

# 最適化における共役点理論概要

川崎英文 (九州大学・数理学研究院)

共役点は変分法における大域的概念であり、従来は微分幾何学の研究対象と見なされてきたが、近年、最適制御問題への拡張もなされるようになった。しかしながら、関数を未知数とする無限次元空間における極値問題をその舞台とする為か、国内においては数理計画法の研究対象という認識は低かった。ところが、ここ数年の研究により、有限次元空間における極値問題（非線形計画問題）に対しても共役点理論を展開できることが明らかになった。それは古典的共役点理論の離散化であり、極値問題に対してゲーム理論的視点を提供する。本講演では、この新しい共役点理論の概要を解説する。

## 1 共役点の幾何学的意味

共役点を理解する手軽な方法は、楕円面上の最短路問題（測地線）を考えることである。球面を上下方向に伸縮させた楕円面

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1. \quad (1.1)$$

の赤道上に2点 A, B が与えられたとき、それらを結ぶ楕円面上の最短路を考察しよう。古

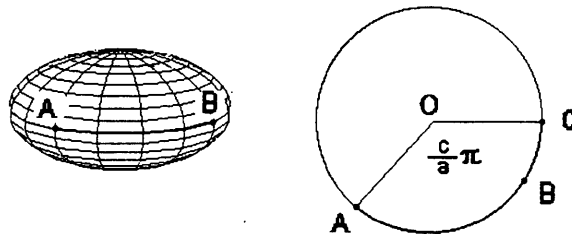


図 1: 楕円面上の最短路問題

典的共役点理論によれば、角 AOC が  $c\pi/a$  である赤道上の点 C は A の共役点とよばれる。図 1 では  $a > c$  なので、赤道を半周する前に共役点が現れる。さらに、終点 B が共役点 C の手前にあれば円弧 AB は最短路で、C の先にあれば最短路にならないことが知られている。この事実は、図 2 のような平坦に近い楕円面を考察すると、直感的に分かりやすい。この場

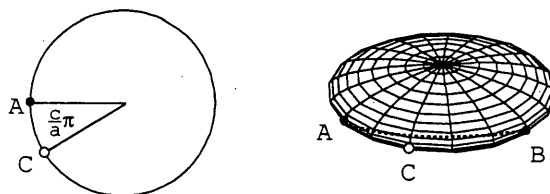


図 2: 楕円面上の最短路問題

合、 $c\pi/a$  は小さく、円弧 AB の近くに、それより短い経路（点線）が存在することが納得できるであろう。この例のように、

曲面上の最短経路問題において、終点Bを始点Aから少しずつ遠ざけて行くと、最初は(局所)最短経路であったものが、ある地点Cを過ぎた途端に局所的にも最短経路でなくなることがある。その様な点CをAの共役点とよぶ。この現象は、一般の変分問題や最適制御問題においても観察され、最適性を論じる際のキーポイントとなる。

## 2 古典的共役点理論

両端点が固定された滑らかな関数  $x(t) \in R$  のうちで、積分汎関数を極小にするものを求める問題を変分法の基本問題とよぶ。

$$\begin{aligned} \text{Minimize} \quad & \int_0^T f(t, x(t), \dot{x}(t)) dt \\ \text{s.t.} \quad & x(0) = A, x(T) = B. \end{aligned}$$

基本問題の極小解  $\bar{x}(t)$  は Euler 方程式

$$\frac{d}{dt} f_{\dot{x}}(t, \bar{x}(t), \dot{\bar{x}}(t)) = f_x(t, \bar{x}(t), \dot{\bar{x}}(t))$$

と Legendre 条件

$$f_{\dot{x}\dot{x}}(t, \bar{x}(t), \dot{\bar{x}}(t)) \geq 0 \quad (\text{非負定値})$$

を満たすことが知られている。ただし、 $f_x$  は3変数関数  $f(t, x, u)$  の第2変数  $x$  に関する偏微分を表し、 $f_{\dot{x}}$ 、 $f_{\dot{x}\dot{x}}$  は第3変数  $u$  に関する1階と2階の偏微分を表す。また、

$$\frac{d}{dt} \{ \bar{f}_{\dot{x}x} y + \bar{f}_{\dot{x}\dot{x}} \dot{y} \} = \bar{f}_{xx} y + \bar{f}_{x\dot{x}} \dot{y} \quad (2.1)$$

を Jacobi 方程式とよぶ。ただし、 $\bar{f}_{\dot{x}\dot{x}}(t) := f_{\dot{x}\dot{x}}(t, \bar{x}(t), \dot{\bar{x}}(t))$ , etc.

初期条件  $y(0) = 0$  を満たす Jacobi 方程式の自明でない解  $y(t)$  が存在して、ある  $c > 0$  が  $y(c) = 0$  を満たすとき、 $c$  を  $t = 0$  の共役点とよぶ。共役点を用いると、基本問題に対する最適解の精密な判定条件が得られる。

**定理 2.1 (Jacobi)** (1)  $\bar{x}(t)$  が基本問題の極小解で、Legendre の強条件 ( $\bar{f}_{\dot{x}\dot{x}}(t) > 0$ : 正定値) を満たすとき、 $[0, T)$  に  $t = 0$  の共役点は存在しない。(2) 逆に、 $\bar{x}(t)$  が Euler 方程式、Legendre の強条件を満たし、 $[0, T]$  に  $t = 0$  の共役点が存在しなければ、 $\bar{x}(t)$  は極小解である。

## 3 最適化における共役点理論の可能性

共役点理論は Jacobi により 19 世紀前半に確立された古典的理論であるが、Warga の研究 [11, 1978] を契機に最適制御問題等の複雑な制約をもつ最適化問題への拡張がなされるようになった。著者も 97 年から 98 年にかけて米国に滞在した際、不等式状態制約をもつ変分問題に対する共役点の研究を行ったが、その研究の合間に素朴な疑問を抱くようになった。

