

制約条件付き連立方程式の解法

小林 富士男* 尾関 孝史* 筒本 和広**

An Algorithm of Constrained Simultaneous Equations

Fujio KOBAYASHI* Takashi OZEKI* Kazuhiro Tsutsumoto**

ABSTRACT

Applying simultaneous linear equations to physics and engineering, the measured values may involve some errors inevitably and sometimes the number of equations may be larger than that of unknowns. The most probable values are generally found from the normal equations derived by the least squares method. While, absurd solutions which are not to be in the problems of physics or engineering are sometimes obtained from the normal equations.

As a way to overcome those difficulties we developed an algorithm of constrained simultaneous equations for processing the data under the conditions that satisfy the pertinent physical meanings of solutions. The method is based upon an idea that the optimum solutions of unknowns to be solved are obtained by taking the minimum value of a penalty function. The penalty function is the sum of squared solutions which violated the restrictions. One correction term is added in each equation. When all values of correction terms are put zero, the solutions obtained from these equations are used as the initial values. The penalty function is calculated slightly changing the value of any one of corrections. Same calculations are carried out against each correction. Next, the values of penalty function which are smaller than that of former step are chosen. Among the chosen values, the minimum value which are the sum of squared corrections are taken as a value of new step. Thus the solutions obtained by iterative calculations approach to the optimum solutions.

In this paper, the algorithm of constrained simultaneous equations is described in detail. Last, two examples are presented which are the applications of this method. The one is related to simultaneous linear equations which is ill condition. The other is concerned in particular problem which deals with simultaneous linear equations composed of measured values for obtaining spectral transmittances of an optical filter by means of retarding potential method. The later case, the simultaneous linear equations include some unavoidable errors.

キーワード：連立方程式，アルゴリズム，制約条件，ペナルティ関数，数理計画法，誤差
Keywords：Simultaneous Equations, Algorithm, Constrained Condition, Penalty

*情報処理工学科 **人間文化学部 環境情報学科

1. まえがき

近年、数理計画の非線形計画法は経営管理や生産計画の経済、社会問題だけでなく、電力、通信の系統、回路網、化学プラントの設計など工学問題にも広く応用されるようになった。これらの現実問題を扱うとき、物理的、経済的理由により、未知数に制約がつくことがよくある。

例えば、電子回路の設計においては負のインダクタンスは実現不可能であり、また工場設備、人員は有限であるから、無限に機材や人員を使用することはできない。それゆえ、実現不可能な最適解は実用には無意味なものであり、実際には制約領域内で最適解を求めなければ役に立たない。

制約条件付きの非線形計画法としては、実行可能方向法 [1]、勾配射影法 [2]、ペナルティ関数法 [3]、線形計画法を応用した MAP [4]、試行探索法のコンプレックス法 [5]、制約条件が 1 次で目的関数が 2 次の場合の手法として 2 次計画法 [6] などがある。このように、非線形計画問題を解く方法は種々あるが、解の収束性、計算手順の複雑さ、記憶容量、計算時間など、今後解決すべき問題が多く残されている。最近、これらの各解法の中でペナルティ関数法は、注目され研究が続けられている。

連立 1 次方程式に制約条件を付加し、誤差の絶対値の総和を最小にして最適解を求める方法は、線形計画法が利用できて好都合である [7]。しかし、誤差の絶対値の総和よりも、誤差の自乗和を最小にして最適解を求める方が誤差論の立場から好ましい。誤差の自乗和を最小にして、実行可能領域内で解く内点法については既に発表した [8]、その方法によると悪条件の問題（正規化した行列式の値が ±1 より相当小さい場合）は、収束が遅くなる傾向がある。それに対して悪条件の場合にも、一般にそれほど収束が遅くならない外点法を本論文で述べている。

その方法は、まず最初に各修正値を全て零としたときの解を初期値とし、ペナルティ関数を評価関数として、その評価関数が改善される方向に微少移動しながら、次第に制約条件が満足される最適解を求めるのである。

