教養講座

非線形計画法

(2)：モデリングと応用

矢部 博，八巻 直一

1. はじめに

本稿では，非線形計画法の適用される事例を挙げて，非線形最適化問題の定式化について考えてみましょう．

非線形最適化問題を再度定義すると，以下のようになります．

非線形計画問題

> n 変数の非線形関数 $f(x)$（目的関数）を，等号制約条件
>
> $$h_i(x)=0, \qquad i=1,\ldots,m$$
>
> と不等号制約条件
>
> $$g_j(x)\leq 0, \qquad j=1,\ldots,l$$
>
> のもとで，最小化せよ．

非線形最適化問題は，目的関数と制約条件が非線形関数であることを想定しています．それゆえ，数値解法によって上の問題の解を求めることは，なかなか難しいといえます．

制約条件をすべて満たすような点のつくる領域を，許容領域といいますが，許容領域の形状が凸凹であったり，いくつかの領域に分かれていたりする場合や，目的関数がお鍋のようにきれいに下に凸でなく，幾つものつららが下がったような形状をしていたりすると，今日のレベルでは，いかなる解法を用いようとも，真の解を求めることはほとんど不可能なのです．この辺の事情は，次回以降でもう少し詳しくのべることにします．

実際の問題では，不幸なことに，このような困難な問題として定式化されることが少なくありません．

さて，本稿では，社会科学に属する事例と，自然科学に属する事例を取り上げて，非線形計画問題に定式化してみましょう．社会科学の問題には，有名なポートフォリオ選択問題を取り上げました．この問題は，それ自身が興味ある対象ですが，非線形計画法の立場からは，比較的性質のよい構造をもっています．しかし，幾つかの注意すべき課題が存在します．

自然科学の問題には，いわゆる逆問題をとりあげました．逆問題とは，自然現象の結果を分析してその原因を解き明かそうという類の問題ですが，本質的に解きにくい問題と，そうでない問題があります．ここでは，本質的に難しいといわれている問題に挑戦します．

2. ポートフォリオ選択問題

今や，資産運用はコンピュータによって行われる時代となりましたが，そのもとは，ノーベル賞に輝いた，マーコビッツ博士のポートフォリオ・セレクションの理論の構築にあります[1]．

株式投資では，いくつかの銘柄に対して，次期での利益がより高く，かつ損失の危険がより低くなるように，資金の配分を決めることが最大の関心事です．このとき，各銘柄の値動きをよりよく推測することが肝心ですが，マーコビッツ博士の理論では，各銘柄毎ではなく，投資全体としての利益率の推測を試みます．では，マーコビッツ先生にならって，非線形計画問題として定式化してみましょう．

やべ ひろし 東京理科大学工学部
〒162 新宿区神楽坂 1-3
やまき なおかず システム計画研究所
〒150 渋谷区桜丘町 2-9 カスヤビル

n 銘柄を投資の対象としますと，i 番目の銘柄の過去 N 期間における j 期の利益率は，r_{ij} と表せます．従って，i 銘柄のこの期間の平均利益率 μ_i は

$$\mu_i = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} r_{ij}, \quad i = 1, \ldots, n$$

となります．

さて，資本金を便宜上1として，これらの銘柄にそれぞれ x_i を投資するものとしますと，負の投資はありませんから（空売りというものがあって，その場合は負の投資も考えられるのだそうですが，考えないことにします）次のような制約条件が設定されます．

$$x_i \geq 0, \quad i = 1, \ldots, n$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = 1$$

ベクトルを用いて，もうちょっと，かっこよく表現しましょう．$\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)^T$，$\mathbf{1} = (1, \ldots, 1)^T$，$\mathbf{0} = (0, \ldots, 0)^T$ とおけば，制約条件は，

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &\geq \mathbf{0} \\ \mathbf{x}^T\mathbf{1} &= 1 \end{aligned}$$

と書けます．

すると，投資全体としての利益率の期待値は

$$E(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} \mu_i x_i$$

となります．あるいは，$\mu = (\mu_1, \ldots, \mu_n)^T$ として，

$$E(\mathbf{x}) = \mu^T\mathbf{x} \tag{1}$$

とも書けます．

ところで，投資の危険度ですが，マーコビッツ先生によれば，分散によって評価するとしておりますので，$\mathbf{x}$ の分散を求めてみますと，

$$V(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} c_{ij} x_i x_j$$

となります．ただし，c_{ij} は i 銘柄と j 銘柄の利益率の共分散で

$$c_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(r_{ik} - \mu_i)(r_{jk} - \mu_j)$$

となります．さらに，C をその ij 要素が c_{ij} であるような行列とすると，

$$V(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T C \mathbf{x} \tag{2}$$