「変分問題にせよ最適制御問題にせよ未知数は関数であり，無限次元空間における極値問題ととらえることができる．では，有限次元空間における極値問題  $(P_0)$  Minimize  $f(x)$ ,  $x \in R^n$  に対する共役点は何であろう？」

この疑問に答える前に，極値問題  $(P_0)$  に対する極値の判定法を確認しておく．

**定理 3.1** (1)  $\bar{x}$  が  $(P_0)$  の極小解ならば，勾配ベクトル  $f'(\bar{x})$  はゼロベクトルで，Hesse 行列  $f''(\bar{x})$  は非負定値である．(2) 逆に， $f'(\bar{x}) = 0$  かつ  $f''(\bar{x})$  が正定値ならば  $\bar{x}$  は極小解である．

(1) と (2) の違いは「正定値」と「非負定値」だけであり，取り扱う問題が非線形である以上，この違いは止むを得ない．しかも，この定理のどこにも共役点は現われないから，極値問題  $(P_0)$  については共役点が活躍する余地は無いようにも思える．ところが，球面上の最

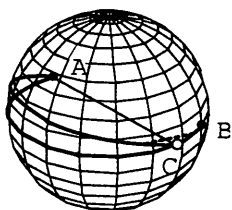


図 3: 最短路でない訳

短路問題を考えると，正反対の見解が得られる．球面の場合  $a = c$  であるから，始点  $A$  から半周した点  $C$  が共役点になる．明らかに， $A, C$  を結ぶ別の大円も赤道半周と同じ長さをもつ．従って， $C$  を経由して始点と終点を結ぶ二つの経路は同じ長さである．ところが，第 2 の経路は点  $C$  に角をもつので， $C$  の辺で近道をするにより，より短い経路を見つけることができる．

そこで，球面上の最短路問題を離散化した次の極値問題を考えてみよう．

1. 始点  $A = (1, 0, 0)$  を含む経線を  $l_0$ ，終点  $B = (\cos T, \sin T, 0)$  を含む経線を  $l_{n+1}$  とし，その間に等間隔に経線  $l_1, l_2, \dots, l_n$  をとる．
2. 各経線  $l_k$  上に 1 点  $X_k$  を選び，折れ線  $AX_1 \dots X_n B$  の長さを最小化せよ．

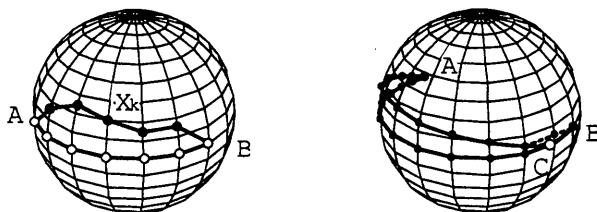


図 4: 折れ線最短路問題

原点を  $O$  とし， $OX_k$  と  $z$  軸のなす角を  $\theta_k$  とすると，この折れ線最短路問題は  $n$  変数  $\theta_1, \dots, \theta_n$  の極値問題になる．この場合も  $T > \pi$  ならば， $C = (-1, 0, 0)$  は基本問題の共役点  $C$  と同じ働きをする．実際， $A$  と  $C$  を結ぶ別の大円を考え，それと経線  $l_k$  の交点を  $X_k$  とする

と、それらを結ぶ折れ線の長さは赤道に沿った折れ線とほぼ同じである。従って、 $C$  を經由して始点と終点を結ぶ2つの折れ線はほぼ同じ長さをもつ。ところが、第2の折れ線は点  $C$  に角があるので、 $C$  の辺で近道をするにより、より短い経路を見つけることができる。故に、点  $C$  は共役点と考えざるを得ない。

以上の考察により、我々は以下の2つの問題を解決しなければならないことが分かった。

1. 極値問題  $(P_0)$  に対して共役点をどのように定義したらよいか?
2. 共役点の存在を否定するかのような印象を与えた定理 3.1 において、共役点はどこに隠れているのか?

#### 4 $(P_0)$ に対する Euler 方程式と Legendre 条件

前節で、極値問題  $(P_0)$  に対する最適解の判定条件に触れた。それは  $f(x)$  の Taylor 展開

$$f(x+y) = f(x) + f'(x)y + \frac{1}{2}y^T f''(x)y + o(\|y\|^2)$$

を用いれば容易に証明できる。一方、変分法の基本問題についても、積分汎関数

$$F(x) = \int_0^T f(t, x, \dot{x}) dt \text{ の Taylor 展開}$$

$$\begin{aligned} F(x+y) &= F(x) + \int_0^T (f_{\dot{x}}\dot{y} + f_x y) dt + \\ &\quad \frac{1}{2} \int_0^T (\dot{y}^T f_{\dot{x}\dot{x}}\dot{y} + 2y^T f_{x\dot{x}}\dot{y} + y^T f_{xx}y) dt + o(\|y\|^2) \end{aligned}$$

から Legendre 条件を導くことができる。その際、 $t \in [0, T]$  を固定して、 $t$  の  $\delta$ -近傍上だけでゼロでない値をとるような関数  $y(t)$  を利用する。この手法を模倣すれば  $(P_0)$  に対する Legendre 条件が得られると期待してよいであろう。

