最適化法

1　線形計画法

1.1　最大化問題

先ず線形計画法の典型的な問題から：

ある製造会社があって, x と y という２種類の製品の製造販売をやっています。これらを製造するには, 原材料 A，B，C が必要で, x, y をそれぞれ１単位当たり造るのに必要な量と, 使用できる在庫量が下の表のように決まっています。

	x	y	(在庫量)
A	10	10	400
B	20	10	600
C	15	40	1300

x, y を販売するとそれぞれ１単位当たり２万円, １万円の利益が得られます。問題は, 表の在庫量の範囲で, x と y をそれぞれ何単位ずつ造れば利益が最大になるかです。

これを数式化すると, x, y の製造量を x, y で表すとして：

原材料 A, B, C についての制約から

$$10x + 10y \cdot 400 \quad (1)$$

$$20x + 10y \cdot 600 \quad (2)$$

$$15x + 40y \cdot 1300 \quad (3)$$

無論; 負の生産量はないのですから

$$0 \cdot x \quad (4)$$

$$0 \cdot y \quad (5)$$

利益は $2x + y$ (6)

で結局, (6) を (1) » (5) の条件のもとで最大にすることになります。下の図は関数 $F(x; y) = 2x + y$ の図です。

(図 1.0)

この程度の簡単な問題なら, 手計算でできますが, 変数が x, y の２個ではなく, 実際の問題では, 数百個というものがあります。そのため, 計算機を使うことになりますがこのような問題を効率良く解くために開

発されたものにシンプレクス法があります。それについての説明は, 後で, 述べることとして, まず上の問題にチャレンジしてください。

例えば, Microsoft Excel では次のようにワークシートを作成します。

	A	B	C	D
1			= A1*2+ B1	
2	10	10	= A1*A2 + B1*B2	400
3	20	10	= A1*A3 + B1*B3	600
4	15	40	= A1*A4 + B1*B4	1300

ツールメニューのソルバーを選択
目的セル C1
目標値 最大値
変化させるセル A1 : B1
制約条件

A1 => 0

B1 => 0

C2 <= D2

C3 <= D3

C4 <= D4

セルの A1 が x, B1 が y を表しています。制約条件を入力するには, 制約条件の「追加」を選択して入力します。各セルの指定はマウスでそのセルをクリックします。<=, =, =>, 範囲指定などの選択も出来ます。

1.2 解法

前節では線形計画法の典型的な問題を例示しました。それは制約条件

$$10x + 10y \cdot 400 \quad (7)$$

$$20x + 10y \cdot 600 \quad (8)$$

$$15x + 40y \cdot 1300 \quad (9)$$

$$0 \cdot x \quad (10)$$

$$0 \cdot y \quad (11)$$

$$(12)$$

のもとで, 関数

$$f(x; y) = 2x + y$$

を最大化する問題でした。
条件 (7) » (11) を充たす点 P = (x; y) は下のような, 凸多角形の境界線も含めた内部にあります。

(図 1.1)

この凸多角形の頂点を

$$P_0 = (x_0; y_0); P_1 = (x_1; y_1); P_2 = (x_2; y_2); P_3 = (x_3; y_3); P_4 = (x_4; y_4)$$

とすると, 内部の点 $P = (x; y)$ はこれらの頂点 $P_i = (x_i; y_i); i = 0; 1; 2; 3; 4$ によって

(1) P = ¸$_0$P$_0$ + ¸$_1$P$_1$ + ¸$_2$P$_2$ + ¸$_3$P$_3$ + ¸$_4$P$_4$

(2) ¸$_0$ + ¸$_1$ + ¸$_2$ + ¸$_3$ + ¸$_4$ = 1

(3) 0 · ¸$_0$ · 1; 0 · ¸$_1$ · 1; 2 · ¸$_2$ · 1; 0 · ¸$_3$ · 1; 0 · ¸$_4$ · 1

で表されます。これを $P_i = (x_i; y_i); i = 0; 1; 2; 3; 4$ の凸結合といいます。

$$f(x; y) = 2x + y$$

には「線形性」という性質があります。これは $P = (x; y); Q = (x^0; y^0)$

と ®; ¯ について,

f(®P + ¯Q) = f(®(x; y) + ¯(x^0; y^0)) = ®f(x; y) + ¯f(x^0; y^0) = ®f(P) + ¯f(Q)

という性質です。この線形性を使うと, 以下の議論ができます。

まず各頂点での関数 f

$$f(P_i) = f(x_i; y_i); i = 0; 1; 2; 3; 4$$

のうち最大値を f(P$_¤$) = f(x$_¤$; y$_¤$) とします。すると凸多角形の内の任意の点 $P = (x; y)$ に対する $f(P) = f(x; y)$ は P が $P_i = (x_i; y_i); i = 0; 1; 2; 3; 4$ の凸結合で表されることから

f(P) = f(¸$_0$P$_0$ + ¸$_1$P$_1$ + ¸$_2$P$_2$ + ¸$_3$P$_3$ + ¸$_4$P$_4$)

さらに f の線形性から

右辺 = ¸$_0$f(x$_0$; y$_0$) + ¸$_1$f(x$_1$; y$_1$) + ¸$_2$f(x$_2$; y$_2$) + ¸$_3$f(x$_3$; y$_3$) + ¸$_4$f(x$_4$; y$_4$) (**f**の線形性)

f(P$_¤$) = f(x$_¤$; y$_¤$) が最大で,(3) のように各 ¸$_i$ は正の数 (1 ¸ ¸$_i$ ¸ 0) でしたら,

右辺 · (¸$_0$ + ¸$_1$ + ¸$_2$ + ¸$_3$ + ¸$_4$)f(x$_¤$; y$_¤$)

さらに,(2) から

¸$_0$ + ¸$_1$ + ¸$_2$ + ¸$_3$ + ¸$_4$ = 1

で

f(P) = f(x; y) · f(x$_¤$; y$_¤$) = f(P$_¤$)

となります。結局, 関数 f の制約条件を表す凸多角形の内部 (境界を含む) の点全てを調べる必要がなく、頂点での関数 f の値を調べれば良いことがが判ります。

(図 1.2)

線形化計画法の代表的な解法であるシンプレクス法はは, 制約条件を表す凸多角形の頂点での関数 f の値を効率的に調べる方法です。適当な, 頂点から始め, 関数 f の値が増大する頂点へ次々移動して, 最大解を探します。

この他に, 凸多角形の内部の点から, 最大解を与える頂点を探索する内点法もあります。これらの詳細は, 後日述べます。

2 他段階問題

ある会社が原料 A, B を使用して製品 x, y を製造販売しているものとします。

1. 製品 x, y それぞれの 1 単位当たりの A，B の必要量は表 1 で与えられます。
2. 原料 A, B の使用可能な上限は夏場, 冬場で表 2 で与えられます。
3. 製品 x, y の販売量は夏場, 冬場で表 3 のように下限が決まっています。
(最低これだけは製造しなければならないという意味です。)
4. 夏場に製造して, 売らずに, 在庫として冬場に持ち越すことができます。
5. x, y の 1 単位当たりの夏場, 冬場での販売利益と, 夏場から冬場への持ち越しの在庫コストは表 4 で与えられます。

以上の条件で, 利益が最大になるように夏, 冬の製造計画を求めてください。

表 1: (1 単位当たりの必要原料)

	x	y
A	40	80
B	80	40

表 2: (原料の使用上限)

	A	B
夏	20000	5000
冬	5000	20000

3 輸送の最適配分問題

最適化問題には色々な問題がありますが, 「輸送問題」もあります。配送先が 2 箇所だと手計算でも出来ますが, 紹介が目的ですので簡単なものにしておきます。

表 3: (販売量の下限)

	x	y
夏	20	10
冬	10	20

表 4: (1 単位当たりの利益, 在庫コスト)

	x	y
利益 (夏)	1000	50
利益 (冬)	50	1000
在庫コスト	50	50

ある薬品製造メーカーは, 国内に A, B の 2 箇所製造工場をもっています。
A, B 両工場の生産能力は

A 9000kg

B 8000kg

です。
注文先が, x, y であり, それぞれ

x 6000kg

y 11000kg

の注文がありました。A, B どちらかの工場で製造したものを配送するわけですが, A, B 両工場から, 注文先 x, y への輸送コストは製品 1kg 当たり

	x	y
A	5 円	20 円
B	20 円	10 円

です。
A, B 両工場から注文先 x, y へそれぞれ何単位ずつ, 製造しておくれば輸送コストが最小になるか配分を求めてください。A で製造され x, y へ配送される製品の量を A_x, A_y
B で製造され x, y へ配送される製品の量を B_x, B_y とすると
$A_x + A_y = 9000$
$A_x + B_x = 6000$
などという制約式がでてきます。無論他にもあります
また輸送コストは
$5A_x + 20A_y + 20B_x + 10B_y$ です。

4　ゲーム

4.1　鞍点

　　話題をゲームの話しに替えます。小生の知り合いに教育熱心な父親と、遊び盛りの息子がいます。
この父親、ご多分に洩れず仕事の疲れがたまり、日曜は昼寝することが多いのですが、子煩悩で息子の勉強も気になります。
息子にしてみれば、日曜日に頼みもしないのに、父親に小言を言われながら―父親にしてみれば指導なのですが―勉強させられるなんて最悪です。
「ウザッタイ」が父親が起きていても、「ノラリ、クラリ、」話題をはぐらかして、なんとか家でゲームでもした方がましです。
　大人しく昼寝してくれて、こっそり抜け出すことができれば友人の家にでもゲームでもしに行くのですが、それができなくても、溜まった宿題を一人で片付けるほうがまだましです。

　父親は「昼寝をする。しない。」息子は「勉強する。遊ぶ。」でそれぞれ「戦略」に選択肢があるわけです。そこで、二人に「戦略」の選択によってかわる利害得失を下のように単純化して表にしてみます。
　＜利得表１＞