と表せます．このときの C は，いわゆる分散共分散行列で，半正値行列となります．

以上から，ポートフォリオ選択の問題は，投資比率 x_i をうまく決定して，利益率の期待値 $E(\mathbf{x})$ をより高く，危険度（リスク）$V(\mathbf{x})$ をより低くせよ，ということになります．

この問題は，ある関数を最大にし，他方ある関数を最小にしたいという，二つの目的関数を持っています．このような問題は，多目的計画法というジャンルに含まれますが，ポートフォリオ選択問題では，パラメータを導入して，目的関数を一つにして定式化しています．

その方法には，以下の2種類が考えられます．

1. 第一の定式化（リスクを一定以下に押さえながら利益率を最大化する）

   目的関数

   $E(\mathbf{x})$ を最大

   制約条件

   $$\begin{aligned} V(\mathbf{x}) &\leq p \\ \mathbf{x} &\geq \mathbf{0} \\ \mathbf{x}^T\mathbf{1} &= 1 \end{aligned}$$

   ただし，p はリスクの上限です．

2. 第二の定式化（利益率を一定以上に保ちながらリスクを最小化する）

   目的関数

   $V(\mathbf{x})$ を最小

   制約条件

   $$\begin{aligned} E(\mathbf{x}) &\geq q \\ \mathbf{x} &\geq \mathbf{0} \\ \mathbf{x}^T\mathbf{1} &= 1 \end{aligned}$$

   ただし，q は利益率の下限です．

上の二つの定式化は，どちらもリスクの関数が非線形ですから，非線形計画問題になります．特に，第二の定式化では，制約条件はすべて線形で，目的関数は2次関数ですので，いわゆる2次計画問題となります．ただ，パラメータ p または q の選び方によって，制約

条件を満たす解がない場合が起こり得ますので，注意が必要です．実際のポートフォリオ選択問題では，第二の問題を，パラメータqを動かしながら，すべてのqについて解きます．ついでながら，qとそのqでのリスクの最小値の関係は，効率的フロンティアと呼ばれています．

また，$\mathbf{r}_i = (r_{i1} - \mu_i, \ldots, r_{iN} - \mu_i)^T$ とおくと，$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_n$が互いに1次独立ならば，$C$は正定値となります．このとき，第二の問題の目的関数は，下に凸の関数になり，最小値は唯一つですので，性質のよい問題であることになります．しかし，$n \geq N$のときは，$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_n$は1次従属となりますので，$n$が大きいとき$N$はかなり大きく選ぶ必要があります．

本物の株式市場には，千以上の銘柄がありますが，すべての銘柄を投資の対象とすると，変数の数が千以上となります．そのような場合，行列Cを精度よく求めることは，なかなか難しい問題となります．また，巨大な2次計画問題を簡便に解く方法は，もっか研究中というところです．とくに，このCは密行列ですので，コンピュータで計算する際のメモリーの問題も生じ，問題の性質は悪くないにも拘らず，実際には解きにくい問題となっています．

ポートフォリオ選択問題は，非線形計画法の社会科学への応用として，大変重要な意味を持つものと思われます．この種の問題は，上の定式化だけではなく，多くの変種が考えられており，今後ますます発展するでしょう．

3. 生体磁気解析における逆問題

脳やその他の内臓の様子を，身体の外から精密に調べる方法には，古くはレントゲン写真を用いる方法に始まり，最近ではCTとかMRIとかいった，進んだものがあります．しかし，これらはX線を照射したり，磁場をかけたりするので，いずれも患者にまったく悪影響がないとはいえないのが玉にきずです．

ところが近年，SQUID(Superconducting QUantum Intereference Device) センサーといわれる磁場測定装置を利用した生体磁気測定装置の研究開発が盛んになり，脳磁場や心磁場などのきわめて微弱な磁場の測定が可能になってきました．この方法では，患者にはまったく何も負担をかけませんので，極めて安全な検査装置と期待されています．いずれ近い内に，実用化されるでしょう．

SQUIDは，弱い結合を持った超伝導状態にあるリングにより構成される素子で，磁場の大きさに応じて，リングの周回電流が周期的に変化します．したがって，この変化を測定データとして読み取ることで，センサーとして機能することになります．

さて，この測定装置の最大の課題は，例えば頭の周囲に置いたセンサーで採取したデータから，脳の内部の電流源の様子を再現する手法にあります．このように，測定値から原因を再構築する問題は，一般に逆問題と呼ばれており，世の中に多くの事例があります．逆問題は，ほとんどの場合非線形計画問題として定式化することができますので，非線形計画法の適用分野の主要な領域と考えられます．