2. ペナルティ関数を用いた解法

n 個の未知数 $x_j (j=1, 2, \dots, n)$ の値を求めようとする場合、その未知数と測定値 b_i の間には、次の関係が

成立しているとする。

$$\left. \begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j &= b_i + \varepsilon_i \\ l_j &\leq x_j \leq u_j \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

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

ただし、 a_{ij} は定数（測定値であってもよい）、 ε_i は誤差、 l_j は解の下限、 u_j は解の上限をそれぞれ表している。

ある量の測定を同一装置を用いて、同じ注意を払って同じ方法で繰り返して行くと、これらに含まれる偶然誤差は正規分布をすると考えられる。いま精度指数を h とすれば、 ε_i から $\varepsilon_i + d\varepsilon_i$ 中に含まれる誤差の確率 $P(\varepsilon_i)$ は

$$P(\varepsilon_i) = \frac{h}{\sqrt{\pi}} e^{-h^2 \varepsilon_i^2} d\varepsilon_i \quad (2)$$

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

となる。これらの個々の測定は独立事象であるから、 ε_i の n 個の誤差が一組となって起こる確率 $P(\varepsilon)$ は

$$P(\varepsilon) = \left(\frac{h}{\sqrt{\pi}} \right)^n e^{-h^2(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \dots + \varepsilon_n^2)} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \dots d\varepsilon_n \quad (3)$$

となる。最も起こりやすい誤差の一団は $P(\varepsilon)$ を最大

にする値であり、式 (3) から $\sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2$ が最小のとき $P(\varepsilon)$

は最大となる。

測定回数が無限大で、偶然誤差だけが含まれている場合には、未知数 x_j の真の値が得られる。しかし、実際にはそうはできないので

$$\left. \begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j &= b_i + \Delta_i \\ l_j &\leq x_j \leq u_j \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

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

のもとに,

$$Z = \sum_{i=1}^n \Delta_i^2 \quad (5)$$

を最小とする未知数 x_j を求めることを考える。

ただし, Δ_i は修正値を表わしている。式 (4) におい

て未知数の係数行列

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \quad (6)$$

は正規で, 解の許容範囲 R は凸集合とする。式 (6) の逆行列を求め

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & \alpha_{nm} \end{bmatrix} \quad (7)$$

とすれば

$$x_i = \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} (b_j + \Delta_j) \quad (8)$$

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

となる。いま, $\Delta_j = 0$ ($j=1, 2, \dots, n$) としたとき,

x_i ($i=1, 2, \dots, n$) の値は, 式 (4) を満足しないものと仮定する。

まず最初に, $\Delta_j^{(0)} = 0$ としたときの各未知数の値

$x_j^{(0)}$ を初期値とし, 次式のペナルティ関数を評価関数

としてその関数値を計算する。

$$F^{(0)} = \sum_{i=1}^n \left\{ (x_i^{(0)} - u_i)^2 \cdot H(u_i - x_i^{(0)}) + (x_i^{(0)} - l_i)^2 \cdot H(x_i^{(0)} - l_i) \right\} \quad (9)$$

ただし, $H(y)$ は Heaviside 関数で

$$\begin{cases} H(y) = 1, & \text{if } y < 0 \\ H(y) = 0, & \text{if } y \geq 0 \end{cases} \quad (10)$$

である。仮定により $F^{(0)}$ の値は零でない。 b_i にわず

か修正を加えては評価関数を求める。このようにして修正値の自乗和が最小で, 評価関数が減少する方向を見出しながら次第にその方向へ修正を行う。

このような手順を $S-1$ ステップから S ステップを求める一般の形で表わすと次のようになる。正で十分小さな値を δ とし,

$$(a) \quad \begin{cases} \beta_j^{(k)} = \Delta_j^{(S-1)} + u(k-j) \cdot \delta & \text{if } k: \text{odd number} \\ \beta_j^{(k)} = \Delta_j^{(S-1)} - u(k-j) \cdot \delta & \text{if } k: \text{even number} \end{cases} \quad (11)$$