	勉強する	遊ぶ
昼寝しない	-50	50
昼寝する	0	100

　この表の値は、息子の側に立ったものです。ウザッタイ父親が昼寝しないで、指導を受けながら、勉強する最悪な場合は得点-50 点
何とか、はぐらかしながら、遊ぶ場合はあまり楽しめませんが 50 点、父親が昼寝して、一人で勉強して、溜まっている宿題を片付けるのは 0 点、こっそり抜け出して遊ぶ場合は 100 点ということです。

　父親にしてみれば：

「昼寝する」を選択したら、自分の失点（息子の得点）は、最大 100 点
「昼寝しない」を選択したら、自分の失点（息子の得点）は、最大 50 点

この二つの最大失点のうち、最小のものは 50 点です。

　息子にしてみれば：

「勉強する」を選択したら、自分の得点は、最小 ¡ 50 点
「遊ぶ」を選択したら、　　自分の得点は、最小 50 点

この二つの最小得点のうち、最大ものは 50 点です。

　この例では「最大失点のうち、最小のもの」＝「最小得点のうち、最大もの」が成立っています。

　結局、父親が昼寝をしなければ、父親にとっては、最悪でも息子は、50 点息子にしてみれば、「遊ぶ」を選択したら最悪でも自分の得点は 50 点ということになります。このような状況を「このゲームには鞍点がある」といいます。
さて、この話を一般化しておきましょう。二人の競技者 $P; Q$ が取り得「戦略」の集合を $P_0; Q_0$ とします。そして, この二人がそれぞれ「戦略」の集合 $P_0; Q_0$ の中から戦略 $P; Q$ を選択したときの得点を $G(P; Q)$ で

表しておきます。

上の例では、P = 息子$;$ Q = 父親 で,$P_0 = \{$ 勉強する$;$ 遊ぶ $\}$ $Q_0 = \{$ 昼寝する$;$ 昼寝しない $\}$ です。$G(P;Q)$ は上の利得表１で与えられます。

P が P_O の中から選択されると Q はこれに対抗して $G(P;Q)$ が最小になるように（自分の損失が最小になるように）Q を Q_O 中で選択するはずです。
すなわち

$$\min\{G(P;Q) | Q \in Q_O\}$$

が実現されるとなるような Q を Q_O の中で探します。
この最小値を

$$\min_Q G(P;Q)$$

で表しておきます。
P はこれを見越して, 自分の利益が最大になるようにするため,

$$\max\{\min_Q G(P;Q) | P \in P_O\}$$

が実現されるとなるような P を P_O の中から探すことになります。この最大値を

$$\max_P \min_Q G(P;Q)$$

で表しておきます。
まっく逆の Q の立場からは, Q が Q_0 の中から選択されると P はこれに対抗して $G(P;Q)$ が最大になるように P を P_O 中で選択するはずです。
すなわち

$$\max\{G(P;Q) | P \in P_O\}$$

が実現されるとなるような P を P_O の中から探します。この最小値を

$$\min_P G(P;Q)$$

で表しておきます。Q はこれを見越して, 自分の損失を最小にするため,

$$\min\{\max_P G(P;Q) | Q \in Q_O\}$$

が実現されるとなるような Q を Q_0 の中で探すことになります。この最大値を

$$\min_Q \max_P E(P;Q)$$

で表しておきます。
以上出てきた, ２つの値には一般には

$$\max_P \min_Q G(P;Q) \leq \min_Q \max_P G(P;Q)$$

という関係が成り立っています。
[証明]
Q を Q_O の中で動かして,

$$\min_Q G(P;Q) \leq G(P;Q)$$

が任意の P (両辺),Q (右辺) について成立
次に上の不等式の右辺について P を P_0 中で動かして,

$$\min_Q G(P, Q) \le \max_P G(P, Q)$$

が任意の P (左辺),Q (右辺) について成立
さらに上の不等式の左辺について P を P_0 の中で動かして,

$$\max_P \min_Q G(P, Q) \le \max_P G(P, Q)$$

が任意の Q (右辺) について成立
最後に右辺の Q を Q_0 の中で動かして

$$\max_P \min_Q G(P, Q) \le \min_Q \max_P G(P, Q)$$

[証明終]

　特に「鞍点」が存在する場合, 戦略 $P^* \in P_0, Q^* \in Q_0$ が存在して

$$\max_P \min_Q G(P, Q) = G(P^*, Q^*) = \min_Q \max_P G(P, Q)$$

となります。この場合, 競技者 P, Q はそれぞれ戦略 $P^* \in P_0, Q^* \in Q_0$ 以外の戦略を選択すると損をすることになり, この意味で平衡状態になります。

　(図 2.1 鞍点)

4.2　鞍点のない問題：混合戦略問題

　P, Q の２人がじゃんけんをします。
負けたら 10 円を相手に払い, 勝ったら相手から 10 円貰うというルールで, じゃんけんを繰り返します。
無論,「アイコ」の場合は, 支払うお金, 貰うお金とも 0 円です。

　(賭博は法律で禁止されているから考えたくないという方は, これは, 仮想の国でのお話しと思って頂くか, お金の替わりにゲーム用のメダルを考えてください。
「じゃんけんぽん, アイコでしょ…」というかけ言葉, 関東近辺でよく使われていますが, 他の地域はどんなかけ言葉は？)

前節と同様に,P と Q の出す手によって, 貰えるお金, 支払うお金がどうなるか, P の立場で以下のように＜利得表 2 ＞に表しておきます。

＜利得表 2 ＞

	Gu	Choki	Pa
Gu	0	-10	10
Choki	10	0	-10
Pa	-10	10	0

Gu：グー

Choki：チョキ

Pa：パー

「-10」は Q に 10 円払う事を表します。

P の立場に立ってみます。先ず, このゲームの利得表には、前節で説明した鞍点がありません。双方が選択の余地のない「平衡状態」にする戦略はないわけです。出す手をランダムしてゲームを繰り返す方法以外ありません。このような問題を混合戦略問題といいます。
じゃんけんを繰り返すわけですが, どのような「戦略」があるでしょうか？

グーを出し続ける？ でも,Q はそれを直ぐ見破って, パーを出し続けてくるでしょう。続ければ続けるほど P は大損です。
同様にパーを出し続けるのも駄目, チョキを出し続けるのも駄目です。
結局, 例えば, サイコロを用意して, 出た目によって出す手を決めるランダムな手の繰り返す方法でしょう。
(1 か 6 ならグー,2 か 5 ならパー,3 か 4 ならチョキなど)

問題は, どんな割合で（確率で）グー, チョキ, パーを出すべきかです。
相手の Q は P の出す手を監視しながら P と対戦しますので,P が選択したグー, チョキ, パーの確率を直ぐに見破り, それでも, 自分にとって有利な手を選択してくると考えるべきです。
P と Q の立場を替えても全く同じです。

ゲームの理論を創始し, この種の問題に解を与えたのが, ノイマン（vonNuemann 現在の計算機の原理開発者としても有名）です。

前節の鞍点のある問題と異なり, 一工夫が必要です。それは, ゲームの利得 G(P; Q) の替わりに期待値 E(P; Q) を使います。以下、その説明をします。
P が選択する戦略（グー, チョキ, パーを出す確率）を $p_1; p_2; p_3$ とし, $P = (p_1; p_2; p_3)$ で表しておきます。

このゲームの場合、「戦略」は幾つかある「手」をランダムに選んで繰り返す確率の組み合わせになるわけです。

同様に Q が選択する戦略を $Q = (q_1; q_2; q_3)$ で表しておきます。

P がグーを出し,Q もグーを出す確率は $p_1 \cdot q_1$ でこのとき P は損得なし (0 円の儲け),

P がグーを出し,Q がチョキを出す確率は $p_1 \cdot q_2$ でこのとき,P は 10 円の儲け,

P がグーを出し,Q がパーを出す確率は $p_1 \cdot q_3$ でこのとき, P は 10 円の損失 (-10 の儲け),

という計算を全て行いますと

$$P = (p_1, p_2, p_3), Q = (q_1, q_2, q_3)$$

での P の儲けの期待値 $E(P, Q)$ は

$$\begin{aligned} E(P, Q) &= 0 \cdot p_1 \cdot q_1 + 10 \cdot p_1 \cdot q_2 + (-10) \cdot p_1 \cdot q_3 \\ &+ (-10) \cdot p_2 \cdot q_1 + 0 \cdot p_2 \cdot q_2 + 10 \cdot p_2 \cdot q_3 \\ &+ 10 \cdot p_3 \cdot q_1 + (-10) \cdot p_3 \cdot q_2 + 0 \cdot p_3 \cdot q_3 \end{aligned}$$

です。

$$P = (p_1, p_2, p_3), Q = (q_1, q_2, q_3)$$

はそれぞれ, グー, チョキ, パーを出す確率を表していますから, これらについての制約は

$$\begin{aligned} &1 \geq p_1 \geq 0, 1 \geq p_2 \geq 0, 1 \geq p_3 \geq 0, p_1 + p_2 + p_3 = 1 \\ &1 \geq q_1 \geq 0, 1 \geq q_2 \geq 0, 1 \geq q_3 \geq 0, q_1 + q_2 + q_3 = 1 \end{aligned}$$

です。

簡単のため P, Q の採り得る集合を

$$\begin{aligned} P_O &= \{(p_1, p_2, p_3) | 1 \geq p_1 \geq 0, 1 \geq p_2 \geq 0, 1 \geq p_3 \geq 0, p_1 + p_2 + p_3 = 1\} \\ Q_O &= \{(q_1, q_2, q_3) | 1 \geq q_1 \geq 0, 1 \geq q_2 \geq 0, 1 \geq q_3 \geq 0, q_1 + q_2 + q_3 = 1\} \end{aligned}$$