SQUIDセンサーを用いた測定装置では，定式化として，以下に述べるような二つのアプローチがあります．

1. 生体内で神経細胞が興奮すると，細胞膜の内外にイオン濃度の不均衡による電位差と，それに伴う活動電流を生じますが，これを，一種の電流双極子（ダイポール）であると仮定して，この電流ダイポールが，磁場を生成すると考えることができます．このときダイポールは，1個，2個と数えられるような，脳内に離散的に存在するものであると仮定されます．このように，いくつかのダイポールが発生して磁場源となると仮定するモデルは，マルチダイポールモデルと呼ばれます．実際，てんかん症は，脳内の極めて狭い範囲での神経の興奮(ダイポール)が発火点となって起こることが知られていますので，ダイポールモデルはこのような症例には，妥当なモデルといえましょう．

2. これに対して，磁場源が広い範囲に分布する電流であると考える立場に立つモデルを，電流分布モデルといいます．電流分布モデルでは，脳の内部を細かい区画にわけて，その各区画に電流源がそれぞれ存在すると仮定します．心臓の鼓動を制御する神経パルスなどは，心臓の内部を一定の規則で流れる電流として観測されますので，この種の機能の疾患を調べるには，電流分布モデルはよく適合するように思われます．

さて，ここでは脳内の磁場源解析を対象として，モデルを具体的に考察してゆきましょう．まず，脳内空間を半球で近似し，磁場源として独立した複数のダイ

ポールを考えるアプローチです．すなわち，マルチダイポールモデルに基づくものです．脳磁場は，m 個のセンサーで測定するものとします．したがって，取り扱う問題は，m 個のセンサーコイル位置での磁場データの組から，磁場源ダイポールの位置・大きさのパラメータを推定する非線形最適化問題となります．

i 番目のコイルの測定磁場の大きさを B_{ex_i}，推定パラメータより算出される i 番目のコイル位置での生成磁場の計算値を B_{th_i} とすれば，上述の問題は，既に得られている測定値が，ダイポールを配置したときの理論値に近いものを見つける問題として，通常以下のように定式化されます．

問題 以下の目的関数

$$f(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}(B_{ex_i} - B_{th_i})^2 \tag{3}$$

を最小にするダイポールパラメータを求めよ．

上記の問題には，例えばダイポールが脳の内部にあるといった制約条件が課せられます．したがって，制約条件付きの最小二乗問題となります．

ここで，一つのダイポールの位置と大きさおよび，一つのあるセンサーコイルの位置が与えられた時の生成磁場の理論値は，Biot-Savart の式により，

$$\boldsymbol{B} = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \frac{\boldsymbol{P} \times (\boldsymbol{r}_c - \boldsymbol{r}_p)}{|\boldsymbol{r}_c - \boldsymbol{r}_p|^3}dv \tag{4}$$

で求められます．ただし，

$\boldsymbol{B}$; 磁界の大きさ (Wb/m^2)
$\boldsymbol{P}$; ダイポールの大きさ $(P_x, P_y, P_z)(Am)$
$\boldsymbol{r}_p$; ダイポールの位置 (x_p, y_p, z_p) (m)
$\boldsymbol{r}_c$; コイルの位置 (x_c, y_c, z_c) (m)
μ_0 ; 透磁率 $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$.

(4) 式より極座標に変換すると，センサーコイルで半径方向の磁場の大きさは，

$$q = \alpha P_\theta + \beta P_\phi$$

と，表されます [3]．ただし，α, β はダイポールの位置に関する非線形関数で，それぞれ θ 方向と ϕ 方向のダイポールの大きさです．

i 番目のセンサーコイルでの磁場の大きさを q_i とおいて，n 個の磁場源ダイポールを考えると，

$$q_i = \sum_{j=1}^{n}(\alpha_{ij}P_{\theta j} + \beta_{ij}P_{\phi j}) \tag{5}$$

と表されます．ただし，$(i = 1, \ldots, m)$．

さらに，

$$a_{ij} = \begin{cases} \alpha_{ik}, & j\text{が奇数} \quad k = (j+1)/2 \\ \beta_{ik}, & j\text{が偶数} \quad k = j/2 \end{cases}$$

$$z_j = \begin{cases} P_{\theta k}, & j\text{が奇数} \quad k = (j+1)/2 \\ P_{\phi k}, & j\text{が偶数} \quad k = j/2 \end{cases}$$

とおけば，(5) 式の行列表現として，

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{z} \tag{6}$$

が得られます．ただし，

$$\boldsymbol{q} = (q_1, q_2, q_3, \cdots, q_m)^T$$

$$\boldsymbol{z} = (z_1, z_2, z_3, \cdots, z_{2n})^T$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,2n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \cdots & a_{m,2n} \end{pmatrix}$$

とします．

このとき，A は n 個のダイポールの位置の非線形行列関数となります．さらに，$\boldsymbol{q}_0 = (B_{ex_1}, \ldots, B_{ex_m})^T$ とおけば，(3) は

$$f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{z}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}_0\|^2 \tag{7}$$

