

最適化と評価のデリバティブ

01003676 九州大学 岩本 誠一 IWAMOTO Seiichi

1 はじめに

この報告では、(1) 多重積分、(2) 多変数関数の最適値、および(3) 積分評価の最適値、を求める「再帰式」をそれぞれ導き、各再帰式の「微分」をとる。微分した再帰式が表す問題を原問題のデリバティブ(派生問題)という。あわせて非確率的動的計画法を導入する。

2 多重積分の評価

いま a_m 正の定数として、2次の n 変数加法型関数

$$f_n(x) := a_1 x_1^2 + a_2 x_2^2 + \cdots + a_n x_n^2$$

の D 上の n 重積分

$$\mathcal{P}_n(c) \quad \text{eval} \quad \iint \cdots \int_D f_n(x) dx_1 dx_2 \cdots dx_n$$

を考えよう。ただし

$$D: \begin{cases} \text{(i)} & x_1 + x_2 + \cdots + x_n \leq c \\ \text{(ii)} & x_m \geq 0 \quad 0 \leq m \leq n \end{cases}$$

ここに $c \geq 0$ 。これを積分評価問題という。この値を $w_n(c)$ とすると、前向き再帰式

$$\begin{cases} w_1(c) = r_1(c) \\ w_n(c) = r_n(c) + \int_0^c w_{n-1}(x) dx \end{cases}$$

が成り立つ。ただし

$$r_n(c) = \int_0^c \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} a_n (c-x)^2 dx.$$

3 多変数最適問題

加法型関数の n 変数最適問題を考えよう。

$$\begin{aligned} \min \quad & a_1 u_1^2 + a_2 u_2^2 + \cdots + a_n u_n^2 \\ \mathcal{P}_n(x) \quad \text{s.t.} \quad & \text{(i)} \quad u_1 + u_2 + \cdots + u_n = x \\ & \text{(ii)} \quad u_m \geq 0 \quad 0 \leq m \leq n \end{aligned}$$

ただし a_m 正の定数。 x は非負の実定数であるが、以下の解析では変数としてとらえる。この最小値を $v_n(x)$ とすると、次の前向き再帰式が成り立つことがわかる。

補題 3.1

$$\begin{aligned} v_1(x) &= a_1 x^2 \\ v_n(x) &= \min_{0 \leq u \leq x} [a_n u^2 + v_{n-1}(x-u)]. \end{aligned} \quad (1)$$

これは確定的動的計画法である。(1)の最小値を与える関数 $\hat{u}_n = \hat{u}_n(x)$ は比例式(proportional) $\hat{u}_n(x) = \hat{u}_n x$ ($0 \leq \hat{u}_n \leq 1$) になることがわかる。したがって、(1)においては $u = u(x) = \hat{u}_n x$ ($0 \leq u \leq x$) なる微分可能な $u = u(x)$ で最小化しても十分である。このとき、(1)の両辺は x で微分可能で、その導関数 $w_n(x) := v'_n(x)$ は次の再帰式を満たす。

定理 3.1 (1階微分) $x \geq 0$ のとき

$$\begin{aligned} w_1(x) &= 2a_1 x \\ w_n(x) &= \min_{0 \leq u \leq x} [2a_n u^2 x + (1-u)w_{n-1}(x-ux)]. \end{aligned} \quad (2)$$

これは n 変数最小化問題

$$\begin{aligned} \min \quad & 2a_1 x u_1^2 + 2a_2 x (1-u_1)^2 u_2^2 + \cdots \\ & + 2a_{n-1} x (1-u_1)^2 \cdots (1-u_{n-2})^2 u_{n-1}^2 \\ \mathcal{F}_n(x) \quad & + 2a_n x (1-u_1)^2 \cdots (1-u_{n-2})^2 (1-u_{n-1})^2 \\ \text{s.t.} \quad & 0 \leq u_m \leq 1 \quad 1 \leq m \leq n-1 \end{aligned}$$

の再帰式である。ただし $w_n(x)$ は $\mathcal{F}_n(x)$ の最小値とし、 $w_1(x) = 2a_1 x$ である。さらに1階微分の再帰式(2)の両辺を微分すると、その導関数 $z_n(x) := w'_n(x)$ は次の再帰式を満たす。

定理 3.2 (2階微分) $x \geq 0$ のとき

$$\begin{aligned} z_1(x) &= 2a_1 \\ z_n(x) &= \min_{0 \leq u \leq 1} [2a_n u^2 + (1-u)^2 z_{n-1}(x-ux)]. \end{aligned}$$