で表しておきます。前節の P_0, Q_0 と異なり, それぞれ, 確率を要素にもつベクトルの集合になっています。

$P = (p_1, p_2, p_3)$ が P_O の中から選択されると Q はこれに対抗して $E(P, Q)$ が最小になるように（自分の損失が最小になるように）$Q = (q_1, q_2, q_3)$ を Q_O 中で選択するはずです。
すなわち

$$\min \{E(P, Q) | Q \in Q_O\}$$

が実現されるとなるような Q を Q_O の中で探します。
この最小値を

$$\min_Q E(P, Q)$$

で表しておきます。
P はこれを見越して, 自分の利益が最大になるようにするため,

$$\max \{\min_Q E(P, Q) | P \in P_O\}$$

が実現されるとなるような P を P_O の中から探すことになります。この最大値を

$$\max_P \min_Q E(P, Q)$$

で表しておきます。

まっく逆の Q の立場からは, $Q=(q_1,q_2,q_3)$ が Q_0 の中から選択されると P はこれに対抗して $E(P,Q)$ が最大になるように $P=(p_1,p_2,p_3)$ を P_O 中で選択するはずです。
すなわち

$$\max\{E(P,Q) | P \in P_O\}$$

が実現されるとなるような P を P_O の中から探します。この最小値を

$$\min_P E(P,Q)$$

で表しておきます。Q はこれを見越して, 自分の損失を最小にするため,

$$\min\{\max_P E(P,Q) | Q \in Q_O\}$$

が実現されるとなるような Q を Q_0 の中で探すことになります。この最大値を

$$\min_Q \max_P E(P,Q)$$

で表しておきます。

以上出てきた, 2つの値には一般には

$$\max_P \min_Q E(P,Q) \leq \min_Q \max_P E(P,Q)$$

という関係が成り立っています。
証明は前節の $G(P,Q)$ の場合と全く同じなので省略します。

ノイマンは上のような問題では,P_O, Q_O の中に

$$P^* = (p_1^*, p_2^*, p_3^*), Q^* = (q_1^*, q_2^*, q_3^*)$$

があって

$$\max_P \min_Q E(P,Q) = \min_Q \max_P E(P,Q) = E(P^*, Q^*)$$
$$\max_P E(P,Q^*) = E(P^*,Q^*) = \min_Q E(P^*,Q)$$

となることを証明しました。
その証明についての話しは後の章ということにして, この P^* と Q^* を具体的求めることにします。

問題を解きやすくするため, 最初に出てきた＜利得表＞(損失と利益の表) の要素に全て 10 を加えておきます。

＜利得表 2 ＞

	Gu	Choki	Pa
Gu	10	0	20
Choki	20	10	0
Pa	0	20	10

Gu：グー
Choki：チョキ
Pa：パー

これでは, 一方的な P のゲームじゃないかと思われるかもしれませんが,

$$P^* = (p_1^*, p_2^*, p_3^*), Q^* = (q_1^*, q_2^*, q_3^*)$$

を計算するためだけにします。このような, 利得表の平行移動やっても解は同じです。

P^* も,Q^* も,$E(P^*, Q^*)$ も未知な量ですが $E(P^*, Q^*)$ は判っているものとして

$$\max_P E(P, Q^*) = E(P^*, Q^*) = \min_Q E(P^*, Q)$$

に注目します。

$$E(P, Q) = q_1\{10p_1 + 0p_2 + 20p_3\}$$
$$+ q_2\{20p_1 + 10p_2 + 0p_3\} + q_3\{0p_1 + 20p_2 + 10p_3\}$$

で,

$$1 \ge q_1 \ge 0, 1 \ge q_2 \ge 0, 1 \ge q_3 \ge 0, q_1 + q_2 + q_3 = 1$$

ですので

$$E(P^*, Q^*) \le 10p_1 + 0p_2 + 20p_3 \quad (1)$$
$$E(P^*, Q^*) \le 20p_1 + 10p_2 + 0p_3 \quad (2)$$
$$E(P^*, Q^*) \le 0p_1 + 20p_2 + 10p_3 \quad (3)$$

という条件を満たせば, 任意の $Q \in Q_O$ について

$$E(P^*, Q^*) \le E(P, Q)$$

が成り立ちます。従って

$$E(P^*, Q^*) \le \min_Q E(P, Q)$$

が成り立ちます。
(1)〜(3) と $P \in P_O$ 即ち

$$1 \ge p_1, p_2, p_3 \ge 0, p_1 + p_2 + p_3 = 1$$

の制約条件下で

$$E(P, Q^*) = \max_P E(P, Q^*)$$

となる P を求めれば,

$$E(P, Q^*) = E(P^*, Q^*)$$

となるわけです。しかし, これではまだ $E(P^*, Q^*)$ が未知量ですので,
(1)〜(3) の両辺を $E(P, Q^*)$ で割り,

$$r_1 = p_1/E(P, Q^*)$$
$$r_2 = p_2/E(P, Q^*)$$
$$r_3 = p_3/E(P, Q^*)$$

として,

$$E(P^*, Q^*)/E(P, Q^*) \ge 1$$

に注意すると

$$1 \cdot 10r_1 + 0r_2 + 20r_3 \ (1^0)$$
$$1 \cdot 20r_1 + 10r_2 + 0r_3 \ (2^0)$$
$$1 \cdot 0r_1 + 20r_2 + 10r_3 \ (3^0)$$

$$r_1 + r_2 + r_3$$
$$= (p_1 + p_2 + p_3)=E(P;Q^{¤})$$
$$= 1=E(P;Q^{¤})$$

から

$E(P;Q^{¤})$ の P についての最大化 ,「$r_1 + r_2 + r_3$の最小化」

結局, 線形計画法の問題

$$1 \cdot 10r_1 + 0r_2 + 20r_3(1^0)$$
$$1 \cdot 20r_1 + 10r_2 + 0r_3(2^0)$$
$$1 \cdot 0r_1 + 20r_2 + 10r_3(3^0)$$

かつ

$$r_1; r_2; r_3 \ ¸ \ 0$$

の制約条件で

$$r_1 + r_2 + r_3$$

を最小化する。
という問題が出てきます。後は, 先日から御紹介している Microsoft Excel の solver などツールが利用できます。実際, この問題を解いてみて下さい。
その解から

$$p_1^{¤} = r_1=(r_1 + r_2 + r_3)$$
$$p_2^{¤} = r_2=(r_1 + r_2 + r_3)$$
$$p_3^{¤} = r_3=(r_1 + r_2 + r_3)$$

とすれば,$P^{¤}$ の最適戦略が求まります。

P と Q の役目を交換しても全く同じなので,$P^{¤} = Q^{¤}$ です。最初の＜利得表２＞を用いれば,$E(P^{¤};Q^{¤})$ も求まります。

4.3 シャーロック・ホームズの選択

有名なホームズの物語の一つです。そもそも, このネタはゲーム理論の大家による入門書に書かれていたのですが, 著者名とか, 細かい設定忘れてしまいました。

悪の天才，モリアティ教授の犯罪組織に壊滅的な打撃を与えたホームズは，復讐に燃えるモリアティ教授と残党に執ように狙われます。

危険を感じたホームズは友人のワトソン博士と共に，列車でロンドンを脱出，ドーバーに向います。そこで船に乗り換え，ドーバー海峡を渡ってヨーロッパ大陸にという目論見です。

しかしながら，さすがモリアティ教授，ホームズ達の計画を察知し，彼らが乗った列車の後から，特別列車を仕立てて追ってきます。

無論，ホームズもモリアティ教授の追跡を知らぬわけはなく，さてここで思案というわけです。

列車は，終点のドーバー以外に，途中，一駅だけ止まります。その駅名忘れてしまったので，メイドストンとしておきます。

ホームズ達はメイドストンで途中下車し，追ってくるモリアティ教授をやり過ごすことができます。

上手く行けば，ホームズ達はメイドストン，モリアティ教授はドーバーで，両方とも英国国内で「ゲームは振り出しに戻って引き分け」でしょう。

しかし，モリアティ教授がその裏を図って，メイドストンで途中下車したら，ホームズ達は捕まってしまいます。

逆に，モリアティ教授がメイドストンで途中下車，ホームズ達が裏の裏をかいてドーバーに直行したら，ひと先ずは，ホームズ達の勝ち。

また，ホームズ達もドーバー，モリアティ教授もドーバーなら，この場合もホームズ達が捕まってしまいます。

ホームズはくじを用意し，ドーバーまで直行か，メイドストンで途中下車かを決めることになりますが，そのくじの割合をどのような配分にするかが問題です。

前節でご紹介した混合戦略問題で，結局は線形計画法で解いて頂くことになります。

このためには，ホームズ，モリアティ教授それぞれの選択に対する利得表が必要です。例えば：

＜ホームズの利得表＞

	D	M
M	*	*
D	*	*

D：ドーバーに直行
M：メイドストン

といったものです。*の数字は皆様，設定してください。

線形計画法を利用するとき，利得表の値は正の数であることが必要です。適当な正の数を足して，「平行移動」してください

5 ネットワークの最適化

5.1 最短経路問題

5.1.1 ラベル付き有向グラフ

1. 有向グラフ有向グラフは，ここでは G で表しますが，コンピュータや，ネットワークにもよく使われます。有向グラフ G は

   (1) 節点の集合 P

   (2) P の点の順序対 (a, b)(a, b は P の点) の集合 V

   からなります。

   $a \neq b$ のとき $(a, b) \neq (b, a)$ です。また

   $$(a, b) = (c, d) \quad , \quad (\quad a = c \quad \text{かつ} \quad b = d \quad)$$

   V は P の自乗直積 $P \times P = \{(a, b) | a, b$ は P の要素 $\}$ の部分集合です。 すなわち，

   $$V \subset P \times P$$

   順序対 (a, b) は向きのついた枝，あるいは弧と呼ばれ，

   (図 5.1)