を $k=1, 2, \dots, 2n$ とし, 各 k に対して $j=1, 2, \dots, n$ と

して計算する。ただし, $u(k-j)$ は単位インパルス関数で

$$\begin{cases} u(k-j) = 1, & \text{if } k = j \\ u(k-j) = 0, & \text{if } k \neq j \end{cases} \quad (12)$$

である。

$$(b) \quad \bar{x}_j^{(k)} = x_j^{(0)} + \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \beta_j^{(k)} \quad (13)$$

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

を求め, ペナルティ関数

$$f^{(k)} = \sum_{i=1}^n \left\{ (\bar{x}_i^{(k)} - u_i)^2 \cdot H(u_i - \bar{x}_i^{(k)}) + (\bar{x}_i^{(k)} - l_i)^2 \cdot H(\bar{x}_i^{(k)} - l_i) \right\} \quad (14)$$

$$(k=1, 2, \dots, 2n)$$

を計算する。

(c) いま求めた $f^{(k)}$ の中から次式を満足するもの, すなわち, $S-1$ ステップの評価関数の値よりも小さ

な値のものを \bar{k} とする。

$$F^{(S-1)} > f^{(\bar{k})} \quad (15)$$

(d) \bar{k} の中から修正値の自乗和が最小なものを選び、 \hat{k} とする。

$$\sum_{j=1}^n (\beta_j^{(\hat{k})})^2 = \min_k \left\{ \sum_{j=1}^n (\beta_j^{(k)})^2 \right\} \quad (16)$$

(e) \hat{k} に対する各値は、 S ステップで得られる最適値であるから

$$F^{(S)} = f^{(\hat{k})} \quad (17)$$

$$\Delta_j^{(S)} = \beta_j^{(\hat{k})} \quad (18)$$

$$(j=1, 2, \dots, n)$$

$$x_i^{(S)} = \bar{x}_i^{(\hat{k})} \quad (19)$$

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

とおく。

$$(f) F^{(S)} > e \quad (20)$$

ならば繰り返し計算を続ける。

$$F^{(S)} \leq e \quad (21)$$

ならば計算を終了する。ただし、 e は前もって定めた十分小さな正の定数である。(理論的には $e=0$ である。実際の数値計算では丸め誤差の影響で、本来なら 0 となるべきものが 0 とならないために、最適解を通り過ぎることがある。これを避けるために、例えば $e=1.0 \times 10^{-30}$ のようにする。) 図 1 は本計算法の流れ図である。

3. ペナルティ関数を用いた解法の収束

第 2 章で述べたペナルティ関数を用いた解法によって求めた各未知数の近似値が、最適解へ収束することを以下で証明する。

前述のアルゴリズムから、 S ステップでは、

$$\sum_{j=1}^n (\Delta_j^{(S)})^2 = \min_k \left\{ \sum_{j=1}^n (\beta_j^{(k)})^2 \right\} \quad (22)$$

