Solow : Linear Programming and Economic Analysis, McGraw Hill, 1958.
 - 3) J.E. Kelley Jr. : Parametric Programming and the Primal-Dual Algorithm, JORSA, 7, 3, 1959.
 - 4) 吉川和広 : 土木計画と OR, 丸善, 昭和 44 年 7 月
 - 5) チャーチマン・エイコフ・アーノフ, 森口繁一ほか訳: オペレーションズ・リサーチ入門, 紀伊國屋書店, 昭和 33 年 6 月
 - 6) 松田正一・洲之内治男・杉山昌平: OR のための基礎数学 2, 丸善, 昭和 38 年 7 月
 - 7) 坂口 実: 数理計画法, 数理科学シリーズ 4, 培風館, 昭和 43 年 6 月

3. 動的計画法

- 1) R. Bellman : Dynamic Programming, Princeton University Press, 1957.
 - 2) R. Bellman and S. Dreyfus : Applied Dynamic Programming, Princeton University Press, 1962.
 - 3) R. Bellman : Dynamic Programming and Lagrange Multipliers, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. 42, 1956.
 - 4) 吉川和広 : 土木計画と OR, 丸善, 昭和 44 年 7 月
 - 5) 日科技連 DP 部会編 : ダイナミック・プログラミング入門, 日科技連, 昭和 42 年 3 月
 - 6) 杉山昌平 : 最適問題, 共立数学講座 23, 共立出版, 昭和 42 年 8 月

4. 最大原理

 - 1) L.S. Pontryagin, V. Boltyanskii, R. Gamkrelidze and E. Mishchenko : The Mathematical Theory of Optimal Process, Interscience Publishers, Inc. New York, 1962.
 - 2) R. Bellman : Introduction to Matrix Analysis, McGraw-Hill Book Company, 1960.
 - 3) S. Katz : A Discrete Version of Pontryagin's Maximum Principle, J. Electronics and Control, Vol. 13, No. 2, 1962~8.
 - 4) L.T. Fan and C.S. Wang : The Discrete Maximum Principle, John Wiley & Sons, Inc. New York, 1964.
 - 5) 宇野利雄・菊地豊彦 : 最大原理入門, 共立全書 165, 共立出版, 昭和 44 年 6 月
 - 6) 高橋安人 : 自動制御理論, 岩波全書, 岩波書店

5. 非線形計画法

- 1) H.W. Kuhn and A.W. Tucker : Non-linear Programming, Proc. Sec. Berkeley Symp. in Math. Stat. and Prob. 481-492, 1951.
 - 2) W.S. Dorn : Non-linear Programming—A Survey, Manag. Sci. 9, 1963.
 - 3) G.B. Dantzig, E. Eisenberg and R.W. Cottle : Symmetric Dual Non-linear Programs, Pacific J. Math. 15, 1965.
 - 4) C.W. Carroll : The Created Response Surface Technique for Optimizing Non-linear Restrained Systems, JORSA 9, 1961.
 - 5) A.V. Fiacco and G.P. McCormick : Non-linear Programming, Sequential Unconstrained Minimization Techniques, John Wiley, 1968.
 - 6) 坂口 実 : 数理計画法, 数理科学シリーズ 4, 培風館, 昭和 43 年 6 月
 - 7) コワリック, オスボーン著・山本善之ほか訳 : 非線形最適化問題, 培風館, 昭和 46 年 9 月