   のように表すことができます。a は始点,b は終点と呼ばれます。このような枝のまたは弧の図をつなぎ合わせば，有向グラフ $G = (P, V)$ を平面図で表すことができます。

(図 5.2)

$$P = \{a, b, c, d, e, f\}$$

$$V = \{(a, b), (a, c), (b, d), (b, e), (c, e), (d, f), (e, f)\}$$

2. **ラベル**

 有向グラフ $G = (P, V)$ の弧には, 長さや, 所要時間などのデータでラベル付けされているとき G をラベル付き有向グラフといいます。

(図 5.3)

3. **路**

 節点の多重対 $(p_1, p_2, \cdots, p_k)$ で, 各 $(p_1, p_2), (p_2, p_3), \cdots, (p_{k-1}, p_k)$ が V の元, すなわち弧であるものを路といいます。

 上の図では, $(a, b, e, f), (a, c, e), (b, d, f)$ などが路です。

4. **最短路問題**

 G をラベル付き有向グラフとします。ただし,

(図 5.4)

の (b, e, f, d, b) のように「閉じた路」は含まないものとします。

さて, 簡単にするため、集合 P が n 個の節点からなっているとして

P = f1; 2; ¢¢¢; ng とし, 夫々の弧に付けられている, ラベルはその弧の長さを表すものとしておきます。

(図 5.5)

弧をつなぎ合わせて作られる路の長さは, それを構成している弧の長さの和で表します。例えば (図 5) で路 (1; 4; 5; 6) の長さは,20 + 20 + 30 で 70 です。

節点 1 から出発して, 節点 n へ行くための長さ最小の路をどう求めるかという問題を考えます。(図 5.5) の例では, 路 (1,2,5,6) が解で, 長さ 50 です。

P の点の数が少なければ, 路を全て調べてみるのも一つの方法ですが, 数が多くなると実用的ではありません。

5.1.2 D.P.(ダイナミック・プログラミング) と最短路

1. D.P. の原理

(図 5.6)

節点 a から節点 d への最短路が与えられたとします。その路が途中に節点 b を経由しているとすると, その経路の a から b への部分の路も, やはり a から b への最短経路になっています。

実際,a から b への別の最短路があったとすると, 例えば,(図 6) の節点 c; e を経由して,b に行く路がそ

うであったとすると

L(a; c) + L(c; e) + L(e; b) < L(a; b)

となり, これから

L(a; c) + L(c; e) + L(e; b) + L(b; d) < L(a; b) + L(b; d)

ですから, 路 (a; c; e; b; d) が最短路 (a; b; d) より短くなってしまい, 路 (a; b; d) が最短であることに矛盾します。

結局, 「全体が最短（最適）ならその部分も最短（最適）」ということになります。

このような, 性質を体系的に扱った最適化法の研究がベルマンによってなされました。ベルマンの D:P:（ダイナミック・プログラミング）とか最適性の原理と呼ばれています。

2. 再帰的な計算法

最適性の原理を使うと, 例えば, 接点 i から k までの路が存在するとして, その中の最短路 R(i; k) の長さを O(i; k) で表すと

i から k までの弧 (i; k) が存在しない場合は L(i; k) = 1 としておき,

O(i; k) = minffL(i; k)g [fL(i; j) + O(j; k)jj 6= i; k; (i; j) は V の元 gg(1a)

R(i; k) = (i; k)(O(i; k) = L(i; k) のとき) = (i; R(j_0; k))

(上記以外で O(i; k) = L(i; j_0) + O(j_0; k); j_0 6= i; k; (i; j0) は V の元となる j_0を一つ選択)(1b)

という「再帰的」な定義ができます。

ここで,(i; (j; ¢¢¢; k)) = (i; j; ¢¢¢; k) とします。

これは, 節点 i からの弧 (i; j) が存在する節点 j について, 節点 j から節点 k までの最短の長さ O(j; k) をもつ路 (j; ¢¢¢; k) と長さ L(i; j) の弧 (i; j) をつなげた路 (i; j; ¢¢¢; k) の長さ L(i; j) + O(j; k) のうち, 最短のものが O(i; k) であるという意味です。

(図 5.5)

に適用すると

O(3; 6) = 20　　R(3; 6) = (3; 6)

$O(5,6) = 30 \qquad R(5,6) = (5,6)$

$O(2,6) = \min\{L(2,3) + O(3,6), L(2,5) + O(5,6)\} = \min\{25 + 20, 10 + 30\} = 40$

$R(2,6) = (2,5,6)$

$O(4,6) = L(4,5) + O(5,6) = 50$

$R(4,6) = (4, R(5,6)) = (4,5,6)$

$O(1,6) = \min\{L(1,2) + O(2,6), L(1,4) + O(4,6)\} = \min\{10 + 40, 20 + 50\} = 50$

$R(1,6) = (1, R(2,6)) = (1,2,5,6)$

3. Dijkstra の方法

DP の原理を使った効率的な方法として,Dijkstra の方法が知られています。<Dijkstra>

準備

$K \leftarrow \emptyset$

$L \leftarrow P$

$O(1) \leftarrow 0$

$j \neq 1$ となる P の要素 j 全てに対して $O(j) \leftarrow \infty$

手順 1

$K = P$ なら終了

$K \neq P$ のとき

$O(m) = \min\{O(i) | i$ は L の元$\}$ となる L の元 m を選ぶ。

手順 2

$K \leftarrow K \cup \{m\}$（$K$ に要素 m を加えた集合を新たに K とする。）

$L \leftarrow L \setminus \{m\}$（$L$ からその要素 m を除いた集合を新たに L とする。）

(m, j) が V の元で,かつ,j が L の要素となる全ての j に対して以下の $<<>>$ 内の手続きを繰り返す。

$<<$ もし,$O(j) > O(m) + L(m,j)$ ならば

$O(j) \leftarrow O(m) + L(m,j)$

$R(j) \leftarrow m$

そうでなければ何もしない。$>>$

手順 1 にもどる。

このアルゴリズムの終了時には,

$O(j)$ には節点 1 から節点 j への最短の長さ,
$R(j)$ には節点 1 から節点 j への最短路で, 節点 j の直前の節点の番号

が書き込まれています。

以下このDijkstraの方法を図5の例に適用してみます。これは、本大学院の社会人学生「たなかさん」にやっていただいたものです。図5.5は、

$$
\begin{aligned}
P &= \{1, 2, 3, 4, 5, 6\} \\
V &= \{(1, 2), (1, 4), (2, 3), (2, 5), (3, 6), (4, 5), (5, 6)\} \\
L&(1, 2) = 10, L(1, 4) = 20, L(2, 3) = 25, \\
L&(2, 5) = 10, L(3, 6) = 20, L(4, 5) = 20, \\
L&(5, 6) = 30
\end{aligned}
$$

準備

$K \leftarrow \phi$

$L \leftarrow \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$

$O(1) \leftarrow 0 \; \infty$ を999として

$O(2) \leftarrow 999, O(3) \leftarrow 999,$

$O(4) \leftarrow 999, O(5) \leftarrow 999,$

$O(6) \leftarrow 999$

手順1 (1回目)

$K \neq P$ なので終了ではない

$$O(m) = \min\{O(1), O(2), O(3), O(4), O(5), O(6)\} = O(1) = 0$$

となり、m=1を選ぶ。

手順2 (1回目)

$K \leftarrow \{1\}$

$L \leftarrow \{2, 3, 4, 5, 6\}$

<<

$j = 2$ のとき

$O(2) = 999$

$O(1) + L(1, 2) = 0 + 10 = 10$ なので

$O(2) > O(1) + L(1, 2)$ となり

$O(2) \leftarrow 10$

$R(2) \leftarrow 1$

$j = 3$ のとき

$(1, 3)$ は V の元ではない。

$j = 4$ のとき

$O(4) = 999$

$O(1) + L(1, 4) = 0 + 20 = 20$

$O(4) > O(1) + L(1, 4)$ となり

$O(4) \leftarrow 20$

$R(4) \leftarrow 1$

$j = 5, 6$ のとき

$(1, 5), (1, 6)$ は V の元ではない

$\gg$

手順1（2回目）

$K = \{1\}$ なので $K \notin P$ となり終了ではない

$O(2) = 10, O(3) = 999, O(4) = 20, O(5) = 999, O(6) = 999$ なので

$O(m) = \min\{O(2), O(3), O(4), O(5), O(6)\} = O(2) = 10$

となり、$m = 2$ を選ぶ。

手順2（2回目）

$K \leftarrow \{1\} \cup \{2\} = \{1, 2\}$

$L \leftarrow \{3, 4, 5, 6\}$

$\ll$

$j = 3$ のとき

$O(3) = 999$

$O(2) + L(2, 3) = 10 + 25 = 35$ なので

$O(3) > O(2) + L(2, 3)$ となり

$O(3) \leftarrow 35$

$R(3) \leftarrow 2$

$j = 4$ のとき

$(2, 4)$ は V の元ではない。

$j = 5$ のとき

$O(5) = 999$

$O(2) + L(2, 5) = 10 + 10 = 20$

$O(5) > O(2) + L(2, 5)$ となり

$O(5) \leftarrow 20$

$R(5) \leftarrow 2$

$j = 6$

$(2, 6)$ は V の元ではない

$\gg$

手順1（3回目）

$K = \{1, 2\}$ なので $K \notin P$ となり終了ではない

$O(3) = 35, O(4) = 20, O(5) = 20, O(6) = 999$ なので

$O(m) = \min\{O(3), O(4), O(5), O(6)\} = O(4) = 20$

となり、$m = 4$ を選ぶ。

手順２（３回目)

