シンプレックス法

1　シンプレックス法による最小値を求める手順

以下では 2 変数関数 $f(x, y)$ の最小値，および，最小値を与える座標値 (x, y) を求める場合について説明する。

1.1　初期値の設定

初期値として，座標点を 3 個設定する (x_i, y_i)，$i = 1, 2, 3$。

各座標点での関数値を $f_i = f(x_i, y_i)$，$i = 1, 2, 3$ とする。

この 3 点が作る三角形をシンプレックスと呼ぶ。一般にパラメータ数 $p = 2$ の数より 1 個多い座標点を設定する。シンプレックスを構成する座標の個数を n とする（$n = p + 1$）。

1.2　解の探索

$f(x_i, y_i)$ が最大になる座標を (x_h, y_h)，そのときの関数値を $f_h = f(x_h, y_h)$ とする。

$f(x_i, y_i)$ が最小になる座標を (x_s, y_s)，そのときの関数値を $f_s = f(x_s, y_s)$ とする。

関数 $f(x, y)$ の最小値を与える (x, y) は，(x_h, y_h) の反対側にあると期待される。

「反対側」とは，(x_h, y_h) 以外の p 個の座標点 $(x_i, y_i), i \neq h$ の重心 (x_0, y_0) を対称点とした (x_h, y_h) と逆の方向である（図 1 参照）。(x_0, y_0) の計算は（1）式による。

$$\begin{cases} x_0 = \dfrac{1}{n} \displaystyle\sum_{i \neq h} x_i \\ y_0 = \dfrac{1}{n} \displaystyle\sum_{i \neq h} y_i \end{cases} \tag{1}$$

次に，「反対側」にある座標点 (x_r, y_r) を（2）式で計算し，対応する関数値 $f_r = f(x_r, y_r)$ を求める。α は「鏡像パラメータ」と呼ばれるもので，$\alpha > 0$ と定める。

$$\begin{cases} x_r = (1 + \alpha)x_0 - \alpha x_h \\ y_r = (1 + \alpha)y_0 - \alpha y_h \end{cases} \tag{2}$$

もし $f_r < f_s$ であるならば，最小値を与える (x, y) は (x_h, y_h) からみて，(x_r, y_r) よりももっと遠くにあることが期待できる。このときは，（3）式により (x_e, y_e) を計算し，対応する関数値 $f_e = f(x_e, y_e)$ を求める。γ は「拡張のパラメータ」と呼ばれるもので，$\gamma \geq 1$ または $\gamma = 0$ と定める。

$$\begin{cases} x_e = \gamma x_r + (1 - \gamma)x_0 \\ y_e = \gamma y_r + (1 - \gamma)y_0 \end{cases} \tag{3}$$

もし，$f_e < f_r < f_s$ ならば，(x_h, y_h) の代わりに (x_e, y_e) を使って新たなシンプレックスを作る。

不幸にして $f_e > f_r$ ならば，(x_e, y_e) の利用をあきらめて (x_h, y_h) の代わりに (x_r, y_r) を使って新たなシンプレックスを作る。

もっと不幸なときは $f_r > f_h$ となるような場合であるが，このときには（4）式によって，座標点 (x_c, y_c) を計算し，対応する関数値 $f_c = f(x_c, y_c)$ を求める。β は「収縮のパラメータ」と呼ばれるもので，$0 \leq \beta \leq 1$ と定める。たいていの場合には $f_c < f_h$ となるので（そうならない場合にも対処しないといけないが煩雑になる

ので省略)，(x_h, y_h) の代わりに (x_c, y_c) を使って新たなシンプレックスを作る。

$$\begin{cases} x_c = \beta x_h + (1-\beta)x_0 \\ y_c = \beta y_h + (1-\beta)y_0 \end{cases} \tag{4}$$

以上をまとめると，

1. n 個のシンプレックスを構成する座標点，および，(x_r, y_r) に対応する関数値を求める。
2. 改善値の候補を探索する。
   (a) $f_r > f_h$ ならば，(x_c, y_c) を候補とする。
   (b) $f_h > f_r > f_s$ ならば，(x_r, y_r) を候補とする。
   (c) $f_s > f_r$ のときにはさらに改善値を探索する。
      i. $f_r > f_e$ ならば，(x_e, y_e) を候補とする。
      ii. $f_r < f_e$ ならば，(x_r, y_r) を候補とする。
3. f_h を与える座標点 (x_h, y_h) を上記の候補で置き換えて新たなシンプレックスを作る。
4. 収束すれば計算終了。収束していなければ 1 へ戻る。