まず、 $(P_0)$  で基本問題の  $t$  に対応するものは  $x = (x_1, \dots, x_n)$  の添え字  $k \in \{1, \dots, n\}$  であり、 $k$  の十分小さな近傍は1点集合  $\{k\}$  に他ならない。近傍  $\{k\}$  上だけでゼロにならない  $y \in \mathbb{R}^n$  は  $y = (0, \dots, y_k, \dots, 0)$  なる形をしているから、2次形式は  $y^T f''(x)y = f_{x_k x_k}(x)y_k^2$  となる。故に、

$$f_{x_k x_k}(\bar{x}) \geq 0, \quad k = 1, \dots, n \tag{4.1}$$

が  $(P_0)$  に対する Legendre 条件と考えられる。同様に、

$$f_{x_k x_k}(\bar{x}) > 0, \quad k = 1, \dots, n. \tag{4.2}$$

が  $(P_0)$  に対する Legendre の強条件と考えられる。即ち、

Legendre の強条件は Hesse 行列の対角成分が正であるということを意味しているにすぎず、Hesse 行列の正定値性とは隔たりがある。これが前節の最後で提起した問題 2 に対する答えであり、次節で定義する共役点がこのギャップを埋めてくれる。

## 5 Jacobi 方程式と共役点

前節で,  $(P_0)$  においても共役点の活躍する余地があることを示した. では, 共役点をどのように定義すればよいであろうか? そのヒントが Gelfand-Fomin [1, p.127] に与えられている. 以下において, 簡単のため  $y(t)$  は 1 次元としておく.

古典的共役点理論によれば,  $P(t) > 0$  として, 第 2 変分

$$\int_0^T (P\dot{y}^2 + Ry^2) dt \quad (5.1)$$

が  $y(0) = y(T) = 0$  なる自明でない任意の  $y(t)$  に対して正になるための必要十分条件は  $[0, T]$  に 0 の共役点が存在しないことである. ただし, 対応する Jacobi 方程式は

$$\frac{d}{dt}(P\dot{y}) = Ry$$

である. そこで, 第 2 変分 (5.1) の差分近似を考えることにする. まず, 区間  $[0, T]$  を  $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n < t_{n+1} = T$  と  $n+1$  等分し,  $\Delta t := T/(n+1)$  とおく. このとき, 第 2 変分 (5.1) は 2 次形式

$$\sum_{k=0}^n \left\{ P_k \left( \frac{y_{k+1} - y_k}{\Delta t} \right)^2 + R_k y_k^2 \right\} \Delta t \quad (5.2)$$

で近似される. ただし,  $P_k := P(t_k)$ ,  $R_k := R(t_k)$ ,  $y_k := y(t_k)$ ,  $y_0 = y_{n+1} = 0$ . さらに,  $a_k := R_k \Delta t + (P_{k-1} + P_k)/\Delta t$ ,  $b_k := -P_{k-1}/\Delta t$ ,  $y = (y_1, \dots, y_n)$ ,

$$A := \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & b_{n-1} \\ & & & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

とおくと, 2 次形式 (5.2) は  $y^T A y$  と表される. ここで, 第 2 変分の正值性の代わりに 2 次形式の正定値性を考えることは自然である.

**定理 5.1 (Sylvester の判定法)**  $n$  次対称行列  $A = (a_{ij})$  が正定値であるための必要十分条件は主小行列式  $|A_k|$  ( $k = 1, \dots, n$ ) が正になることである. 即ち,

$$|A_k| = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} > 0 \quad k = 1, \dots, n. \quad (5.4)$$

一方, 三重対角行列の主小行列式の間には次の漸化式が成り立つ.

$$|A_k| = a_k |A_{k-1}| - b_{k-1}^2 |A_{k-2}|. \quad (5.5)$$

このとき, 変換

$$Y_0 := 0, \quad Y_1 := \Delta t, \quad Y_{k+1} := \frac{(\Delta t)^{k+1} |A_k|}{P_1 \cdots P_k}, \quad k = 1, \dots, n, \quad (5.6)$$

により, 漸化式 (5.5) は

$$\frac{P_k \frac{Y_{i+1}-Y_k}{\Delta t} - P_{k-1} \frac{Y_k-Y_{k-1}}{\Delta t}}{\Delta t} = R_k Y_k. \quad (5.7)$$

と表される. ここで,  $\Delta t \rightarrow 0$  とすると, Jacobi 方程式

$$\frac{d(P\dot{Y})}{dt} = RY \quad (5.8)$$

が得られる. 故に, 漸化式 (5.5) は 2 次形式  $y^T A y$  に対する Jacobi 方程式と見なされる. 従って, 一般の Hesse 行列に対して主小行列式の漸化式を導くことができれば, それを Jacobi 方程式とよんでよいであろう.

**補題 5.1**  $n$  次行列  $A = (a_{ij})$  の行列式は, 主小行列式  $|A_k|$  に関して, 次のように展開される.

$$|A| = \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{\rho \in S(k+1, n)} \varepsilon(\rho) a_{k+1\rho(k+1)} a_{k+2\rho(k+2)} \cdots a_{n\rho(n)} |A_k|, \quad (5.9)$$

ただし,  $|A_0| := 1$ ,  $\varepsilon(\rho)$  は置換  $\rho$  の符号,  $S(k+1, n)$  は  $\{k+1, \dots, n\}$  上の置換で, どの  $\ell > k$  に対しても,  $\{\ell+1, \dots, n\}$  上では閉じていないもの全体を表わす.

**定義 5.1**  $n$  次行列  $A = (a_{ij})$  に対して,  $y_0, \dots, y_n$  に関する差分方程式

$$y_k = \sum_{i=0}^{k-1} \sum_{\rho \in S(k+1, n)} \varepsilon(\rho) a_{i+1\rho(i+1)} a_{i+2\rho(i+2)} \cdots a_{k\rho(k)} y_i, \quad k = 1, \dots, n \quad (5.10)$$

を  $A$  に対する **Jacobi 方程式** とよぶ. また, 初期条件  $y_0 > 0$  を満たす Jacobi 方程式の解  $\{y_i\}$  が, ある番号  $k$  で正から非負へと符号を変えるとき,  $k$  は 1 に共役であると言う. 即ち,

$$y_0 > 0, y_1 > 0, \dots, y_{k-1} > 0, y_k \leq 0.$$

**定理 5.2** 対称行列  $A$  が正定値であるための必要十分条件は共役点が存在しないことである.

**定理 5.3**  $\bar{x} \in R^n$  を  $f(x)$  の停留点とする.  $\bar{x}$  が極小解であるための十分条件は,  $f''(\bar{x})$  について,  $k=1$  の共役点が存在しないことである.