$K \leftarrow \{1, 2, 4\}$

$L \leftarrow \{3, 5, 6\}$

<<

$j = 3$ のとき

$(4, 3)$ は V の元ではない

$j = 5$ のとき

$O(5) = 20$

$O(4) + L(4, 5) = 20 + 20 = 40$

$O(5) < O(4) + L(4, 5)$ となり、何もしない

$j = 6$

$(4, 6)$ は V の元ではない

>>

手順１（４回目)

$K = \{1, 2, 4\}$ なので $K \not\ni P$ となり終了ではない

$O(3) = 35, O(5) = 20, O(6) = 999$ なので $O(m) = \min\{O(3), O(5), O(6)\} = O(5) = 20$

となり、$m = 5$ を選ぶ。

手順２（４回目)

$K \leftarrow \{1, 2, 4, 5\}$

$L \leftarrow \{3, 6\}$

<<

$j = 3$ のとき

$(5, 3)$ は V の元ではない

$j = 6$ のとき

$O(6) = 999$

$O(5) + L(5, 6) = 20 + 30 = 50 O(6) > O(5) + L(5, 6)$ となり

$O(6) \leftarrow 50$

$R(6) \leftarrow 5$

>>

手順１（５回目)

$K = \{1, 2, 4, 5\}$ なので $K \not\ni P$ となり終了ではない

$O(3) = 35, O(6) = 50$ なので $O(m) = \min\{O(3), O(6)\} = O(3) = 35$

となり、$m = 3$ を選ぶ。

手順 2（5 回目）

$K \leftarrow \{1, 2, 3, 4, 5\}$

$L \leftarrow \{6\}$

$\ll$

$j = 6$ のとき

$O(6) = 50$

$O(3) + L(3; 6) = 35 + 20 = 55$

$O(6) < O(3) + L(3; 6)$ となり何もしない

$\gg$

手順 1（6 回目）

$K = \{1; 2; 3; 4; 5\}$ なので $K \neq P$ となり終了ではない

$O(6) = 50$ なので $O(m) = \min\{O(6)\} = O(6) = 50$

となり、$m = 6$ を選ぶ。

手順 2（6 回目）

$K \leftarrow \{1; 2; 3; 4; 5; 6\}$

$L \leftarrow \emptyset$

$\ll$

L の要素がない

$\gg$

手順 1（7 回目） $K = \{1; 2; 3; 4; 5; 6\}$ なので $K = P$ となり終了

節点 1 から節点 6 への最短の長さ $O(6) = 50$

節点 1 から節点 6 への最短路で節点 6 の直前の節点の番号 $R(6) = 5$

5.1.3 無向グラフ

最短路問題ではラベル付き有向グラフを扱いましたが, ここでは, 弧で結ばれている節点間は, 双方向に行き来できるものとします。従って, 図示した場合も始点, 終点といった「向き」はありません。このようなグラフ G は無向グラフと呼ばれます。これは

(1) 節点の集合 P

(2)P の点の非順序対 $\{a; b\}$($a; b$ は P の点) の集合 V

からなります。

$\{a; b\} = \{b; a\}$ です。

この非順序対 $\{a, b\}$ も弧と呼ぶことにします。有向グラフのような始点, 終点はありません。

(図 5.7)

のように表すことができます。有向グラフと同様に枝のまたは弧の図をつなぎ合わせば，グラフ $G = (P; V)$ を平面図で表すことができます。

(図 5.8)

$$P = \{a, b, c, d, e, f\}$$
$$V = \{\{a, b\}, \{a, c\}, \{b, d\}, \{b, e\}, \{c, e\}, \{d, f\}, \{e, f\}\}$$

(a) ラベル

有向グラフと全く同様に無向グラフ G=(P,V) の弧にも，長さや，所要時間などのデータでラベル付けすることができます。

(図 5.9)

(b) 路

有向グラフと同様に節点の多重対 $(p_1, p_2, \cdots, p_k)$ で，各 $\{p_1, p_2\}, \{p_2, p_3\}, \cdots, \{p_{k-1}, p_k\}$ が V の元，すなわち弧であるものを路と呼ぶことにします。

上の図では，(a, b, e, f), (a, c, e), (b, d, f) などが路です。

(c) 巡回セールスマン問題

さて，簡単にするため，集合 P が n 個の節点からなっているとして

$P = \{1, 2, \cdots, n\}$ とし，夫々の弧に付けられている，ラベルはその弧を移動する費用は表すものとしておきます。

下の図では，節点の番号と区別できるよう ()付の数字で表しておきます。

(図 5.10)
弧をつなぎ合わせて作られる路を移動する費用は，それを構成している弧の費用の和で表します。上の図で路 (1; 3; 4; 2) の費用は,20+20+40 で 80 です。

巡回セールスマン問題は，各節点を，例えば都市に，費用を運賃として，都市１を出発して各都市 (2; 3; 4) を巡回（1 回だけ訪れて）して，再び都市１に戻ってくる，路の内費用最少のものを求めるといった問題です。

(図 5) の例では，路 (1; 3; 4; 2; 1) と (1; 2; 4; 3; 1) が解で，費用が 130 です。
可能な路を全てを調べても，１番目の都市 3 通り £2 番目の都市 2 通り £ ３番目の都市 1 通り =3!通りで順序を逆に回っても同じですから 2 で割って，結局 3!/2 通りです。しかし，都市の数が増えると非常に難しくなります。

(d) D.P. の適用

有グラフ最短路問題と同様に最適性の原理を使って組織的に調べることができます。
例えば，都市 1 を出発して,f2; 3; 4g を巡回して，最後に都市 2 を訪れるまでの最小費用を Cost(f2; 3; 4g; 2) で表すと，
その最小になる路を通ってさらに都市 1 に戻ってくるまでの費用は

Cost(f2; 3; 4g; 2) + L f2; 1g

です。全く同様に，費用最少で,f2; 3; 4g を巡回後，都市 3 を訪れ，都市 1 に戻る費用は

Cost(f2; 3; 4g; 3) + L f3; 1g

f2; 3; 4g を巡回して，最後に都市 4 を訪れ，都市 1 に戻る費用は

Cost(f2; 3; 4g; 4) + L f4; 1g

です。
結局，最小の費用は

minfCost(f2; 3; 4g; 2) + L f2; 1g; Cost(f2; 3; 4g; 3) + L f3; 1g; Cost(f2; 3; 4g; 4) + L f4; 1gg

であり，その最少費用を実現する路が求めるものです。
有グラフの場合と同様に Cost(f2; 3; 4g; 2) も再帰的に，　都市 1 を出発して,f3; 4g を巡回して，最後に都市 2 を訪れるまでの最小費用ですから
　都市 1 を出発して,f3; 4g を巡回して都市 3 を訪れ，ついで都市 2 を訪れる費用

Cost(f3; 4g; 3) + L f3; 2g

　都市 1 を出発して,f3; 4g を巡回して都市 4 を訪れ，ついで都市 2 を訪れる費用

Cost(f3; 4g; 4) + L f4; 2g

のうち何れか小さい方：

minfCost(f3; 4g; 3) + L f3; 2g; Cost(f3; 4g; 4) + L f4; 2gg

で求められます。さらに, Cost(f3;4g;3) は路 (1;4;3) の費用ですから Lf1;4g + Lf4;3g = 30 + 20 = 50

Cost(f3;4g;4) は路 (1;3;4) の費用ですから Lf1;3g + Lf3;4g = 20 + 20 = 40

です。

結局, 最小の費用は以下の再帰的な計算により求めることができます。

minfCost(f2;3;4g;2) + Lf2;1g;Cost(f2;3;4g;3) + Lf3;1g;Cost(f2;3;4g;4) + Lf4;1gg

= minf80 + 50;110 + 20;120 + 30g

= 130(1;3;4;2;1) または (1;2;4;3;1)

Cost(f2;3;4g;2)

= minfCost(f3;4g;3) + Lf3;2g;Cost(f3;4g;4) + Lf4;2gg

= minf50 + 60;40 + 40g = 80 路は (1;3;4;2)

Cost(f3;4g;3) = Lf1;4g + Lf4;3g = 30 + 20 = 50

Cost(f3;4g;4) = Lf1;3g + Lf3;4g = 20 + 20 = 40

Cost(f2;3;4g;3)

= minfCost(f2;4g;2) + Lf2;3g;Cost(f2;4g;4) + Lf4;3gg

= minf70 + 60;90 + 20g = 110 路は (1;2;4;3)

Cost(f2;4g;2) = Lf1;4g + Lf4;2g = 30 + 40 = 70

Cost(f2;4g;4) = Lf1;2g + Lf2;4g = 50 + 40 = 90

Cost(f2;3;4g;4)

= minfCost(f2;3g;2) + Lf2;4g;Cost(f2;3g;3) + Lf3;4gg

= minf80 + 40;110 + 20g = 120 路は (1;3;2;4)

Cost(f2;3g;2) = Lf1;3g + Lf3;2g = 20 + 60 = 80

Cost(f2;3g;3) = Lf1;2g + Lf2;3g = 50 + 60 = 110

しかしながら, この方法は組織的ではありますが,「全件探索」(全ての可能な候補を全て当たる) であり, 都市の数が１ 0〜20 ぐらいまでが限界です。

(e) 分岐限定法

ここで扱っている, 巡回セールスマン問題には, 解法の「決定打」はありません。問題の難しさを表す場合によく出てくる「NP 困難問題」の一つです。種々な方法が考案されています。「分岐限定法」もその一つです。

かなり作為的ですが, 以下の例を考えます。

(図 5.11)
都市 1 を出発し, 各都市を 1 回ずつ訪れ, 都市 1 に戻ってくる路を全て, 逆周りも含めて, 列挙すれば,

$$(1; 2; 3; 4; 1); (1; 2; 4; 3; 1); (1; 3; 2; 4; 1); (1; 3; 4; 2; 1); (1; 4; 2; 3; 1); (1; 4; 3; 2; 1)$$