このようにして，シンプレックスを構成する座標点の中で最も真値から遠いものを，より真値に近いものに置き換えることができる。

2　例題

2 変数関数 $f(x) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2$ の最小値をシンプレックス法で求める。
パラメータ数 p は 2 である（x および y）。
「鏡像パラメータ $\alpha = 2$」，「拡張のパラメータ $\beta = 0.5$」，「収縮のパラメータ $\gamma = 2$」とする。
初期値を表 1 の最初の 3 行のように設定し，各座標点における関数値 $f_i = f(x_i, y_i)$，$i = 1, 2, 3$ を求める。
（1）式による (x_0, y_0) を 4 行目，（2）式による (x_r, y_r) と f_r を 5 行目に示す。
関数値が最大となるのは (x_3, y_3) のときで，$f_h = f_3$ である。
$f_r < f_h$ なので，（3）式により，(x_e, y_e) と f_e を求めたものを 6 行目に示す。
$f_e < f_s$ なので，$(2.00000, 3.00000)$ を $(1.97650, 3.08800)$ で置き換えて新しいシンプレックスを作る（表 2 の 3 行目が置き換えられたもの)。

表 1　ループ回数 1

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	
1	1.99060	3.00000	93.61967	
2	2.00000	3.03520	94.08390	
3	2.00000	3.00000	101.00000	最大
0	1.99530	3.01760		
r	1.98590	3.05280	80.35989	
e	1.97650	3.08800	67.95633	次期候補

図 1 は，初期値から探索される (x_r, y_r)，(x_e, y_e) および，この場合には使用されないが (x_c, y_c) の位置関係を示す。
表 2 も同じように計算を進め，$(2.00000, 3.03520)$ を $(1.91775, 3.07920)$ で置き換える（表 3 参照)。
表 3 も同じように計算を進めるが，$f_r < f_e$ なので，$(1.99060, 3.00000)$ は $(1.86018, 1.86018)$ で置き換える（表 4 参照)。
表 4 では，$f_r > f_s$ なので，f_e は計算せず，$(1.97650, 3.08800)$ を $(1.71389, 3.31900)$ で置き換える（表 5

図 1　シンプレックス法による解の探索

表 2　ループ回数 2

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	
1	1.99060	3.00000	93.61967	
2	2.00000	3.03520	94.08390	最大
3	1.97650	3.08800	67.95633	置き換えられた
0	1.98355	3.04400		
r	1.95065	3.06160	56.17336	
e	1.91775	3.07920	36.67028	

表 3　ループ回数 3

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	
1	1.99060	3.00000	93.61967	最大
2	1.91775	3.07920	36.67028	置き換えられた
3	1.97650	3.08800	67.95633	
0	1.94713	3.08360		
r	1.86018	1.86018	5.12687	次期候補
e	1.77323	3.41800	8.08757	

参照）。

表 5 では，$f_r > f_h$ なので，f_c を計算し，$(1.97650, 3.08800)$ を $(1.71389, 3.31900)$ で置き換える（表 6 参照）。

以上のように繰り返し，シンプレックスを構成する座標点が十分に狭い範囲に入れば収束したと判定する。

例題では $x = 1, y = 1$ のときに最小値 $f(x, y) = 0$ となる。

表 4　ループ回数 4

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	
1	1.86018	3.25080	5.12687	置き換えられた
2	1.91775	3.07920	36.67028	
3	1.97650	3.08800	67.95633	最大
0	1.88896	3.16500		
r	1.71389	3.31900	15.07070	次期候補

表 5　ループ回数 5

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	
1	1.86018	3.25080	5.12687	
2	1.91775	3.07920	36.67028	最大
3	1.71389	3.31900	15.07070	置き換えられた
0	1.78703	3.28490		
r	1.52559	3.69630	187.65503	
c	1.85239	3.18205	6.94167	次期候補

表 6　ループ回数 6

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	
1	1.86018	3.25080	5.12687	
2	1.85239	3.18205	6.94167	置き換えられた
3	1.71389	3.31900	15.07070	
：				