最適化逆問題
– 変分法と GP による最適関数探索 –

2000MM034 加藤 元英
指導教員　宮元 忠敏

1　はじめに

自然科学でしばしば問題とされるもののひとつに最適化問題がある．最適化問題といえば，高校数学から勉強してきた最小値や最大値を求める問題から，OR などの応用数学などにも現れる問題である．さらには，化学，物理，生物，環境学，経済学，情報工学など，様々な分野で扱われる問題でもある．

本研究では，その最適化問題のなかでも，「与えられた条件（環境）の中で最適なもの（行動）は何か？」という逆問題の最適化を考える．すなわち，数学的に言うのであれば与えられた条件下での関数群の中から，ある種の最適を満たす関数を探すこととなる．

この最適化逆問題を変分法という数学的な方法と，GP（Genetic Programming；遺伝的プログラミング）という工学的な方法の二通りの手法でアプローチする．[1] によれば，変分法の重要なところは，他の最適化問題と異なり，いろいろな実際問題を解くことができるからというだけではなく，それによって古典物理学ならびに現代の量子力学における物理法則を発見し，定式化する，きわめて一般的な方法を与えていることである．数学的に最適解を探す変分法を研究するとともに，それを工学的にプログラムで見つけ出す手法を同時に研究する．それが，GP である．[3] によれば，GP は近年盛んに研究されている分野のひとつで，GA（Genetic Algorithm；遺伝的アルゴリズム）の拡張であり，進化論的な考え方に基づいてデータを操作し，最適化の問題や学習，推論を扱う手法である．

この二通りの手法によって，最適化問題を解く手法を構築するとともに，実際の最適化問題を解いた．

2　逆問題とは何か

本論文では，最適化問題の中でも逆問題という問題を二つの手法でアプローチする．では，逆問題とは何であろうか？逆問題には対となる順問題というのがある．

最速降下問題において，順問題と逆問題は次のようになる．

> 順問題；サイクロイドは最速降下問題の解であるか否か？
> 逆問題；最速降下問題の解は何か？

順問題の答えは，サイクロイドというものが，最速降下問題の解であるかどうかを判断するだけなので，「Yes」か「No」の二択である．一方，逆問題のほうは話が違う．無限にある選択肢の中から，解を選ばなくてはならない．このように，与えられた条件を満たす無限の（またはそれに近い有限の）候補の中から解を探し出すのが逆問題である．

3　変分法

[2] によれば，変分法とは考える対象がたくさんありすぎて困っているとき，その中から最もよい事物を選択する方法のことであり，下記の基本問題を拡張することによって，様々な問題を解くことができる．

> **基本問題**
>
> $F(x,y,z)$ をその各変数に関する 2 階以下の連続な偏導関数をもつ関数とする．このとき条件
>
> $$y(a)=A, y(b)=B$$
>
> を満足し，連続な導関数をもつすべての関数 $y(x)$ のうちで，汎関数
>
> $$J[y]=\int_a^b F(x,y,y')dx$$
>
> が $\mathcal{D}_1$ 極値をとるものを求めよ．

この基本問題に対して，この汎関数が極値をとる必要条件は下記のように与えられる．ある関数 $y(x)$ で極値をとるための必要条件は，この関数 $y(x)$ がオイラーの方程式

$$F_y-\frac{d}{dx}F_{y'}=0$$

を満足することである．さらに，十分条件は下記のように与えられる．許容曲線 $y=y(x)$ が，$\mathcal{D}_1$ 極小を実現するための十分条件は，下記 1〜3 が同時に成り立つことである．

1. 曲線 $y=y(x)$ がオイラーの方程式を満足する．
2. この曲線 $y=y(x)$ に沿って，

$$P(x)\equiv\frac{1}{2}F_{y'y'}(x,y(x),y'(x))>0$$

　である（ルジャンドルの強条件）
3. 区間 $[a,b]$ が，点 a の共役点を含まない（ヤコビの強条件）．

この汎関数の極値をとるための必要条件であるオイラーの方程式と十分条件によって最速降下問題など，様々な変分問題を解くことができる．しかし，簡単に

解くことのできない微分方程式が存在する．そこで，問題となるのが汎関数に極値があるのか．という問題である．

4　曲線の極値

汎関数に極値があるのかを判別する『条件 (C)』をリーマン多様体に制限したものが，下記である．

条件 (C)