## 6 三重対角行列に帰着される極値問題

ある種の極値問題に限定すれば, Jacobi 方程式に差分方程式論を適用することにより, 共役点が求まる. 本節では折れ線最短路問題を一般化した次の極値問題を考察する.

$$(P_1) \quad \begin{aligned} &\text{Minimize} \quad f(x) := \sum_{k=0}^n f_k(x_k, x_{k+1}) \\ &\text{subject to} \quad x := (x_1, \dots, x_n) \in R^n, \end{aligned}$$

ただし,  $x_0$  と  $x_{n+1}$  は変数ではなく, 既知とする.

例えば、球面上の折れ線最短路問題は  $(P_1)$  として定式化できる。このとき、Hesse 行列  $A := f''(x)$  は

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & \cdots & & \\ & \cdots & \cdots & b_{n-1} & \\ & & & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

なる三重対角行列になる。ただし、

$$a_k = \frac{\partial^2 f_{k-1}(x_{k-1}, x_k)}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2 f_k(x_k, x_{k+1})}{\partial x_k^2}, \quad (6.2)$$

$$b_k = \frac{\partial^2 f_k(x_k, x_{k+1})}{\partial x_k \partial x_{k+1}}. \quad (6.3)$$

一方、 $a_k, b_k$  が定数、つまり、 $a := a_1 = \cdots = a_n, b := b_1 = \cdots = b_{n-1}$  なる場合には、2 階差分方程式の解を陽に与えることができる。さらにこのとき、次の仮定を設けても一般性を失わない。

(A1)  $a > 0$ . (Legendre の強条件)

(A2)  $|b| = 1$ .

このとき、主小行列式  $y_k := |A_k|$  は次の 2 階差分方程式を満たし、その解は定理 6.1 で与えられる。

$$y_k - ay_{k-1} + y_{k-2} = 0, \quad y_1 = a_1, \quad y_2 = a_1 a - 1. \quad (6.4)$$

**定理 6.1** 差分方程式 (6.4) の解は、特性方程式

$$y^2 - ay + 1 = 0 \quad (6.5)$$

の解  $\alpha, \beta$  を用いて、次のように表される。(1)  $a > 2$  の場合、

$$y_k = a_1 \frac{\beta^k - \alpha^k}{\beta - \alpha} - \frac{\beta^{k-1} - \alpha^{k-1}}{\beta - \alpha}. \quad (6.6)$$

(2)  $a = 2$  の場合、

$$y_k = 1 + 2k. \quad (6.7)$$

(3)  $0 < a < 2$  の場合、 $\alpha = e^{i\varphi}$  ( $0 < \varphi < \pi$ ) と表すと、

$$y_k = \frac{\sin \varphi \cos k\varphi + (2 - \cos \varphi) \sin k\varphi}{\sin \varphi}. \quad (6.8)$$

この定理を基に、共役点を求めることができる。

**定理 6.2** (定係数三重対角行列の共役点) 特性方程式  $y^2 - ay + 1 = 0$  の解を  $\alpha, \beta$  とする。(1)  $a \geq 2$  のとき、共役点は存在しない。(2)  $0 < a < 2$  のとき、 $\alpha = e^{i\varphi}$  ( $0 < \varphi < \pi$ ) とすると、 $(k+1)\varphi \geq \pi$  なる最初の番号  $k$  が  $n$  以下ならば、それは共役点である。

**例 6.1 (球面上の折れ線最短路問題, 固定端)** 単位球面の赤道上の 2 点  $A := (1, 0, 0)$  と  $B := (\cos T, \sin T, 0)$  を結ぶ折れ線最短路を考察しよう. ただし, 節点  $X_1, \dots, X_n$  は,  $A, B$  の間に等間隔に並ぶ  $n$  本の経線  $l_1, \dots, l_n$  上にとるものとする.  $\Delta t := T/(n+1)$  とすると, 節点は  $0 < \theta_k < \pi$  を用いて  $X_k = (\sin \theta_k \cos k\Delta t, \sin \theta_k \sin k\Delta t, \cos \theta_k)$  と表されるから,  $X_k X_{k+1}$  の長さ  $f_k(\theta_k, \theta_{k+1})$  は

$$\sqrt{2(1 - \cos \Delta t \sin \theta_{k+1} \sin \theta_k - \cos \theta_{k+1} \cos \theta_k)} \quad (6.9)$$

となり, 折れ線の長さは  $f(\theta_1, \dots, \theta_n) := \sum_{k=0}^n f_k(\theta_k, \theta_{k+1})$  として表される. ただし  $\theta_0 = \theta_{n+1} := \pi/2$ . そこで, 赤道と経線  $l_k$  の交点を  $\bar{X}_k$  で表すと, 折れ線  $A\bar{X}_1 \dots \bar{X}_n B$  に対応する  $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_n)$  は  $\bar{\theta} := (\pi/2, \dots, \pi/2)$  であり,  $\bar{\theta}$  は  $f(\theta)$  の停留点になる. また,

$$f''\left(\frac{\pi}{2}, \dots, \frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2-2c}} \begin{pmatrix} 2c & -1 & & & \\ -1 & 2c & \cdots & & \\ & \cdots & \cdots & -1 & \\ & & & -1 & 2c \end{pmatrix}, \quad c := \cos \Delta t$$

となる.  $\Delta t$  が十分小さければ  $0 < 2c < 4$  であるから, 定理 6.2 により次の結論を得る. (a)  $T < \pi$  のとき, 1 の共役点は存在しない. (b)  $T \geq \pi$  のとき,  $(k+1)T/(n+1) \geq \pi$  なる最初の番号  $k$  は 1 に共役である. これは古典的な結果に合致する.