です。これらの路は 1 番目,2 番目,3 番目に訪れる都市によって分類できます。例えば,1 番目に訪れる都市に注目して

(Ⅰ)1 番目の都市が 2 のもの

$$(1; 2; 3; 4; 1); (1; 2; 4; 3; 1)$$

(Ⅱ)1 番目の都市が 3 のもの

$$(1; 3; 2; 4; 1); (1; 3; 4; 2; 1)$$

（Ⅲ）1 番目の都市が 4 のもの

$$(1; 4; 2; 3; 1); (1; 4; 3; 2; 1)$$

です。Ⅰ, Ⅱ, Ⅲの中でそれぞれ, 最少費用の路を探す問題は部分問題と呼ばれます。さらにⅠ, Ⅱ, Ⅲの分類を 2 番目,3 番目によって, 細かく分類ができます。解の候補の「分岐」がでてくるわけです。

ここで, 解の候補として路の (1; 3; 4; 2; 1) を選んだとします。この路の費用は 130 です。部分問題Ⅲ, すなわち, Ⅲの分類の中で費用最少を調べ見ると：　路（弧)(1; 4) だけで, 既に費用が 130 であり, 費用がマイナスの弧はないのですから, このⅢの分類のものの最少費用は 130 より大です。従って, これ以上細かく調べる必要はありません。
すると, 解は, 路の (1; 3; 4; 2; 1) を含む,（Ⅱ）か（Ⅰ）から探せばよい事になります。
このようにして, 探すべき解の候補の「枝」のうち, 無駄なものを削除する事ができます。

さらに, 路 (1; 2; 3); (1; 3; 2) も費用が 130 ですから, これらの後の節点がなんであろうと, 費用は 130 より大きくなります。この例では, 以後の分岐はありませんので, これが判っても効用はありませんが, もしさらに分岐があるなら, 無駄な「枝」を削除できることになります。

この様にして, 結局,

$$(1; 3; 4; 2; 1); \quad (1; 2; 4; 3; 1)$$

にたどりつきます。

　無論, 問題のよって, また, 部分問題にの作製（分類）の仕方によって, 最悪, 全ての路を調べる事になる場合もあります。以上のような解法を一般的に表すと,
最小化問題 P が与えられたとして：

(1)　　P から, 部分問題の集合 $L = \{P_0; P_1; P_2; \cdots; P_n\}$ を作り,
　　初期解を適当に選択してその値 C_0 を求める。
　以下の手続きを L の元 P_i の全てについて行う

(2)　最小問題 P_i の解の下限値 inf P_i を求め,

inf P_i >　C_0 なら　L Ã L n fP_ig (L から P_i を削除)

(3)　最小問題 P_i の解 minP_i を求め

minP_i　<　C_0 なら　C_0 Ã minP_i　とする

図 5.10 の問題について,「分岐限定法」を適用すると例えば以下のようになります。これは、本大学院の社会人学生久保さんにやっていただいたものです。上の例よりスマートな解法です。

都市 1 を出発し, 各都市を 1 回ずつ訪れ, 都市 1 に戻ってくる路を全て, 逆周りも含めて, 列挙すると,

(1; 2; 3; 4; 1); (1; 2; 4; 3; 1); (1; 3; 2; 4; 1); (1; 3; 4; 2; 1); (1; 4; 2; 3; 1); (1; 4; 3; 2; 1)

です．これらの路は費用最小の f1; 3g; f3; 4g の両方を通るものと，通らないものに分類できます．

(Ⅰ) f1; 3g; f3; 4g の両方を通るもの

(1; 2; 4; 3; 1); (1; 3; 4; 2; 1)

(Ⅱ) f1,3g, f3,4g の両方は通らないもの

(1; 2; 3; 4; 1); (1; 3; 2; 4; 1); (1; 4; 2; 3; 1); (1; 4; 3; 2; 1)

です．

ここで, 解の候補として (Ⅰ) から路 (1; 2; 4; 3; 1) を選んだとします．この路の費用は 130 です．

部分問題 (Ⅱ) で費用を調べて見ると, 費用 20 の路が 1 つしか通れないことから，各路の費用は 20; 30; 40; 50; 60 で，この中から 4 つを選ぶことから下限値は 140 となる．

140>130 なので，Ⅱは削除できます．

残った（Ⅰ）から探せばよい事になりますが，路 (1,3,4,2,1) の費用も 130 となり，

(1; 3; 4; 2; 1); (1; 2; 4; 3; 1)

にたどりつきます．

図 5.11 の問題について,「D.P.」を適用すると：

これは、本大学院の社会人学生「たなかさん」にやっていただいたものです。

minfCost(f2; 3; 4g; 2) + Lf2; 1g; Cost(f2; 3; 4g; 3) + Lf3; 1g; Cost(f2; 3; 4g; 4) + Lf4; 1gg

= minf80 + 50; 110 + 20; 140 + 130g

= 130(1; 3; 4; 2; 1) または (1; 2; 4; 3; 1)

Cost(f2; 3; 4g; 2)

$= \mathrm{minfCost}(f3; 4g; 3) + L f3; 2g; \mathrm{Cost}(f3; 4g; 4) + L f4; 2gg$

$= \mathrm{minf}150 + 80; 40 + 40g = 80$ 路は $(1; 3; 4; 2)$

$\mathrm{Cost}(f3; 4g; 3) = L f1; 4g + L f4; 3g = 130 + 20 = 150$

$\mathrm{Cost}(f3; 4g; 4) = L f1; 3g + L f3; 4g = 20 + 20 = 40$

$\mathrm{Cost}(f2; 3; 4g; 3)$

$= \mathrm{minfCost}(f2; 4g; 2) + L f2; 3g; \mathrm{Cost}(f2; 4g; 4) + L f4; 3gg$

$= \mathrm{minf}170 + 80; 90 + 20g = 110$ 路は $(1; 2; 4; 3)$

$\mathrm{Cost}(f2; 4g; 2) = L f1; 4g + L f4; 2g = 130 + 40 = 170$

$\mathrm{Cost}(f2; 4g; 4) = L f1; 2g + L f2; 4g = 50 + 40 = 90$

$\mathrm{Cost}(f2; 3; 4g; 4)$

$= \mathrm{minfCost}(f2; 3g; 2) + L f2; 4g; \mathrm{Cost}(f2; 3g; 3) + L f3; 4gg$

$= \mathrm{minf}100 + 40; 130 + 20g = 140$ 路は $(1; 3; 2; 4)$

$\mathrm{Cost}(f2; 3g; 2) = L f1; 3g + L f3; 2g = 20 + 80 = 100$

$\mathrm{Cost}(f2; 3g; 3) = L f1; 2g + L f2; 3g = 50 + 80 = 130$

6 整数計画法

6.1 整数計画法

第１章では, 線形計画法の説明で典型的な問題として以下のような問題を例示しました。制約条件

$$10x + 10y \cdot 400 \quad (13)$$
$$10x + 5y \cdot 600 \quad (14)$$
$$300x + 20y \cdot 1300 \quad (15)$$
$$0 \cdot x \quad (16)$$
$$0 \cdot y \quad (17)$$
$$(18)$$

のもとで, 関数

$$f(x; y) = 100x + 10y$$

を最大化する問題でした。ここで, 特に変数 $x; y$ が整数値しか取り得ないという条件を付加します。

$$10x + 10y \cdot 400 \quad (19)$$
$$10x + 5y \cdot 600 \quad (20)$$
$$300x + 20y \cdot 1300 \quad (21)$$
$$0 \cdot x \quad (22)$$
$$0 \cdot y \quad (23)$$
$$x; y \text{ は整数} \quad (24)$$

のもとで, 関数

$$f(x; y) = 100x + 10y$$

を最大化する。このような問題を整数計画問題と言います。
一見すると, $(13) \sim (6.1)$ の問題を解き、解の x, y の値を四捨五入などすれば $(19) \sim (6.1)$ の解が得られるように思われるかもしれませんが, そう簡単にはいきません。
変数が整数という制約が加わると, 難しくなります。実際, 整数値という制約のない問題 $(13) \sim (6.1)$ の解は, $x = 1.79, y = 38.21, f(x, y) = 560.71$ ですが, 問題 $(19) \sim (6.1)$ では, $x = 2, y = 35, f(x, y) = 550$ です。

それぞれ重さが, $g_1, g_2, \cdots, g_m$ で, 値段が $p_1, p_2, \cdots, p_m$ の m 個の品物があり, それを, 最大 G まで入れることが出きる容器に詰めるとして, 売上が最大になるような詰め方は？　という問題を定式化すると

$$
\begin{aligned}
&g_1x_1 + g_2x_2 + \cdots + g_mx_m \leq G \\
&x_k \in \{0, 1\}, k = 1, 2, \cdots, m
\end{aligned}
$$

のもとで,

$$p_1x_1 + p_2x_2 + \cdots + p_mx_m$$

を最大にする。
ただし, 変数 $x_k \in \{0, 1\}, k = 1, 2, \cdots, m$

$$
x_k = \begin{cases} 1 & (k \text{ 番目の品物を詰める}) \\ 0 & (k \text{ 番目の品物を詰めない}) \end{cases}
$$

を表す。という問題になります。これはナップサック問題と呼ばれています。

6.2　分岐限定法

このような問題について, 解法は種々考案されていますが, ネットワークの最適化で述べた「分岐限定法」を適用することもできます。

「分岐限定法」を、この問題に適用するように書き直すと

最小化問題 P が与えられたとして：

(1)　P から, 部分問題の集合 $L = \{P_0, P_1, P_2, \cdots, P_n\}$ を作り,
初期解を適当に選択してその値 C_0 を求める。
以下の手続きを L の元 P_i の全てについて行う

