第 2 回 最適化ゼミ

ゼミ担当者　：　勝崎　俊樹，及川　雅隆，谷口　義樹
指導院生　：　小野　景子，花田　良子
開催日　：　2002 年 4 月 26 日

1　線形最適化問題

1.1　シンプレックス法

前回のゼミで，線形最適化問題の解法の一例としてシンプレックス法を挙げ，グラフで解く方法について示した．シンプレックス法とは，最適解が境界線上に現れる，最も単純な線形最適化問題である．そこで，この章では「シンプレックス法」を具体的に計算で行うにはどうしたらよいかを説明する．今回，以下のような例を用意した．

＜簡単なシンプレックス法の例＞
ある会社が，製品 A，B を売ろうとした．それらを製作するための原料を石油，鉄，パルプとする．それぞれ 1 個を製作するのに必要な材料の量を以下の表の通りとする．

Table 1　材料と製品との関係

	石油	鉄	パルプ	単価
A	1kg	1kg	3kg	2 万円
B	2kg	1kg	1kg	1 万円
材料の量	14kg	8kg	18kg	

このとき，手持ちの材料の範囲内で売上高を最大にするためには，A，B をそれぞれいくつ作ったらよいのかを考える．今回は，次章のシンプレックスタブローを用いた説明が分かりやすくなるように，その流れに沿った解法を行ってみる．

***a)* 目的関数の設定**
売上高は 1 つにつき，A が 2 万円，B が 1 万円なので，A を x_1 個，B を x_2 個売ったとすると，売上の合計は $2x_1+x_2$ となる．今回の目的はこの合計額をできる限り大きくすることなので，$Max(2x_1+x_2)$ が目的関数となる．

***b)* 制約条件の設定**
石油は A を作るのに 1kg，B を作るのに 2Kg 必要だが，その合計量は 14kg しかないので，

$$x_1+2x_2 \leq 14$$

となる. 同様に，鉄，パルプについても考えると，

$$x_1+x_2 \leq 8$$
$$3x_1+x_2 \leq 18$$

となる．

***c)* 非負条件の設定**
今回のように,「ものの個数」などを扱う最適化問題では，数が負になることはありえない．そのことから，以下のような条件が与えられる．

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$$

***d)* シンプレックス法による解法**
ここまでで得られた条件をまとめると，以下のようになる．

$$\begin{gathered} Max(2x_1+x_2) \\ x_1+2x_2 \leq 14 \\ x_1+x_2 \leq 8 \\ 3x_1+x_2 \leq 18 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{gathered}$$

このとき，目的関数，制約条件ともにシンプレックス法を適応できる形（最小化問題）にはなっていないので，以下に示すような，目的関数・制約条件の修正が必要となる．

$$\begin{gathered} Min(Linear) \\ （\text{制約条件}）= 0 \\ （\text{制約条件}）= 0 \\ \vdots \end{gathered}$$

このとき，制約条件を等式で示すために新たに変数 x_3，x_4，x_5 を導入する．

・目的関数の変形

今回の目的関数 $Max(2x_1+x_2)$ は，条件を負にしてやることで，最小化問題に書き換えることができる．今回のシンプレックス法では，この手法を用いて計算を行う．最小化問題に置き換えられた目的関数は以下のようになる．

$$Min(-2x_1-x_2)$$

・制約条件の変形

次に，制約条件をシンプレックス法に当てはめるために，次のように変形させる．

$$x_1+2x_2+x_3=14 \qquad (1)$$
$$x_1+x_2+x_4=8 \qquad (2)$$
$$3x_1+x_2+x_5=18 \qquad (3)$$

この問題は最小化問題となっているので，$x_3 \geq 0$，$x_4 \geq 0$，$x_5 \geq 0$ となっている．

このとき，目的関数を見ると，$Min(-2x_1-x_2)$ であるので，係数比較より x_1 が大きい方が全体として小さくなっていくことが分かる．あとは，いかにこの条件を満たす制約条件を探すかが重要となってくる．

ここで，非負条件を満たしつつ最小となる x_2 である，$x_2=0$ を，(1)，(2)，(3) に代入する．それを変形すると，以下のようになる．

$$x_3=14-x_1 \qquad (4)$$
$$x_4=8-x_1 \qquad (5)$$
$$x_5=18-3x_1 \qquad (6)$$

ここで，$x_3 \geq 0$，$x_4 \geq 0$，$x_5 \geq 0$ の条件より，(4)，(5)，(6) よりそれぞれ

$$x_1 \leq 14, x_1 \leq 8, x_1 \leq 6$$

という値を導くことができるので，$x_1 \leq 6$ を導くことができる．

ここで，もっとよい解はないかを確認する．$x_1=6$ を導くのに利用した (3) を変形して，

$$x_1=6-\tfrac{1}{3}x_2-\tfrac{1}{3}x_5 \qquad (7)$$
$$x_3=8-\tfrac{5}{3}x_2+\tfrac{1}{3}x_5 \qquad (8)$$
$$x_4=2-\tfrac{2}{3}x_2+\tfrac{1}{3}x_5 \qquad (9)$$