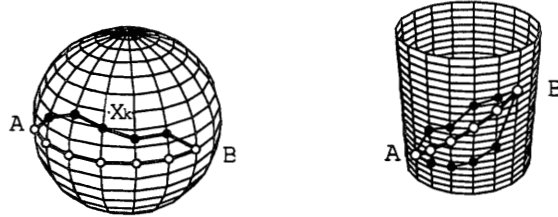


図 5: 球面と円柱面上の折れ線最短路問題

**例 6.2 (円柱面上の折れ線最短路問題, 固定端)** 円柱面  $x^2 + y^2 = 1$  上の 2 点  $A = (1, 0, 0)$ ,  $B = (\cos T, \sin T, \gamma)$  を結ぶ折れ線最短路を考察しよう. ただし,  $\Delta t := T/(n+1)$  として, 節点  $X_1, \dots, X_n$  は,  $A, B$  の間に等間隔に並ぶ  $n$  本の経線  $l_k := \{(\cos k\Delta t, \sin k\Delta t, z) : z \in \mathbb{R}\}$  上にとるものとする. 節点は,  $z_k \in \mathbb{R}$  を用いて  $X_k = (\cos k\Delta t, \sin k\Delta t, z_k)$  と表されるから,  $X_k X_{k+1}$  の長さは

$$f_k(z_k, z_{k+1}) := \sqrt{(z_{k+1} - z_k)^2 + 2 - 2c}, \quad c := \cos \Delta t \quad (6.10)$$

となる. よって, 折れ線  $A X_1 \dots X_n B$  の長さは  $f(z_1, \dots, z_n) := \sum_{k=0}^n f_k(z_k, z_{k+1})$  となる. ただし  $z_0 := 0, z_{n+1} := \gamma$ . そこで, 螺旋  $z(t) = t\gamma/T$  と経線  $l_k$  の交点を  $\bar{X}_k$  で表すと, 折れ線  $A\bar{X}_1 \dots \bar{X}_n B$  に対応する  $z := (z_1, \dots, z_n) \in \mathbb{R}^n$  は  $\bar{z} := (\gamma/(n+1), \dots, n\gamma/(n+1))$



であり,  $\bar{z}$  が  $f(z)$  の停留点であることが容易に分かる. また,

$$f''(\bar{z}) = (2 - 2c)(2 - 2c + d)^{-3/2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad d := \gamma^2 / (n + 1)^2 \quad (6.11)$$

となる. このとき,  $a = 2$  であるから, 定理 6.2 により共役点は存在しない. これは古典的な結果に合致する

## 7 極値問題 $(P_0)$ に対する Riccati 方程式

Jacobi の共役点理論において, Jacobi 方程式と Riccati 方程式は密接に関係する. 本節では,  $(P_0)$  に対する Riccati 方程式を考察する.

変分法の基本問題に対する Riccati 方程式を導く際, 完全平方のアイディアが重要であるが, 有限次元の場合も完全平方がキーワードになる. 最初に  $A$  が三重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} & \\ & & & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix}, \quad x := \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

の場合を考察しよう. まず, 2 次形式  $x^T A x$  のうち  $x_1$  を含む項を使い切るように, 適当な  $w_1 \neq 0$  を見つけて完全平方の項をつくる. 即ち,

$$\begin{aligned} x^T A x &= a_1 x_1^2 + 2b_1 x_1 x_2 + a_2 x_2^2 + \cdots + a_n x_n^2 \\ &= \left( w_1 x_1 + \frac{b_1}{w_1} x_2 \right)^2 + \left( a_2 - \frac{b_1^2}{w_1^2} \right) x_2^2 + \cdots + a_n x_n^2 \end{aligned}$$

次に,  $x_2$  を含む項を使い切るように, 適当な  $w_2 \neq 0$  を見つけて完全平方の項をもうひとつつくる. この操作を続けて, 最終的に 2 次形式が  $n$  個の完全平方の和

$$x^T A x = \left( w_1 x_1 + \frac{b_1}{w_1} x_2 \right)^2 + \left( w_2 x_2 + \frac{b_2}{w_2} x_3 \right)^2 + \cdots + w_n^2 \quad (7.1)$$

として表されるには,  $w_k$  が次の条件を満たせば十分である.

$$w_1^2 = a_1, \quad w_k^2 = a_k - \frac{b_{k-1}^2}{w_{k-1}^2} \quad (k = 2, \dots, n) \quad (7.2)$$

一方, 三重対角行列に対する Jacobi 方程式  $y_k = a_k y_{k-1} - b_{k-1}^2 y_{k-2}$  の両辺を  $y_{k-1}$  で割ると

$$\frac{y_k}{y_{k-1}} = a_k - b_{k-1}^2 \frac{y_{k-2}}{y_{k-1}} \quad (7.3)$$

となり, (7.2) と (7.3) を比較することにより, 対応

$$w_k^2 = \frac{y_k}{y_{k-1}} \quad (7.4)$$

が得られる. つまり, (7.2) が三重対角行列に対する Riccati 方程式で (7.4) が Jacobi 方程式の解と Riccati 方程式の解の間の変換式と考えられる. これに基づき, 一般の行列の場合も, Jacobi 方程式の両辺を  $y_{k-1}$  で割ることにより得られる漸化式を Riccati 方程式と定義する.