これは $\mathcal{F}_n(x)$ の目的関数から x を「削除」した最小化問題 $\mathcal{S}_n(x)$ の再帰式になっている。

4 多重積分の最適化

いま簡単のために 2 変数関数 f, g と 1 変数関数 h を 2 次関数

$$\begin{aligned} f(x, u) &= x^2 + (u - x)^2 + u^2 \\ g(y, v) &= y^2 + (v - y)^2 + v^2 \\ h(z) &= z^2 \end{aligned}$$

として、5 変数の加法型関数

$$\begin{aligned} &f(x, u) + g(y, v) + h(z) \\ &= [x^2 + (u - x)^2 + u^2 + y^2 + (v - y)^2 + v^2 + z^2] \\ &= [\dots] \end{aligned}$$

を考える。非負の実数 a を任意に与えて、閉区間 $[0, a]$ 上の連続関数全体を $U(a)$ とする。2 つの関数 $u = u(x), v = v(y)$ を $U(a)$ から選ぶと、 R^3 の単体領域

$$D = \{(x, y, z) \mid x + y + z \leq a, x \geq 0, y \geq 0, z \geq 0\}$$

上の実数値関数 $[\dots]$ が定まる。したがって、この関数の D 上の 3 重積分の値が確定する〈評価〉。この積分値を最小にするには、 $U(a)$ からどのような対 (u, v) を選べばよいだろうか〈最適化〉? この最小化問題を

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_1(a) \quad &\min \iiint_D [\dots] dx dy dz \\ &\text{s.t. } (u, v) \in U(a) \times U(a) \end{aligned}$$

で表し、積分最小化問題という。

これを動的計画法で解くには、次のような埋め込みを行う。

$$E = \{(y, z) \mid y + z \leq a, y \geq 0, z \geq 0\}$$

上の積分最小化問題

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_2(a) \quad &\min \iint_E [g(y, v) + h(z)] dy dz \\ &\text{s.t. } v \in U(a) \end{aligned}$$

および $F = [0, a]$ 上の積分評価問題

$$\mathcal{P}_3(a) \quad \text{eval} \int_F z^2 dz$$

を導入しよう。

さて問題 $\mathcal{P}_n(a)$ の最小値 (評価値) を $w_n(a)$ とし、

$$r_2(a, v) = \int_0^a (a - y) [y^2 + (y - v)^2 + v^2] dy$$

$$r_1(a, u) = \int_0^a \frac{(a - x)^2}{2} [x^2 + (x - u)^2 + u^2] dx$$

としよう。このとき、次の関係式が成り立つ。

補題 4.1

$$\begin{aligned} w_3(a) &= \frac{a^3}{3} \\ w_2(a) &= \min_{v \in U(a)} \left[r_2(a, v) + \int_0^a w_3(a) dy \right] \\ w_1(a) &= \min_{u \in U(a)} \left[r_1(a, u) + \int_0^a w_2(a) dx \right]. \end{aligned} \quad (3)$$

これは加法型評価をもつ 3 段階動的計画法の後ろ向き再帰式である。この動的計画法のダイナミクス (推移システム) はしかし確定的 (deterministic) でも、確率的 (stochastic) でもない。一般に確定的システムは確率的システムの特別な場合であるから、この推移システムは非確率的 (non-stochastic) と言える。この非確率的動的計画の状態空間は連続な空間 $S = [0, \infty)$ で、状態 $a (\in S)$ における可能な決定空間は $U(a)$ である。状態 a で決定 $u \in U(a)$ をとると、 $z \in [0, a]$ なる任意の z に推移加重 1 で次の状態に行く。 r_1, r_2 が各段利得 (コスト) 関数で、終端利得 (コスト) 関数は $k(a) = \frac{a^3}{3}$ である。この状態推移は決定に依存していない。

式 (3) を微分すると、次の再帰式が成り立つ。

補題 4.2 (1 階微分)

$$\begin{aligned} w'_3(a) &= a^2 \\ w'_2(a) &= \min_{v \in U(a)} \left[r'_2(a, v) + \int_0^a w'_3(y) dy \right] \\ w'_1(a) &= \min_{u \in U(a)} \left[r'_1(a, u) + \int_0^a w'_2(x) dx \right]. \end{aligned}$$

ただし $r'_2(a, v)$ と $r'_1(a, u)$ はそれぞれ $r_2(a, v)$ と $r_1(a, u)$ の a による微分である:

$$r'_2(a, v) = \int_0^a [y^2 + (y - v)^2 + v^2] dy$$

$$r'_1(a, u) = \int_0^a (a - x) [x^2 + (x - u)^2 + u^2] dx.$$