今回の式の変形の目的は，より大きい x_2 を求めることにある．そのため，(7)，(8)，(9)，(10) を変形し，

$$x_2=18-3x_1-x_5 \qquad (10)$$
$$x_2=\tfrac{24}{5}-\tfrac{3}{5}x_3+\tfrac{1}{5}x_5 \leq 0 \qquad (11)$$
$$x_2=3-\tfrac{3}{2}x_4+\tfrac{1}{2}x_5 \leq 0 \qquad (12)$$

x_2 の範囲は (10)，(11)，(12) から，それぞれ，$x_2 \leq 18$，$x_2 \leq \frac{24}{5}$, $x_2 \leq 3$ が得られる．すべての条件を満たすものは $x_2 \leq 3$ なので，その最大値 $x_2=3$ を選ぶ．すると，$x_1=5, x_2=3, x_3=8, x_4=0, x_5=0$ となる．このとき，目的関数は $min(-13)$ となる．

ここで，x_4, x_5 は，後に加えた任意の変数なので，目的関数の最小値は-13 であると決定できる．この目的関数は初めに負をかけることにより，最大化問題を変形したものなので，もう一度正条件に戻すと，この問題の真の目的関数 $max(2x_1+x_2)$ は $x_1=5, x_2=3$ のとき満たされるといえる．よって解は，

”$x_1=5, x_2=3$ のとき，最適解 13 を得る ”

ということになる．

1.2 シンプレックスタブロー

シンプレックスタブローとは，別名シンプレックス表とも呼ばれ，前述のシンプレックス法をより簡単に，より効率的に行うために利用されるものである．まず，シンプレックスタブローを利用するために，Table2 の表を製作する．この表において, 行は制約関数を，z は目的関数を，そして列はそれぞれの要素の値を示す.

Table 2 シンプレックスタブローの初期状態

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	定数項	列要素
z	-2	-1	0	0	0	0	
x_3	1	2	1	0	0	14	14/1
x_4	1	1	0	1	0	8	8/1
x_5	3	1	0	0	1	18	18/3

Fig2 は最小化問題に変換した目的関数と (1)〜(3) に示された初期の制約条件を忠実に示しており，最適解に近づけながら更新していく．そのアルゴリズムは，Fig. 1 のようになる．相対費用係数は，変異する目的関数の項を示す．

Fig1 に示したようなアルゴリズムを用いて，実際に Table2 を変形していく．まず，Fig1 において目的関数のなかの値で最小である-2 がある列 x_3 を列選択し，その列の各行要素 1，1，3 で各行の定数項 14，8，18 を割り，最小なもの $\dfrac{18}{3}=6$ がある行を行選択する．Table2 から，Table3 の過程では，列 x_1 の制約条件を消去し，

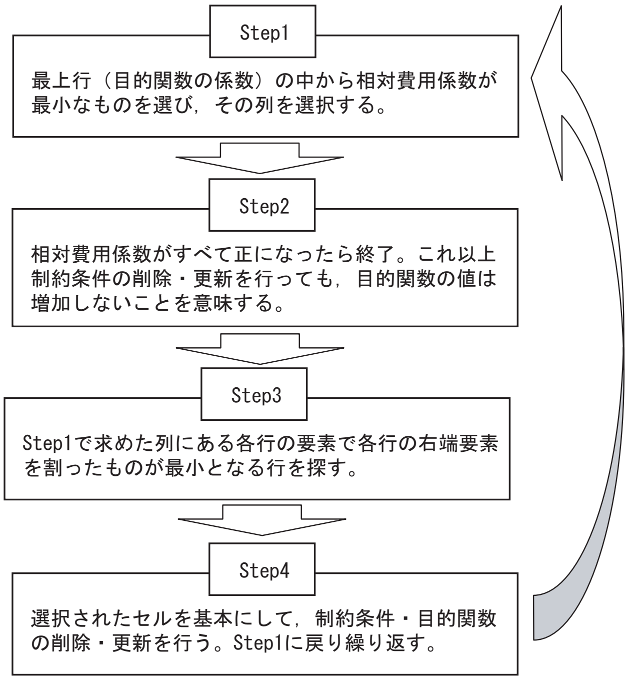

Fig. 1　シンプレックスタブローのアルゴリズム

Table 3　シンプレックスタブローの第 2 段階

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	定数項	列要素
z	0	-1/3	0	0	2/3	12	
x_3	0	5/3	1	0	-1/3	(14-6)=8	8/(5/3)
x_4	0	2/3	0	1	-1/3	(8-6)=2	2/(5/3)
x_1	1	1/3	0	0	1/3	6	6/(5/3)