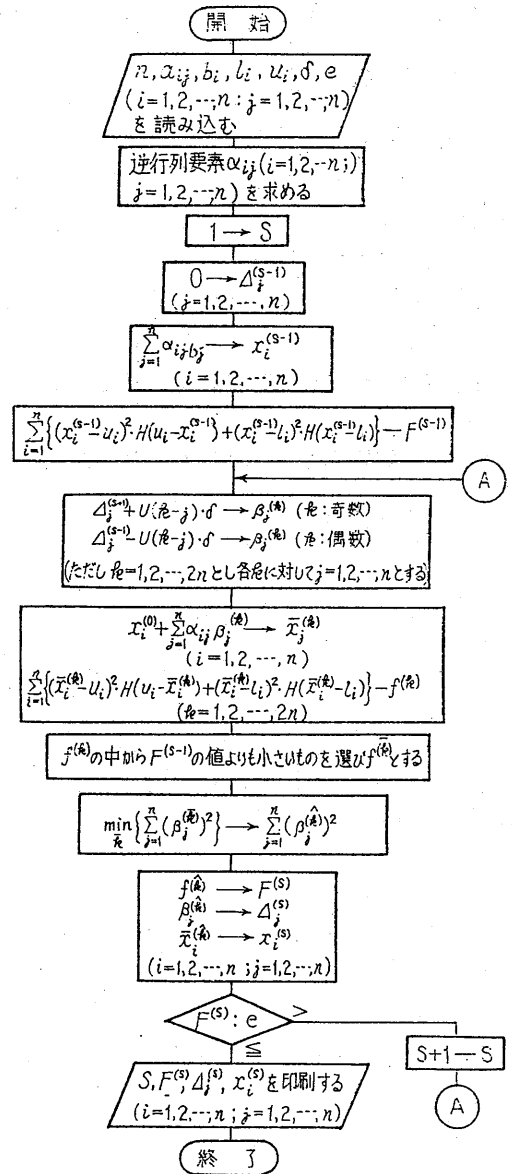


図 1. 本計算法の流れ図

Fig.1 Flow chart of the algorithm.

であり、各未知数の近似値が式 (5) を最小とするベクトル方向へ収束することは自明である。その近似値が果たして最適解に収束するか否かが問題である。しかし、評価関数 $F^{(S)}$ は凸関数であり、最終ステップ以前の各ステップでは最小点にまだ達していない。したがって常に次の関係が成立する。

$$F^{(S-1)} > F^{(S)} \quad (23)$$

かくして $F^{(S)}$ は S の増加とともに減少し、かつ下に有界であるから収束する。よって $S \rightarrow \infty$ のとき

$F^{(s)} \rightarrow 0$ となる。

それゆえ、 δ は十分小さいという仮定により、各未知数の近似値は最適解へ収束する。

4. 数値計算

4.1 簡単な例

次式のマトリックスは、悪条件としてしばしば引用される例である [9]。

$$\begin{bmatrix} 5 & 7 & 6 & 5 \\ 7 & 10 & 8 & 7 \\ 6 & 8 & 10 & 9 \\ 5 & 7 & 9 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} \quad (24)$$

右辺 (b_1, b_2, b_3, b_4) を (102, 141, 165, 165)

とすれば、 x_j の正解は(0, 3, 6, 9)である。いま b_j

の値を測定して、表1のNo.1及びNo.2欄の値が得られたとすれば、消去法で求めた解はそれぞれ表2左側のNo.1, No.2欄のようになり、定数のわずかな変化に対して解は大きく影響されることがわかる。そこで例えば、制約条件として $x_j \geq 0$ を付加し、

$\delta = 1.0 \times 10^{-3}, e = 1.0 \times 10^{-10}$ として本方法で解を求め

ると、表2右側のNo.1, No.2欄の通りとなる。No.1の場合には正解と等しいものが求まり、No.2の場合にはかなり正解に近似した解が得られている。

表1. 右辺の定数値

Table 1. The constants of right hand side.

定数	No. 1	No. 2
b_1	101	100
b_2	142	143
b_3	166	166
b_4	164	162

表2. 式(24)の解

Table 2. The solutions of equation (24).

未知数	消去法		本方法 ($x_j \geq 0$)	
	No. 1	No. 2	No. 1	No. 2
x_1	-136	-265	0.00	0.01
x_2	85	165	3.00	3.22
x_3	41	74	6.00	5.80
x_4	-12	-32	9.00	8.92

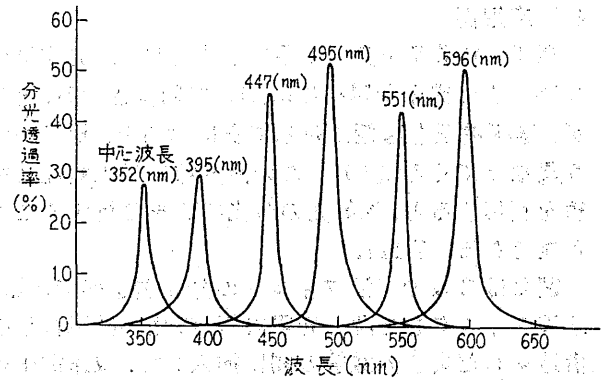


図2. 干渉フィルタの分光透過率

Table 2. The spectral transmittances of interference filters.