**定義 7.1**  $n \times n$  行列  $A = (a_{ij})$  に対して, 次の漸化式を Riccati 方程式とよぶ.

$$\begin{aligned} w_1^2 &= a_{11}, \\ w_k^2 &= a_{kk} + \sum_{\ell=1}^k \sum_{\rho \in S(\ell, k)} \frac{\varepsilon(\rho) a_{\ell\rho(\ell)} a_{\ell+1\rho(\ell+1)} \cdots a_{k\rho(k)}}{w_\ell^2 w_{\ell+1}^2 \cdots w_{k-1}^2}, \quad k = 2, \dots, n. \end{aligned}$$

なお,  $y_k$  は主小行列式  $|A_k|$  のことであつたから,  $w_k^2 = |A_k|/|A_{k-1}|$  は Gauss の消去法に表れるピボット, 軸 (pivot) である.

Jacobi 方程式の解  $y_k$  と Riccati 方程式の解  $w_k$  の変換公式 (7.4) によれば, ある番号  $k$  について,  $y_{k-1}y_k \leq 0$  が成立すること, 即ち,  $k$  が共役点であることと  $w_k^2 > 0$  なる  $w_k$  が存在しないことは同値になり, 古典的な場合に似た結果が成り立つ.

**定理 7.1**  $k \geq 1$  が 1 に共役であるための必要十分条件は, Riccati 方程式が非ゼロ解  $\{w_i\}_{i=1}^{k-1}$  をもつが, それを  $w_k$  まででは延長できないことである.

**定理 7.2** 停留点  $\bar{x}$  が  $(P_0)$  の極小解であるための十分条件は, Hesse 行列  $f''(\bar{x})$  に関する Riccati 方程式が非ゼロな実数解  $\{w_k\}_{k=1}^n$  をもつことである.

## 8 (SP) と $(P_0)$ の対応関係

次の表は,  $(P_0)$  と古典的変分法の基本問題 (SP) に対する最適性条件と方程式の対応関係を表す. ただし,  $A := f''(\bar{x})$ ,  $y_k := |A_k|$ .

(SP)	$(P_0)$
$x = x(t)$	$x = (x_1, \dots, x_n)$
$t \in [0, T]$	$k \in \{1, \dots, n\}$
$t$ の十分小さい近傍	$\{k\}$
Euler 方程式	$f_{x_k}(\bar{x}) = 0 \quad \forall k = 1, \dots, n$
Legendre 条件	$f_{x_k x_k}(\bar{x}) \geq 0 \quad \forall k = 1, \dots, n$
Legendre の強条件	$f_{x_k x_k}(\bar{x}) > 0 \quad \forall k = 1, \dots, n$
Jacobi 方程式: $y(t)$	主小行列式 $y_k$ の差分方程式
共役点	$y_1 > 0, \dots, y_{k-1} > 0, y_k \leq 0$
Riccati 方程式: $w(t)$	$f''(\bar{x})$ のピボットの差分方程式
$w = -\frac{Py}{y}$	$w_k^2 = \frac{y_k}{y_{k-1}}$

## 9 共役点から共役集合へ

極値問題  $(P_0)$  において, 変数  $x_1, \dots, x_n$  は同じ働きをするから, 共役点を定義するのに番号 1 から始める必然性は全く無い. むしろ共役集合とよぶ概念を導入する方が自然である. 即ち,  $I = \{i_1, \dots, i_k\}$  を  $\{1, \dots, n\}$  の部分集合とし, Hesse 行列  $f''(x) = (a_{ij})$  の部分行列  $(a_{ij})_{i,j \in I}$  について, それが非正の主小行列式をもつとき,  $I$  を共役集合とよぶ. さらに, 共役集合  $I$  のいかなる真部分集合も共役集合にならないとき,  $I$  を極小共役集合とよぶ. なお, 実際の問題では, 曲座標のように, 慣用的に変数に特定の文字が割り当てられることが多いので, 変数の部分集合  $\{x_i\}_{i \in I}$  も極小共役集合とよぶことにする.

**定理 9.1**  $A = (a_{ij})$  を  $2m+1$  重対角行列とする. 即ち,

$$a_{ij} = 0 \quad \text{if} \quad |i - j| \geq m + 1. \quad (9.1)$$

このとき, 極小共役集合の番号は高々  $m$  しか飛ばない. 特に, 三重対角行列の場合, 極小共役集合は連続した番号からなる.

**例 9.1 (極小三角形)**  $S_1$  を中心  $(3/2, 0, 3/2)$ , 半径  $1/\sqrt{2}$  の球面,  $S_2$  を中心  $(-3/2, 0, 3/2)$ , 半径  $1/\sqrt{2}$  の球面,  $C$  を中心  $(0, 0, R)$ , 半径  $R > 0$  の  $yz$  平面内のリングとする. このとき, 三角形  $X_1 X_2 X_3$  の面積を最小にする 3 点  $(X_1, X_2, X_3) \in S_1 \times S_2 \times C$  を求めよ.

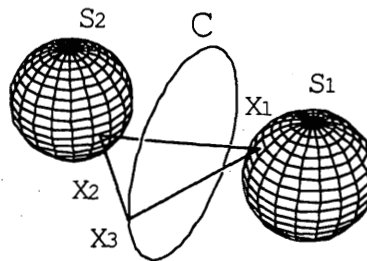


図 6: 極小三角形 1

目的関数として面積の 2 乗  $f(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2, \theta_3) := \|(X_1 - X_3) \times (X_2 - X_3)\|^2$  をとることにする. ただし,  $X_1, X_2, X_3$  は適当な  $0 \leq \theta_1 \leq \pi, 0 \leq \phi_1 < 2\pi, 0 \leq \theta_2 \leq \pi, 0 \leq \phi_2 < 2\pi, 0 \leq \theta_3 < 2\pi$  を用いて

$$X_1 = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta_1 \cos \phi_1 + \frac{3}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta_1 \sin \phi_1, \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \theta_1 + \frac{3}{2} \right),$$

$$X_2 = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta_2 \cos \phi_2 - \frac{3}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta_2 \sin \phi_2, \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \theta_2 + \frac{3}{2} \right),$$

$$X_3 = (0, R \sin \theta_3, R \cos \theta_3 + R)$$

と表しておく.  $\bar{X}_3$  をリング  $C$  の最下部の点  $(0, 0, 0)$ ,  $\bar{X}_1$  を  $S_1$  の中心と  $\bar{X}_3$  を結ぶ線分が  $S_1$  と交わる点  $(1, 0, 1)$ ,  $S_2$  の中心と  $\bar{X}_3$  を結ぶ線分が  $S_2$  と交わる点  $(-1, 0, 1)$  を  $\bar{X}_2$  とし,