次に行 x_5 の名前を x_1 に置き換える．値は行 x_5 を 3 で割ったものを受け継ぐ．次に，残った行 x_3，x_4 に対しては，(もともと列 x_1 に合った値)/(もともと列 x_1，行 x_5 に合った値) で，列 x_2 と列 x_5 の部分にある値を引く．また，定数項に関しては，最小の定数項で他の定数項を引く．z の定数項に対しては,（求められた最小の定数項）*（もとある値で最小の z の行）を z に元からある定数項から引いてやることで求められる．このとき，行 x_3，x_4，x_1 はそれぞれ式 (7)〜(9) に対応している．

Table3 に対しても，行 x_2 に対して同じ操作を繰り返すと，Table4 が得られる．すると，もう z の行に負の数はないので，シンプレックスタブローを用いた計算はここで終了となる．そのとき，定数項に残った値を負にしたものが解となる．

よって，解として，$x_1 = 5, x_2 = 3$，そして最適解-13 を得ることができた．実際の問題では，目的関数に負をかけたので，さらに (-1) をかけてやれば，正しい最適解 13 を得られる．

Table 4　シンプレックスタブローの第 3 段階

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	定数項	列要素
z	0	0	0	1/2	1/2	13	
x_3	0	0	1	-2/5	2/3	3	
x_2	0	1	0	3/2	-1/2	3	
x_1	1	0	0	-1/2	1/2	5	

2　非線形最適化問題

非線形最適化問題において，関数の微分が重要な役割を果たす．最適化問題において，制約条件のない問題と制約条件のある問題とがあるが，制約条件のない非線形問題に対し，降下法と呼ばれる最適化手法がある．降下法とは，目的関数の値が減少するような方向にあるステップ幅だけ移動し続けることにより，最適解を求める手法である．

2.1　ニュートン法

最急降下法は前節で述べたように，大域的収束性をもつという利点があるが，収束が遅くなる場合がしばしばある．ニュートン法は，探索方向 d_n の値を関数の勾配ベクトルをもとに変化させることによって収束の高速化を計ろうとする方法である．ニュートン法では，x_n から次の解 x_{n+1} を以下のように決定する．

1. 出発点 x_0 を選び，$k = 0$ とおく．
2. $\nabla f(x_n) = 0$ ならば終了．さもなければ
$$d_n = -\{\nabla^2 f(x_n)\}^{-1} \nabla f(x_n) \tag{1}$$
を求め，ステップ 3. へ進む．
3. 次の点を $x_{n+1} = x_n + d_n$ とする．$k = k + 1$ とおいてステップ 2. へ戻る．

ここで，勾配ベクトルをもう一度偏微分した $\nabla^2 f(x)$ をヘッセ行列という．このヘッセ行列が正定値対称行列[1]であるとき，その関数は下に凸な関数となることが，数学的に証明されている．
ステップ 2. の終了条件は勾配ベクトルが 0 のときで，そのときの解を最適解とする．式 (1) は多変数の関数で適用可能であるが，多変数関数はイメージしにくいので，図示が可能な 1 変数関数を用いて説明する．Fig. 2 は x_n から次の探索点 x_{n+1} を生成している様子である．x_n における接線を求め，接線と x 軸との交点が次の探索点 x_{n+1} である．関数 $f(x)$ は，$f'(x)$ と x 軸との交点で極

[1] $n \times n$ 行列 A が $x \neq 0$ であるようなすべての n 次元ベクトル x に対して不等式 $x^T Ax \geqq 0$ を満たすとき，行列 A は正定値であるという．