と表されます．ここで，$\boldsymbol{r} = (r_{p_1}, \ldots, r_{p_n})^T$ とします．

制約条件として，ダイポールが脳の内部に存在することを規定することにすれば，脳を球体と仮定していますから，半径を R とすると，

$$\|\boldsymbol{r}\| < R$$

と表されます．かくして，ダイポールモデルに沿った定式化ができました．なお，α, β, γ を具体的に書き下すことは，ここでは省略します．

上の非線形計画問題は，$n = 1$ のとき，すなわち単一ダイポールの場合はよく解くことができますが，マルチダイポールの場合は，よい数値解法は今のところありません．

次に，電流分布モデルに沿った定式化をやってみましょう．

電流分布モデルでは，(6) 式の右辺が，ダイポールの大きさの1次式であることに注目します．

脳の内部を細かな区画に分割して，その区画の一つ一つに電流源が存在すると仮定すると，電流源の位置が固定されるので，問題が線形化されることが期待されます．さらに，区画の大きさを小さくすれば，いくらでも精度が上がりそうです．例えば，脳の内部を1000 の区画に分割すると，ひとつの区画の大きさは極小さなものになりますから，うまくいけば精度のよい電流分布が得られるでしょう．しかしこのとき，$n = 1000$ となりますが，これに対して，センサーコイルの数は，高々数十から200程度ですから $m < n$ であることは確実です．したがって，A は横長行列となり，(6) は z に関して，いわゆる不定形方程式となります．つまり，解が一意には決まらないので，要するに解けないということになります．

このような場合には，解の中でノルム最小なものを求めることが一般的ですが，もちろん真の解であることは保証できません．そこで，いろいろと工夫が加えられるわけですが，いずれにせよ本質的な困難さは解消されません．

このように，定式化が成功しても，本質的な困難さを持つような場合や，現在の手法では歯がたたない程難しい問題となる場合が，いくらでも起こりますので，実際問題ではモデル化こそが大切となります．

4. おわりに

上に挙げた事例が，適切かどうかわかりませんが，実際に数理計画法（なかんずく非線形計画法）を適用しようとすると，定式化すなわちモデリングが大きな問題であることが，お分かり頂けたものと思います．しかしながらモデリングに関しては，優れたテキストがいくらでも手に入る訳ではありません．そればかりか，筆者の見聞の範囲では，多くの事例が企業秘密の名のもとに，学生や研究者の目に触れない場所にしまわれているようです．

非線形計画法のパッケージソフトウェアも，手に入る世の中になりましたが，実際に業務上の何らかの課題に適用することを計画するならば，注意深くモデリングを考えることが肝要です．しかし，土木や建築あるいは機械における最適設計のように，モデリングが書物 [4] となる例も見かけるようになり始めたのは，好ましい傾向でしょう．建築における最適設計とは，必要な強度を確保するという制約条件のもとで，材料の重量を最小にするといったもので，これからますます盛んになることでしょう．

これまで線形計画法の王国であった，石油の精製計画の場面でも，最近では非線形関数を制約条件の一部に加えることが試みられているようです．非線形計画問題の油断ならないところは，例えば，制約条件のごく一部にちょっとした非線形項が加わったとしても，非常に解きにくい問題に変身している可能性があることです．事実，上の石油の精製計画問題でも，ちょっとした非線形項の追加で，線形計画法のパッケージソフトウェアが使えないことは勿論のこと，よほど注意深くとりかからないと，容易には解けない問題になるような事例が存在します．

その他，農作物の出荷計画といった，これまであまり数理計画法とは縁がなかった分野でも，有力な研究者が精力的に非線形計画法の応用を導入しているようです [5]．

これで，本稿を終えますが，もっと多くの事例を丁寧に解説するべきであったかも知れません．あるいは，もっと深く事例につっこんだ解説を加えるべきであったとも思います．しかし，意図はモデリングの重要性をお話したかったので，その点に重心をおきました．さて，次回以降は，いよいよ非線形計画法の数学的理屈と，数値解法の解説へと進みます．できれば，前回紹介したテキストの内一冊を手元に置いて，気楽に読んで頂きたいと願っています．

参考文献

[1] 津野義道，ポートフォリオ選択論入門，共立出版,1991

[2] 松浦幹太，岡部洋一，第 7 回日本生体磁気学会大会論文集,vol.5,pp.212-213,1992

[3] 白江公輔,BEM,vol6,No.4,pp.11-17,1992

[4] 山川宏，最適化デザイン，計算力学とCAEシリーズ9，培風館，1993

[5] 南石晃明，不確実性と地域農業計画，大明堂,1991