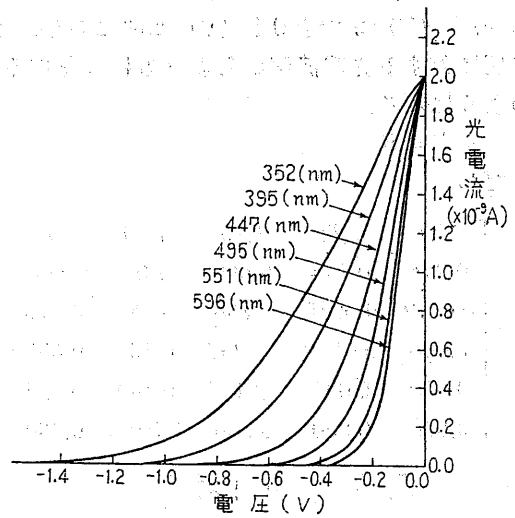


図3. 各単色光に対する光電管の減速電圧特性

Fig.3 The characteristics of phototube by means of retarding potential method.

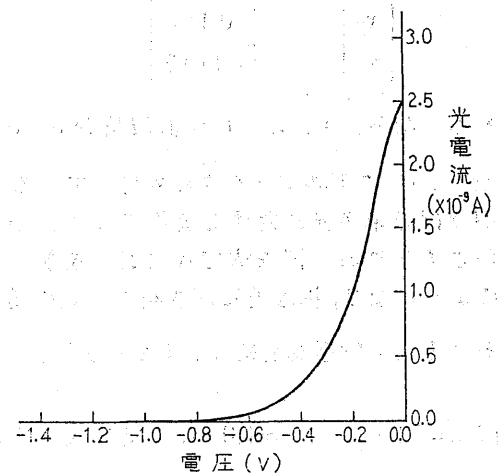


図4. 光学フィルタを挿入したときの光電管の減速電圧特性

Fig.4 The characteristic of phototube in case of inserted optical filter.

4.2 応用例

通常、光電管を測光に用いる場合には、光電陰極より高い正の電圧を陽極に印加して動作させる。ところが、陽極電圧を陰極に対して負にすると、様子がかなり異なってくる [10]。この減速電圧対光電流特性曲線を利用すると、入射光の分光組成を分析することが可能である [7,11]。

図2は6枚の干渉フィルタの分光透過率である。各干渉フィルタを光源と光電陰極・陽極共に平行平面の構造をした真空光電管の間に挿入して、減速電圧対光電流特性曲線を測定すると、それぞれ図3の通りとなる。図4は各波長の単色光を同時に入射し、光学フィルタを挿入したときの減速電圧対光電流特性曲線である。図3、図4において減速電圧 $V = -0.1$ (V) から -0.6 (V) までを 0.1 (V) 間隔に選び、それらの電圧に対する光電流値から連立方程式を作ると、次式のようになる。

$$A \cdot X = B \quad (25)$$

ただし、

$$A = \begin{bmatrix} 1.11 & 1.22 & 1.40 & 1.59 & 1.72 & 1.83 \\ 0.244 & 0.394 & 0.660 & 1.02 & 1.32 & 1.55 \\ 0.0312 & 0.0930 & 0.256 & 0.586 & 0.970 & 1.25 \\ 0.000 & 0.0179 & 0.0798 & 0.306 & 0.680 & 0.992 \\ 0.000 & 0.000 & 0.0174 & 0.142 & 0.454 & 0.776 \\ 0.000 & 0.000 & 0.000 & 0.0556 & 0.280 & 0.574 \end{bmatrix}$$