値を取り，その点において関数 $f(x)$ は最小値を取る可能性があるので，ニュートン法はこれを求める解としている．

関数の勾配が大きなときは解に高速に接近するため，

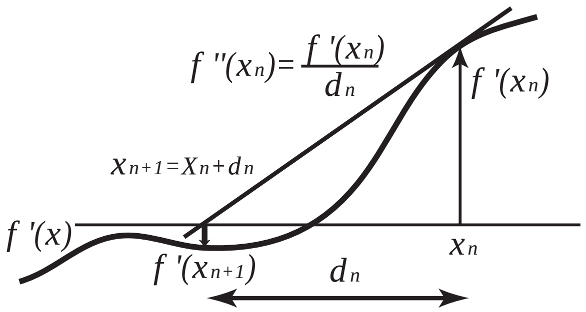

Fig. 2　1 変数関数のニュートン法

ニュートン法は最急降下法と比べものにならないほど速く解に収束する．ところが，ニュートン法も最急降下法と同様に，初期値の取り方により局所的最適解に陥ってしまう．しかも，最急降下法が大域的収束性を持つのに対し，ニュートン法は局所的収束性[2]は持つが，大域的収束性を持たない．また，反復毎にヘッセ行列を求めないといけないので計算量が多い．このことが，ニュートン法の実用面での大きな制約となっている．ニュートン法の特徴を Table 5 に示す.

Table 5　ニュートン法の特徴

長所	最適解に収束するときには, 収束が非常に速い.
短所	解の近傍に初期点を選ばなければ，必ずしも収束が保証されない. 各反復ごとに，ヘッセ行列を計算しなければばならない.

2.2　準ニュートン法

ニュートン法の大域的収束性の問題を解決する方法として，準ニュートン法というアルゴリズムがある．準ニュートン法は，収束する速度はニュートン法ほど速くはないが，大域的収束性を持つ．これは，式 (1) のヘッセ行列の逆行列を正定値対称行列で近似することによって得られる．近似行列を H_n とすると，探索方向 d_n は次の式 (2) となる．

$$\begin{aligned} d_n &= x_{n+1} - x_n \\ &= -\{\nabla^2 f(x_n)\}^{-1} \nabla f(x_n) \\ &= -H_n \nabla f(x_n) \end{aligned} \tag{2}$$

終了条件はニュートン法と同じで，$\nabla f(x_n) = 0$ のときである．準ニュートン法の特徴を Table 6 に示す.

[2]初期値を解の十分近くに選んだなら，その解への収束が保証される

Table 6　準ニュートン法の特徴

長所	大域的収束性を持つ. ヘッセ行列を計算する必要がないので計算効率が良い.
短所	初期点の設定によっては，うまく収束しない場合もある.

2.3　制約条件つきの最適化問題

制約条件がない問題においては，点 x^* が局所的最適解であれば目的関数の勾配が 0 になる．しかし，制約つき問題においては，その局所的最適解が Fig. 3 のように実行可能領域の境界上に存在することが多く，その点で目的関数の勾配が 0 になるとは限らない.

制約つき問題に対しては，目的関数だけでなく制約条件に含まれる関数，すなわち制約関数も考慮する必要がある．ここではあるアルゴリズムを使ってある問題を解き，最終的に求まった解が局所的最適解の可能性があるか判定するキューンタッカー (Kuhn・Tucker) 条件を紹介する．

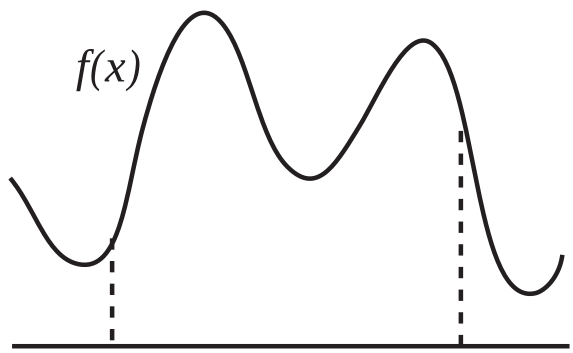

Fig. 3　境界上の最適解

2.3.1　キューン・タッカー条件

【キューンタッカー条件】

x^* が制約つき問題の局所的最適解であり，有効制約[3]c_i $(i = 1, 2, \cdots l, 0 \leq l \leq m)$ の勾配ベクトル $\nabla f(x^*)$ と $\nabla c_i(x^*)$ が，その点において 1 次独立ならば，式 (3) が成り立つようなベクトル $u^* = (u_1^*, u_2^*, \cdots, u_m^*)$ が存在することがいえる．

[3]等式が成り立つ制約条件

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^{m} u_i^* \nabla c_i(x^*) = 0 \\ c_i(x^*) = 0 & (i = 1, 2, \cdots, l) \\ c_i(x^*) \leq 0,\, u_i^* \geq 0 & (i = l+1, 2, \cdots, m) \\ c_i(x^*) < 0,\ \Rightarrow \quad u_i^* = 0 & (i = l+1, 2, \cdots, m) \end{cases} \tag{3}$$