$(\bar{X}_1, \bar{X}_2, \bar{X}_3)$  が極小解かどうかをしらべることにする. 先ず,  $(\bar{X}_1, \bar{X}_2, \bar{X}_3)$  を表すパラメータは  $\bar{\theta} = (\bar{\theta}_1, \bar{\phi}_1, \bar{\theta}_2, \bar{\phi}_2, \bar{\theta}_3) := (3\pi/4, \pi, 3\pi/4, 0, \pi)$  である. このとき  $\bar{\theta}$  は停留点になり,

$$f''(\bar{\theta}) = \begin{pmatrix} 4 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & -2R \\ -2 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 2R \\ 0 & -2R & 0 & 2R & 8R^2 - 8R \end{pmatrix}$$

となる. よって, Legendre の強条件は  $R > 1$  である. 次に,  $f''(\bar{\theta})$  に Gauss の消去法の基本変形を施すことにより, Riccati 方程式の解  $w_k$  が求まる.

$$w_1^2 = 4, \quad w_2^2 = 3, \quad w_3^2 = 3, \quad w_4^2 = 3, \quad w_5^2 = 8R(2R - 3)/3.$$

$w_5^2$  に着目すると,  $\bar{\theta}$  は  $R > 3/2$  のとき極小解で,  $R < 3/2$  のとき極小解ではない. 従って,  $1 < R < 3/2$  の場合,  $w_1, \dots, w_4$  までは非ゼロの実数解が存在するから, 球面上の点  $X_1, X_2$  だけを  $\bar{X}_1, \bar{X}_2$  から動かしても面積は小さくならず,  $X_1, X_2, X_3$  全部を同時に動かすことによつてのみ面積が小さくなるのが分かる. 例えば,  $R = 5/4$  の場合,  $X_1, X_2$  を水平手前に,  $X_3$  を手前に同じ角速度で動かすか,  $X_1, X_2$  を水平奥に,  $X_3$  を奥に同じ角速度で動かすと面積を小さくすることができる. つまり,  $\phi_1, \phi_2, \theta_3$  が極小共役集合である.

## 10 制約条件つき非線型計画問題に対する共役点

2 次の最適性条件と制約のない極値問題 ( $P_0$ ) に対する共役点理論を組み合わせることにより, 非線形計画問題 ( $P$ ) に対して共役点を定義することができる.

$$(P) \quad \begin{aligned} &\text{Minimize } f(x) \\ &\text{subject to } x \in R^n, \\ &\quad g_i(x) \leq 0 \quad i = 1, \dots, m, \\ &\quad h_j(x) = 0 \quad j = 1, \dots, \ell. \end{aligned}$$

記述を簡単にするために, Lagrange 関数と非増加方向の空間

$$L(x) := f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^{\ell} \mu_j h_j(x) \quad (10.1)$$

$$Y := \{y \in R^n; g'_i(\bar{x})y = 0 \quad \forall i \in I(\bar{x}), \quad h'_j(\bar{x})y = 0 \quad \forall j\} \quad (10.2)$$

を用いると, 一次独立制約想定と, 狭義相補性の仮定の下で, 2 次の最適性条件は次のように表される.

$$L'(\bar{x}) = 0, \quad (10.3)$$

$$y^T L''(\bar{x})y > 0 \quad \forall y \neq 0 \text{ in } Y. \quad (10.4)$$

そこで、勾配(横)ベクトル  $g'_i(\bar{x})$  ( $i \in I(\bar{x})$ ) を縦に並べた行列を  $g'_{I(\bar{x})}(\bar{x})$  と書くことにすると、一次独立制約想定により、

$$A := \begin{pmatrix} g'_{I(\bar{x})}(\bar{x}) \\ h'(\bar{x}) \end{pmatrix} \quad (10.5)$$

は最大ランクをも。従って、列ベクトルを適当に並び替えることにより、

$$A = (B, N), \quad B: \text{正則}$$

と分割できる。この分割に合わせて  $y$  も番号を付け直し  $y^T = (\xi^T, \eta^T)$  と分割すると、 $Ay = B\xi + N\eta$  であるから、 $Ay = 0$  は

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -B^{-1}N \\ I \end{pmatrix} \eta \quad (10.6)$$

と同値である。ただし、 $I$  は単位行列を表す。故に、2次の条件(10.4)は次のように表現できる。

$$\eta^T M \eta := \eta^T (-N^T B^{-T}, I) L''(\bar{x}) \begin{pmatrix} -B^{-1}N \\ I \end{pmatrix} \eta > 0 \quad \forall \eta \neq 0. \quad (10.7)$$