(2)　最小問題 P_i の解の上限値 $\sup P_i$ を求め,
$\sup P_i < C_0$ なら　$L \leftarrow L \setminus \{P_i\}$ (L から P_i を削除)

(3)　最小問題 P_i の解 $\max P_i$ を求め
$\max P_i > C_0$ なら　$C_0 \leftarrow \max P_i$　とする

となります。部分問題の造り方は, 詰める品物のいくつかを固定して, 他の品物を詰めるかどうかの問題にするというものです。
制約条件

$$
\begin{aligned}
&g_1x_1 + g_2x_2 + \cdots + g_mx_m \leq G \\
&x_k \in \{0, 1\}, k = 1, 2, \cdots, m
\end{aligned}
$$

のもとで,

$$p_1x_1 + p_2x_2 + \cdots + p_mx_m$$

を最大にするのですから, 例えば, 品物 1,2 は必ず詰めるとして, すなわち,$x_1 = x_2 = 1$ とおき, 部分問題として

$$g_3x_3 \cdots + g_mx_m \le G - (g_1 + g_2)$$
$$x_k \in \{0, 1\},\ k = 3, 4, \cdots, m$$

のもとで,

$$(p_1 + p_2) + p_3x_3 + p_4x_4 + \cdots + p_mx_m$$

を最大化するというものです。

7 変分問題 (等周問題)

変分問題などと書くと何やら難しい数学がでてきそうですが

紐の両端を結んで輪にして，テーブルに載せ色々な形の図形を作るのを想像してください。長方形でも，正方形でも，平行四辺形でも，台形でも，楕円でも円でも，三角形でも，歪なじゃがいもみたいな図形でも結構です。

今日の話題はそれらの図形の内，それで囲まれる面積が最大なものは何かというものです。ややこしくなるので，8 の字のように中でくびれているのは「ナシ」にします。ですから，楕円やジャガイモ，四角形のような単純な図形を思い浮かべてください。どんな図形を作っても，紐が伸び縮みしないとすると，図形の周囲の長さは一定です。

古代の問題

「周囲の長さが一定な図形のうち，それで囲まれる面積が最大なものを求めよ」

図形の中心付近に原点 O を置き，図形の周上の点を座標で表しましょう。ここで，普通の座標ではなく，局座標を使ってみます。これは，原点からその点までの距離 r と，原点を通って水平な軸から，その点をまでを，原点を中心にして，時計と反対周りに計った角度 θ—ギリシャ文字のシーター—の対で (r,θ) で表します。

後の計算を楽にするため角度 θ はラジアン単位で表すことにします。

高校時代習ったと思いますが，2π を 360 度する角度の表示法です。例えば 60 度なら $2\pi \times 60/360 = 1/3\pi$ ラジアン

θ は 0 から 2π まで動き，それに伴って，図形の周上の点は，その周囲を一周してきます。その間，図形が円でなければ，原点 O とその点との距離 r は一定でなく変化します。角度 θ に依存しますので $r(\theta)$ と書いておきます。

さて，図形の周上の 2 点 P と Q の座標が，$P = (r(\theta),\theta) Q = (r(\theta'),\theta')$ のとき，点 P と Q が近くにあれば，角度の差 $\Delta\theta = \theta' - \theta$ は小さくなります。原点 O と P，Q で作られる中心角 $\Delta\theta$ の扇形の弧の長さ Δl は

$$\Delta l = \sqrt{r(\theta)^2 + \dot{r}(\theta)^2} \quad \sqrt{r(\theta)^2 + \left\{\frac{r(\theta') - r(\theta)}{\Delta\theta}\right\}^2}$$

で近似でき，その面積は，円弧を略，直線 (底辺) と見なしてできる三角形の面積，

$$r(\theta)\Delta\theta \times r(\theta)/2 = r(\theta)^2\Delta\theta/2$$

で近似できます。

それぞれ，隣りあった点の角度の差 $\Delta\theta$ が十分小さく，話を簡単にするため一定になるように，点の数を十分多く取ります。例えば，N を十分大きくして，

$$\Delta\theta = 2\pi/N$$

となるように図形の周囲上の点を

$$P_1, P_2, \cdots, P_N$$

を決めたとします。

$$P_1 = (r(0), 0), P_2 = (r(\Delta\theta), \Delta\theta),$$
$$\cdots, P_N = (r((N-1)\Delta\theta), (N-1)\Delta\theta)$$

面倒なので，

$$r_1 = r(0), r_2 = r(\Delta\theta), \cdots, r_N = r((N-1)\Delta\theta)$$

としておきます。

図形の周の長さ l は，それぞれの扇形の弧の長さの総和で近似でき

$$l \approx \Delta l_1 + \Delta l_2 + \Delta l_3 + \cdots \Delta l_N$$
$$0 \leq k < N-1 \text{ のとき } \Delta l_k = \sqrt{r_k^2 + \left\{\frac{r_{k+1} - r_k}{\Delta\theta}\right\}^2}$$
$$\Delta l_N = \sqrt{r_N^2 + \left\{\frac{r_0 - r_N}{\Delta\theta}\right\}^2}$$

です。また図形の周で囲まれる面積 S は，それぞれの扇形の面積の総和で近似でき

$$S \approx \left(r_1^2 + r_2^2 + r_3^2 + \cdots r_N^2\right)\Delta\theta/2$$

です。

ここで，紐の長さを簡単のため 2π としておきます。すると問題は $l = 2\pi$ という制約条件の下で，S が最大になるよう r_1，r_2，r_3，…，r_N を決める問題になります。試しに $N = 10$ ぐらいにして，Excel の solver などで解いてみてください。

問題の解は，一体，どんな図形でしょうか？

8　最短曲線

「平面上の 2 点を結ぶ線分のうち長さが最小のものを求めよ」

簡単のため 2 点の座標を $(0, 0)$ と $(10, 10)$ とてしておきます。

この 2 点を結ぶ線分を考えます。$x-$軸 の 0 から 10 までを N 等分して

$$\Delta x = 10/N$$

$$x_0 = 0, \quad x_1 = \Delta x, \quad x_2 = 2\Delta x, \cdots, \quad x_{N-1} = (N-1)\Delta x, \quad x_N = N\Delta x = 10$$

とし，それに対応した線分上の点を

$$P_0 = (0,0), \quad p_1 = (x_1, y_1), \cdots, \quad P_{N-1} = (x_{N-1}, y_{N-1}), \quad P_N = (10, 10)$$

とします。この $P_0, \cdots, P_N$ を結ぶ折れ線で問題の線分を近似します。
　折れ線の線分の長さはピタゴラスの定理を使って

$$L = \{\Delta x^2 + (y_1 - 0)^2\}^{\frac{1}{2}} + \{\Delta x^2 + (y_2 - y_1)^2\}^{\frac{1}{2}} \cdots + \{\Delta x^2 + (10 - y_{N-1})^2\}^{\frac{1}{2}}$$

です。L が最小になるように $y_1, y_2, \cdots, y_{N-1}$ を求めればいいわけです。

9　陰関数定理とラグランジュ乗数

9.1　問題

　$L(x, y) = x + y$ とするとき，
半径１の円周
$x^2 + y^2 = 1$　　(1)
上の点 (x, y) で $L(x, y)$ の最大にするものを求めよ。

　これも Mathematica や Microsoft Excel の solver を使うと簡単に答えが出てきます。例えば Excel の solver なら

	A	B	C
1			= A1 + B1
2			= A1 × A1 + B1 × B1

目的のセル	$C$1
目的値	最大値
変化させるセル	$A$1:$B$1
制約条件	$C$2=1

A1 が x を表し，B1 が y を表します。

9.2　解析解

　解析的に解くなら，以下の道具を使います。

［道具その１］
　まず，大学の１年次か高校３年ぐらいで習った極値条件です。

　関数の極値条件

実数値関数 $F(x)$ が $x = x_0$ で極小値または極大値をとり，かつ，$x = x_0$ で微分可能であれば，$F(x)$ の $x = x_0$ での微分係数は０である。

$$\frac{dF}{dx}(x_0) = 0$$

[道具その２]

半径１の円の方程式

$x_2 + y_2 = 1 \qquad (1)$

に注目します。判りやすいように，

$1 \geq x \geq -1; 1 \geq y \geq 0$

としておきます。

$g(x) = \sqrt{1 - x^2}$

とすると，$1 \geq x \geq -1; 1 \geq y \geq 0$ では (1) の方程式を満たす x,y については

$y = g(x)$

という関係が成り立っています。この $g(x)$ という関数は，(1) 式の中には出てきません。(1) からこのように間接的に導き出される関数を陰関数と呼びます

一般的に書けば $f(x; y) = 0$ という式から陰関数 $y = g(x)$ が定義されるということです。

#上の例では　$f(x; y) = x^2 + y^2 - 1$

しかし，何時でも上の例のように，$f(x; y) = 0$ から陰関数 $y = (x)$ が定義されるわけではありません。良く知られる定理では

[陰関数定理]

ある領域 $D \subset R \times R$ で関数 $f(x; y)$ が連続でかつ,x,y について偏微分可能で,
その偏導関数

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x; y) \qquad (1)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x; y) \qquad (2)$$

も $(x; y)$ について連続とする。

D 内の１点 $(x_0; y_0)$ で $f(x_0; y_0) = 0$ であり,

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x_0; y_0) \neq 0 \qquad (4)$$

とする。

このとき，x_0 を含む $[a,b]$ とその上の連続関数 $g(x)$ が与えられ

(1) 区間 $[a,b]$ 上で $f(x,g(x)) = 0$

(2) $y_0 = g(x_0)$

(3) 区間 $[a,b]$ 上で，

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{\partial f/\partial x}{\partial f/\partial y} \qquad (5)$$