この条件をキューン・タッカー条件という．式 (3) は，有効制約 $c_i(i = 1, 2, \cdots l, 0 \leq l \leq m)$ の解 x^* における勾配ベクトル $\nabla c_i(x^*)$ が 1 次独立の場合，その点における目的関数 $f(x)$ の勾配ベクトル $\nabla f(x^*)$ と $\nabla c_i(x^*)$ の和のベクトルをスカラー倍したベクトルが釣り合うことを意味している．式だけでは分かりにくいので，例を用いて説明する．

以下のような目的関数，制約条件を考える．

$$\begin{aligned} &\text{目的関数：} f(x) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \quad \rightarrow \quad \text{最小} \\ &\text{制約関数：} c_1(x) = {x_1}^2 + {x_2}^2 - 2 \leq 0 \\ &\qquad\qquad c_2(x) = -x_1 + x_2 \leq 0 \\ &\qquad\qquad c_3(x) = -x_2 \leq 0 \end{aligned} \tag{4}$$

この問題の最適解は目的関数の等高線と実行可能領域が交わった点 $x^* = (1, 1)\top$ である．（Fig. 4 参照）x^* における目的関数の勾配ベクトルと活性な制約条件 $\nabla f(x^*), \nabla c_1(x^*), \nabla c_2(x^*)$ が釣り合っているような形になっている．このことは，

$$\nabla f(x^*) + u_1^* \nabla c_1(x^*) + u_2^* \nabla c_2(x^*) = 0 \tag{5}$$

を満たすような $u_1^* \geq 0, u_2^* \geq 0$ が存在することを示している．実際，$\nabla f(x^*) = (0, 2)\top, \nabla c_1(x^*) = (2, 2)\top, \nabla c_2(x^*) = (-1, 1)\top$ であるから，$u_1^* = 1/2, u_2^* = 1$ とすれば，確かに上式が成立する．式 (5) は，活性な制約条件のみを含んだ式となっているが，次のように書き換えることができる．

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) + u_1^* \nabla c_1(x^*) + u_2^* \nabla c_2(x^*) + u_3^* \nabla c_3(x^*) = 0 \\ c_i(x^*) \leq 0,\, u_i^* \geq 0 \quad (i = 1, 2) \\ c_i(x^*) < 0,\ \Rightarrow \quad u_i^* = 0 \quad (i = 3) \end{cases} \tag{6}$$

式 (6) の第 1 式は見かけ上すべての制約関数を含んでいるが，第 3 式より，活性な制約ではない 3 番目の制約条件の係数 u_3^* は 0 になるので，式 (5) と式 (6) は実質的に同じものを表している．そして，式 (6) を満たす局所解 $x^* = (1, 1)\top$ は式 (3) を満たしている．

局所解はキューン・タッカー条件を満たすが，最終的に見つかった解がキューンタッカー条件を満たすからといって，その解が局所解であるかどうかは分からない．ただし局所解は必ずキューンタッカー条件を満たすので，最終的に求まった解が条件を満たしていない場合は確実に局所解ではないことが分かる．この条件により，解候補をある程度挙げることができる．

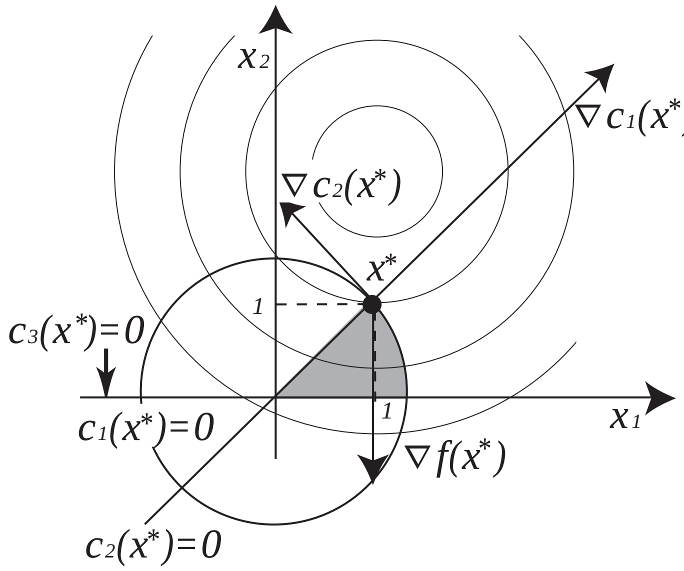

Fig. 4　目的関数と制約関数の勾配