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 1.87 \\ 1.03 \\ 0.533 \\ 0.276 \\ 0.141 \\ 0.0682 \end{bmatrix}$$

である。なお、 x_1, x_2, \dots は中心波長 596 [nm], 551

[nm], \dots の干渉フィルタに対応している。式 (25) を解けば各単色光に対する光学フィルタの分光透過率が求められる。消去法で式 (25) を解くと表3左欄のようになり、物理的に起き得ない負の値の解が求まる。そこで物理的制約条件 $0 \leq x_j \leq 1$ を付加し、例えば $\delta = 1.0 \times 10^{-5}$, $e = 1.0 \times 10^{-20}$ として本方法で求めると、同表右欄の解が得られる。その結果を従来の分光測光法で求めた曲線上に、 \times 印で図示すると図5のようになり、両者はかなりよく一致する。

式 (25) において A の各 i 行を

表3. 式 (25) の解

Table 3. The solutions of equation (25).

未知数	消去法	本方法 ($0 \leq x_j \leq 1$)
x_1	-0.244	0.000
x_2	0.470	0.248
x_3	0.688	0.458
x_4	-0.024	0.429
x_5	0.520	0.119
x_6	-0.127	0.021

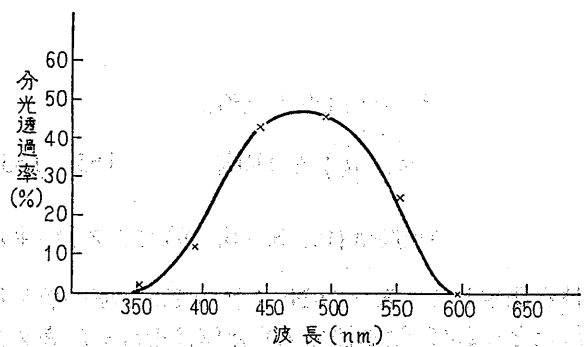


図5. 光学フィルタの分光透過率

Fig.5 The spectral transmittances of optical filter.

$$\left\{ \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right\}^{1/2} \quad (26)$$

で割って正規化し、その行列式の値を求めると 8.03×10^{-8} となり 1 に比較して大変小さい値である。それゆえ式 (25) は悪条件の方程式で解が係数及び右辺の定数に対して非常に敏感であることがわかる。式 (24) を正規化した行列式の値は 1.99×10^{-5} であるから、式 (25) は式 (24) よりも悪条件である。

5. 考察

第2章では、正方行列について述べたが、行列 A が m 行 n 列の場合を考える。

$$Ax = b \quad (27)$$

ただし、 $m > n$ とする。また A の階数は n とする。式 (27) を同時に満足する解を求めることは、一般には不可能であるが、最小自乗法によって正規方程式を求めると次式のようになる。

$$A^T Ax = A^T b \quad (28)$$

ただし T は転置を表わす。

A の階数は n であるから、行列 $A^T A$ は正値であり特異ではない。それゆえ式 (28) より x が一意に定ま

るので、 A が正方行列でない場合には、最初に正規方程式を求めておけばよい。したがって、第2章のように A が正方行列としても一般性は失われない。

制約条件付き最適化問題より、制約条件なし最適化問題のほうが容易であるから、制約条件をペナルティ項として評価関数に付加し、制約条件のない問題として解くペナルティ関数法がよく研究されている[12,13]。ペナルティ関数法には、零に接近する数列

$\{r_s\}$ の摂動パラメータを使用する方法と使用しない方法があるが[3]、摂動パラメータを使用しない方法は、実際にはあまり応用されなく、摂動パラメータを使用する方法がよく応用されている。

一般にペナルティ関数法は、摂動パラメータ r_s の初期値および減少方法に対して明確な規則がなく、 r_s の値が非常に小さくなると悪条件となる。また、制約条件式が線形であっても、線形という特徴が生かされないなどの欠点がある。本方法にはこれらの欠点はないが一般に精度を良くしようとするれば、演算回数が多くなる欠点がある。しかし、他の反復法においてもこのような問題はがあるので、本方法だけの欠点とはいえない。