さて，元の問題に返る準備をします。

関数 $L(x,y)$ が，制約条件

$f(x,y) = 0$

の元に

$(x,y) = (x_0,y_0)$ で極値 (極大値か極小値) をとるとします。

$L(x,y)$ が (x,y) について微分可能な関数で，関数 $f(x,y)$ は (x_0,y_0) が上の道具その２の陰関数定理を適用できる条件を満たしているものとします。

すると，x_0 の近傍で関数 $g(x)$ が存在して，x_0 のその近傍では

$f(x,g(x)) = 0$　が成り立ち，$y_0 = g(x_0)$,$f(x_0,g(x_0)) = 0$ も成り立っています。

すると，関数 $L(x,y)$ は (x_0,y_0) で極値 (極大値か極小値) をとるのですから

$F(x) = L(x,g(x))$ も $x = x_0$ で極値を取ります。

道具その１を使えば,

$$\frac{dF}{dx}(x_0) = 0 \qquad (6)$$

です。この x についての微分を求めると $F(x)$ は合成関数ですから

$$\frac{dF}{dx}(x_0) = \frac{\partial}{\partial x}L(x_0,g(x_0)) + \frac{\partial}{\partial y}L(x_0,g(x_0))\frac{d}{dx}g(x_0) \qquad (7)$$

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{\partial f/\partial x}{\partial f/\partial y} \qquad (8)$$

$y = g(x)$ でしたから (8) 式を上の (7) 式に代入し

$$\lambda = \frac{\partial}{\partial y}L(x_0,g(x_0))\left\{-\frac{\partial f}{\partial y}\right\}^{-1} \qquad (9)$$

という変数を使うと，

$$0 = \frac{dF}{dx}(x_0) = \frac{\partial}{\partial x}L(x_0,g(x_0)) + \lambda\frac{\partial}{\partial x}f(x_0,g(x_0)) \qquad (10)$$

また

$$\lambda\frac{\partial}{\partial y}f(x_0,g(x_0) = -\frac{\partial}{\partial y}L(x_0,g(x)) \qquad (11)$$

から

$$0 = \frac{\partial}{\partial y} L(x_0, g(x_0)) + \lambda \frac{\partial}{\partial y} f(x_0, g(x_0)) \qquad (12)$$

すなわち λ という新しい変数を使って

$$H(x, y, \lambda) = L(x, y) + \lambda f(x, y) \qquad (13)$$

という関数を造ると:
「関数 $L(x, y)$ が制約条件
$f(x, y) = 0$
の元に
$(x, y) = (x_0, y_0)$ で極値 (極大値か極小値) をとる」
という条件から H についての制約のない場合の極値条件

$$\frac{\partial}{\partial x} H(x_0, y_0, \lambda) = 0 \qquad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} H(x_0, y_0, \lambda) = 0 \qquad (15)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} H(x_0, y_0, \lambda) = f(x_0, y_0) = 0 \qquad (16)$$

が出てきます。

要するに，制約条件付きの極値問題から，λ という人工的な変数を使って

目的の関数 + λ × (制約条件を表す関数)

の制約条件のない場合の極値条件が出てきたわけです。
ただしこの議論は「その点が最大 (小) 値を与える」⇒「その点が極値が与える」⇒「その点での微分係数＝0」
という必要条件の連鎖でやってきましたので注意が必要です。

「微分係数＝0」は必要条件ですから，これが満たされても，極値かどうかチェックの必要があり，さらには H の極値を与える (x_0, y_0) が求められたとしても，それが最大 (小) 値を与えるのか確かめる必要があります。

また，少なくとも L と f が x, y について微分可能であることも必要です。
ここで使われた λ をラグランジュ乗数といいます。

問題

$L(x, y) = x + y$ とするとき，
半径１の円周
$x^2 + y^2 = 1$
上の点 (x, y) で $L(x, y)$ を最大にするものを求めよ。

について

$f(x;y) = x^2 + y^2 - 1$

として，今までの議論を用いて解を求めてください。

#(14),(15),(16) を連立して解くということです。

10 非線形計画法

10.1 1次アルゴリズム

10.1.1 関数の勾配

$$l(x;y) = x + y + x^2 + y^2$$

を例にとって説明します。$l(x;y)$ を列ベクトルと行列

$$p = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix};\ x = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix};\ Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

を使って表現すると

$$l(x;y) = (1;1)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + (x;y)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

から

$$l(x) = p^T x + x^T Q x$$

と書けます。

ここで,$l(x;y)$ の $x;y$ についての偏微分係数はそれぞれ,

$$\frac{\partial l}{\partial x}(x;y) = 1 + x$$
$$\frac{\partial l}{\partial y}(x;y) = 1 + y$$

です。これらを要素にもつ列ベクトルは, $l(x) = l(x;y)$ の x についての微分であり,

$$\frac{dl}{dx}(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial l}{\partial x}(x;y) \\ \frac{\partial l}{\partial y}(x;y) \end{pmatrix} = p + 2Qx$$

です。また,$l(x)$ の2階微分は

$$\frac{d^2 l}{dx^2}(x) = 2Q$$

です。さて,

$$\Delta x = \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}$$

として,

$$
\begin{aligned}
&I(x + \Delta x)\\
&= p^T(x + \Delta x) + (x + \Delta x)^T Q(x + \Delta x)\\
&= p^T x + x^T Qx + p^T \Delta x) + 2x^T Q\Delta x + \Delta x^T Q\Delta x\\
&= I(x) + \frac{dI}{dx}(x)^T \Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T \frac{d^2I}{dx^2}(x)\Delta x
\end{aligned}
$$

結局,

$$I(x + \Delta x) = I(x) + \frac{dI}{dx}(x)^T \Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T \frac{d^2I}{dx^2}(x)\Delta x$$

となります。

無論, 一般の関数 $I(x)$, 解析的な関数なら,

$$I(x + \Delta x) = I(x) + \frac{dI}{dx}(x)^T \Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T \frac{d^2I}{dx^2}(x)\Delta x + o(\Delta x)$$

となります。$o(\Delta x)$ は３次以上の高位の項です。

10.1.2 勾配を使う計算法

さて,$I(x) = I(x; y)$ を最小化するため, 先ず, 初期点

$$x_0 = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}$$

を与えて,$I(x_0)$ を求め, 次に,

$x = x_0$ での $I(x)$ の微分,

$$\frac{dI}{dx}(x_0) = p + Qx_0$$

を求め, これと微小な正数 $\epsilon > 0$ を使って,

$$\Delta x = -\epsilon\frac{dI}{dx}(x_0)$$

として,$I(x_0 + \Delta x)$ を計算すると,

$$
\begin{aligned}
&I(x_0 + \Delta x)\\
&= I(x_0) + \frac{dI}{dx}(x_0)^T \Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T \frac{d^2I}{dx^2}(x_0)\Delta x\\
&= I(x_0) - \epsilon\frac{dI}{dx}(x_0)^T \frac{dI}{dx}(x_0) + \epsilon^2\frac{dI}{dx}(x_0)^T \frac{d^2I}{d^2x}(x_0)\frac{dI}{dx}(x_0)
\end{aligned}
$$

ここで, 任意のベクトル

$$z = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

について

$$z^T z = p^2 + q^2$$

ですから,$z^T z \geq 0$ です。同様に,

$$\frac{dI}{dx}(x_0)^T \frac{dI}{dx}(x_0) \geq 0$$

$$\frac{dI}{dx}(x_0)^T Q \frac{dI}{dx}(x_0) \geq 0$$

です。ε が十分小さければ,

$$\Delta x = -\varepsilon \frac{dI}{dx}(x_0)$$

として,

$$I(x_0 + \Delta x) < I(x_0)$$

となります。

$$x_1 = x_0 + \Delta x$$

を新たな初期点としてこれを繰り返すことができます。このような方法を勾配法といいます。特に, 毎回の繰り返しで,

$$I(x_n - \varepsilon_n \frac{dI}{dx}(x_n)) = \min_{\varepsilon; \varepsilon > 0} I(x_n - \varepsilon \frac{dI}{dx}(x_n))$$

となるように,ε_n を選ぶ繰り返し計算法を最急降下法と呼びます。

$$I(x_n + \varepsilon_n \delta_n) = \min_{\varepsilon; \varepsilon > 0} I(x_n + \varepsilon \delta_n)$$

$$x_{n+1} = x_n + \varepsilon_n \delta_n$$

δ_{n+1} : x_{n+1}によって決まる何らかの方向ベクトル

を繰り返しながら

$$\{x_n\}, \{\delta_n\}, \{\varepsilon_n\}$$

を生成し,

$$\lim_{n \to \infty} I(x_n) = \min_{\mathbf{x}} I(x)$$

とする計算法は, 一次アルゴリズムと呼ばれています。

10.2 2次アルゴリズム

$$I(x + \Delta x) = I(x) + \frac{dI}{dx}(x)^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T \frac{d^2 I}{dx^2}(x) \Delta x$$

を使って, 高速なアルゴリズムを造ります。

$$\Delta x = y - x$$

とおき, 上の式の右辺を書き換えます。

$$I(x) + \frac{dI}{dx}(x)^T (y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T \frac{d^2 I}{dx^2}(x)(y - x)$$

これは y についての 2 次式です。この式が y について, 極小になるための条件は, 極値条件 (y についての微分が 0 ベクトル)

$$\frac{dI}{dx}(x) + \frac{d^2 I}{dx^2}(x) y = 0$$

です。これから, 行列

$$\frac{d^2 l}{dx^2}(x)$$

が正則 (逆行列をもつ) とすれば,

$$y = -\left(\frac{d^2 l}{dx^2}(x)\right)^{-1}\frac{dl}{dx}(x)$$

が得られます。

$$x_{k+1} = -\left(\frac{d^2 l}{dx^2}(x_k)\right)^{-1}\frac{dl}{dx}(x_k)$$

を繰り返すアルゴリズムはニュートン法と呼ばれます。