(M, g) を C^{k+1} リーマン多様体，$k \geq 1, f : M \to \mathbb{R}$ を C^{k+1} 級関数とする．関数 f が条件 (C) を満たすとは，次が成立することである．
M の部分集合 S が，次の条件を満たすとする．

$$f \text{ は } S \text{ 上有界で}, \inf_{S} \|\nabla f\| = 0$$

このとき，S の閉包 $\bar{S}$ 内の点 p で，p は f の臨界点，すなわち，$\nabla f_p = 0$ となるものが存在する．

そして，これより，曲線の最小値存在性を示す定理を導出することができる．

定理

(M, g) を完備 C^2 リーマン多様体，$f : M \to \mathbb{R}$ を C^2 級関数で，条件 (C) を満たす．M_0 を M の 1 つの連結成分とし，f は M_0 で，下に有界とする．このとき，f の M_0 への制限は，その下限を実現する

この条件 (C) によって，様々な曲線の極値を調べることができる．

5　遺伝的プログラミング

生物界の選択・生殖・突然変異・世代交代という遺伝のシステムをアルゴリズムに応用したものが，遺伝的プログラミングである．

その GP を使用して，変分法に対応する関数探索プログラムを作成した．すなわち，汎関数の条件を与えれば，その汎関数の極値をとる関数を自動的に探し出すプログラムである．

このプログラムで汎関数

$$J[y] = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_0^{x_1} \frac{\sqrt{1 + (y')^2}}{\sqrt{y}} dx$$

の極値（正確には，作成された関数群の中でもっとも小さい値の関数）を計算させ，サイクロイドに近いものを得た．ここで注意しておきたいのは，サイクロイドは x が陽に現れない関数であるが，それを x の陽関数で近似した点である．

プログラムの概要

GTYPE	最大 200 個のノード
PTYPE	木構造による関数
適合度	汎関数の値
選択	トーナメント方式
交叉	一点交叉
突然変異	ノードの種類を変更

条件を『個体数；100，世代数；100，突然変異確率；0.2』として，何回か計算した結果のひとつを示す．求まった関数は，

$$y(x) = x^2 / \exp\{\cos(\cos x)\}$$

そのときの木構造は下図．

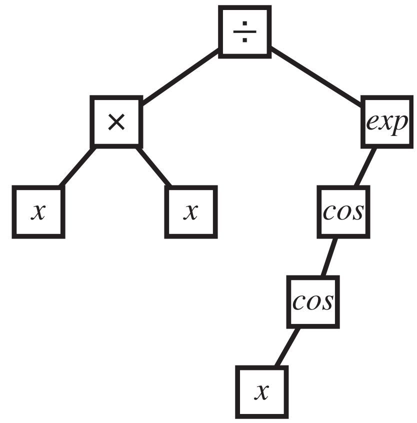

図 1　プログラム結果；木構造

求まった関数のグラフが下図．

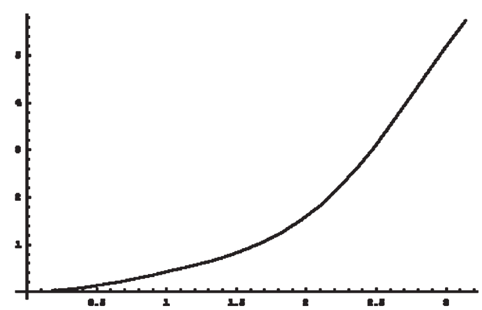

図 2　プログラム結果；グラフ

6　おわりに

以上の，数学的（数理）なアプローチとして変分法と，その助けとなる条件 (C) を，工学的（情報）なアプローチとして GP による汎関数の極値探索プログラムによって，最適化逆問題を二つの方向から捉えることができた．

参考文献

[1] イ・エム・ゲリファント，エス・ヴェ・フォーミン：変分法, 文一総合出版 (1986).
[2] 浦川　肇：変分法と調和関数, 裳華房 (1991).
[3] 伊庭　斉志：情報科学セミナー　遺伝的プログラミング, 東京電機大学出版 (1996).