最大傾斜法は最適化の手法としてよく使用され、条件のよい方程式に対して、この方法は優れているが、悪条件の問題に対しては収束速度が遅く、反復回数を増してもなかなか最適解に収束しない。また悪条件の場合には残差の自乗和が小さいからといっても、最適解に収束している保証はなく、最適解の近似値が得られたかどうかということすらもなかなか明らかでない。それに対して本方法は、悪条件のときにも最大傾斜法ほど収束が遅くなることはなく、また収束の様子がよくわかる。

2次計画法は一般の非線形計画法とは異なり、原理的には、有限回の計算によって正確な解を得ることができる。2次計画法として Beale の方法[14,15]、Wolfe の方法[16]は、線形計画法のシンプレックス法を利用することができるので便利である。その場合、記憶容量を多く必要とする。それに対して、本方法にはアルゴリズムが簡単で、記憶容量が少なくてよいこと、わずかな計算で最適解に収束することがあるなどの長所がある。

仮定により最適解は、少なくとも一つ制約条件の境界面(線)上にある。例えば、4.1の x_1 、4.2の x_1, x_6 のように、最適解が制約条件の境界面付近になるような未知数があり、最初それらが制約条件を満たしてい

ない場合に本方法は効果的である。したがって、本方法を測定値のデータ処理へ応用する場合には、最適解が制約条件の境界面付近になるような未知数を付加するとよい。

6. むすび

非線形計画法は、今後ますます最適設計や制御などの各分野に広く応用されることが期待されるが、まだ開発の途上であり、各手法とも長所、短所がある。対象とする問題に依存するので、あらゆる問題を容易に処理できる手法は、現在のところない。一つの解決法としては、個々の問題に適した方法を開発することである。

以上のような観点から、制約条件を付加した連立1次方程式の誤差修正法について述べた。第4章の数値計算例から明らかなように、本方法はかなり有用であることがわかる。しかし、本方法によって全ての誤差が除去されるわけではなく、それらの問題は今後の課題である。

参考文献

- [1] G. Zoutendijk : Method of Feasible Directions, Elsevier Pub. Co. (1960).
- [2] J. B. Rosen : J. Soc. Indust. Appl. Math., Vol.8, p.181 (1960), Vol.9, p.514, (1961).
- [3] A. V. Fiacco, G. P. McCormick : Nonlinear Programming-Sequential Unconstrained Minimization Techniques, John Wiley (1968).
- [4] R. E. Griffith, R. A. Stewart : Manag. Sci. Vol.7, p.379 (1961).
- [5] M. J. Box : Com. J., Vol.8, p.42 (1956).
- [6] J. C. G. Boot : Quadratic Programming (Algorithms-Anomalies-Applications), North-Holland Pub. Co. (1964).
- [7] 小林富士男, 山口昌一郎 : 照明学会雑誌, Vol.54, No.12, p.681 (1970).
- [8] 小林富士男, 山口昌一郎 : 電気学会雑誌, Vol.92, -A, No.9, p.432 (1972).
- [9] J. Morris : Phil. Mag. Ser.7, Vol.37, p.106 (1946).
- [10] 山口昌一郎, 小林富士男 : 電気学会雑誌, Vol.90, No.3, p.495 (1970).
- [11] 山口昌一郎, 小林富士男 : 照明学会雑誌, Vol.52, No.4, p.108 (1968).
- [12] A. V. Fiacco, G. P. McCormick : Manag. Sci., Vol.10, p.360 (1964).
- [13] A. V. Fiacco, G. P. McCormick : Manag.

- Sci., Vol.10, p.601 (1964).
- [14] E. M. L. Beale : J. Roy. Stat. Soc. ser. B, Vol.17, p173 (1955).
 - [15] E. M. L. Beale : Nav. Res. Log. Quart., Vol.6, p.227 (1959).
 - [16] P. Wolfe : Econometrica, Vol.27, p.382 (1959).