ただし、 $B^{-T}$  は  $B^{-1}$  の転置行列を表す。

行列の正定値性、非負定値性はそれぞれ共役点、狭義共役点により特徴づけられるから、2次の最適性条件は次のようにまとめられる。

**定理 10.1**  $\bar{x}$  を実行可能解とし、一次独立制約想定が満たされているとする。もし  $\lambda_1, \dots, \lambda_m \geq 0$  と  $\mu_1, \dots, \mu_\ell \in R$  が存在して、狭義相補性条件と  $L'(\bar{x}) = 0$  を満たし、(10.7) で定義される行列  $M$  が共役点を持たないならば、 $\bar{x}$  は孤立極小解になる。逆に、 $\bar{x}$  が極小解ならば、 $\lambda_1, \dots, \lambda_m \geq 0$  と  $\mu_1, \dots, \mu_\ell \in R$  が存在して、 $L'(\bar{x}) = 0$  を満たし、 $M$  は狭義共役点を持たない。

**例 10.1** (球面上の折れ線最短路問題, その2) 例 6.1 では、単位球面上の折れ線最短路問題を球面極座標を用いて制約のない極値問題として定式化した。ここでは、同じ問題を制約のある極値問題として定式化し、共役点を計算する。赤道上の2点  $A := (1, 0, 0)$ ,  $B :=$

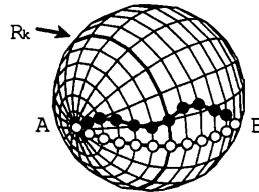


図 7: 球面上の折れ線最短路問題 2

$(\cos T, \sin T, 0)$  が与えられたとき、 $\Delta t := T/(n+1)$  とおき、 $x$  軸に直交する  $n$  個のリング

$$R_k := \{(\cos k\Delta t, y, z); y^2 + z^2 + \cos^2 k\Delta t = 1\} \quad k = 1, \dots, n \quad (10.8)$$

を用意する. 節点  $X_k$  が  $R_k$  上にある折れ線  $A, X_1, \dots, X_n, B$  のうちで, 長さが最小のものを求める問題を考える. 節点は  $X_k = (\cos k\Delta t, y_k, z_k)$  と書けるので, 目的関数は

$$f(y, z) := \sum_{k=0}^n \sqrt{(y_{k+1} - y_k)^2 + (z_{k+1} - z_k)^2 + (\cos(k+1)\Delta t - \cos k\Delta t)^2} \quad (10.9)$$

である. ただし,  $(y_0, z_0) := (0, 0)$ ,  $(y_{n+1}, z_{n+1}) := (\sin T, 0)$ . また,  $n$  個の等式制約

$$h_j(y, z) := y_j^2 + z_k^2 - \sin^2 k\Delta t = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (10.10)$$

をもつ. このとき, 赤道に対応する折れ線は

$$(\bar{y}, \bar{z}) := (\sin \Delta t, \dots, \sin n\Delta t, 0, \dots, 0) \in R^{2n} \quad (10.11)$$

で与えられ,

$$f'(\bar{y}, \bar{z}) = 2 \sin \frac{\Delta t}{2} (\sin \Delta t, \dots, \sin n\Delta t, 0, \dots, 0), \quad (10.12)$$

$$h'(\bar{y}, \bar{z}) = \begin{pmatrix} 2 \sin \Delta t & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 2 \sin n\Delta t & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.13)$$

故に  $\mu_j := -\sin \frac{\Delta t}{2}$  をとれば, Lagrange 関数  $L := f + \sum_{j=1}^n \mu_j h_j$  について,  $L'(\bar{y}, \bar{z}) = (0, \dots, 0)$  となる. さらに,  $h'(\bar{y}, \bar{z})$  左半分の正則な部分行列を  $B$  とし, 残りのゼロ行列を  $N$  とすると, (10.7) で定義される行列  $M$  は

$$M = L_{zz}(\bar{y}, \bar{z}) = \frac{1}{2 \sin \frac{\Delta t}{2}} \begin{pmatrix} 2 \cos \Delta t & -1 & \cdots & 0 \\ -1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \cdots & -1 & 2 \cos \Delta t \end{pmatrix} \quad (10.14)$$

となる. これは例 6.1 の Hesse 行列と定数倍を除いて同じであり, 例 6.1 と同じ結論を得る. 即ち,  $k\Delta t$  が最初に  $\pi$  以上になる番号  $k$  が存在すれば, それが 1 の共役点である.

## 参考文献

- [1] I. M. Gelfand and S. V. Fomin, *Calculus of variations*, Prentice Hall, (1963) (関根智明訳, 変分法, 総合図書, 1970).
- [2] R. Hilscher and V. Zeidan. Discrete optimal control: second order optimality conditions. *J. Differ. Equations Appl.*, **8**, 875–896 (2002).
- [3] H. Kawasaki, Analysis of conjugate points for constant tridiagonal Hesse matrices of a class of extremal problems, to appear in *Optimization Methods and Software*.
- [4] H. Kawasaki, A conjugate points theory for a nonlinear programming problem, *SIAM J. Control Optim.*, **40**, 54–63 (2001).
- [5] H. Kawasaki, The Riccati equation for nonlinear programming problems. *Kyushu University Preprint Series in Mathematics*, 2001-12 (2001).

- [6] H. Kawasaki, Conjugate points for a nonlinear programming problem with constraints, *J. Nonlinear Convex Anal.*, **1**, 287–293 (2000).
- [7] H. Kawasaki and V. Zeidan, Conjugate points for variational problems with equality and inequality state constraints, *SIAM J. Control Optim.*, **39**, 433–456 (2000).
- [8] 川崎英文, 解説: 変分法と最適制御問題の大域的性質—共役点, システム/制御/情報, **44**, 266–274 (2000).
- [9] G. Strang, *Linear Algebra and its Applications*, Academic Press, New York, (1976).
- [10] 杉山昌平, 差分方程式入門, 森北出版, (1969).
- [11] J. Warga, A second-order Lagrangian condition for restricted control problems, *J. Optim. Theory Appl.*, **24**, 475–483 (1978).
- [12] V. Zeidan, Admissible directions and generalized coupled points for optimal control problems, *Nonlinear Anal.*, **26**, 479–507 (1996).