第３回システム最適化に関するシンポジウム講演論文集　1993年12月

(1) 活性な制約式集合に基づく探索方法

SEARCH METHODS THAT ARE BASED ON THE ACTIVE SET

平田恭久*
by Yashuhisa HIRATA

The author has already proposed an optimization method using selection techniques of active constraints, and has named this method an active constraint method. In this method active constraints are selected by a technique that is based on the duality theory is similar to a pivot selection technique of the simplex method. There are some optimization methods which are based on active set strategies. These methods are generalized reduced gradient methods, gradient projection methods, and quadratic approximation methods. In this paper comparison of the active constraint method with methods using active set strategies is shown, and some consideration in an extending method for the active constraint method are stated.

Key Words : optimization method, active set, search method

1．まえがき

活性な制約式集合を用いる非線形最適化手法の中には、①一般縮少勾配法，勾配射影法のように活性な制約面上に厳密に乗せて目的関数で探索する方法と、②逐次２次計画法のように*Active Set*は探索方法の算出のみに使用して罰金関数で探索する方法とがある。著者の開発した等式制約法は上記①のタイプであるが、明解なアルゴリズムで活性な制約式とその従属変数を選択している利点をいかして、上記①，②の中間的な探索方法が可能かどうかについて考察を試みる。

中間的な探索方法を探るための内容は、下記２．で活性な制約式集合g_mを用いる非線形最適化手法の概要，下記3.で活性な制約式の選択方法の*Active Set Methods*と等式制約法との比較，下記4.で独立変数x_sと従属変数x_mに分ける変数区分の難しさと変数区分の意義，下記５．で活性な制約面に沿うための探索方法の逐次２次計画法と等式制約法との比較，下記６．で計算量を軽減するためのラインサーチの工夫，について述べている。

中間的な探索方法では計算量の軽減を期待しているが、探索時の活性な制約面への追随性をいかに確保するかが問題になる。ある点での線形近似で制約面に沿って探索するとき、制約面の非線形性が弱ければ計算量を節約してもラインサーチで大幅な誤差は生じないが、，非線形性が強いと制約面に追随することができなくなる。このため、ラインサーチ途中では制約面から若干離れていても、ラインサーチ終了時には制約面上に乗っているような工夫が必要になる。

＊　群馬高専教授　土木工学科　（〒３７１　群馬県前橋市鳥羽町５８０）

2．活性な制約式と最適化手法

（1）非線形最適化手法の概要

非線形最適化手法については種々の分類があるが、本論文では代表的な手法として、①拡大関数法，②逐次線形計画法，③許容点法，④逐次２次計画法，の四つを取り上げる。[1),2)] 上記①は制約式変換法とも呼ばれ、ペナルティ法，乗数法がある。目的関数と制約式で構成される制約条件のない拡大関数を作り、これに最小化法を逐次適用して近似解を改良していく。制約式を含む罰金項で制約条件を処理しようとするのがペナルティ法であるが、罰金項に付ける制御パラメータ（応答係数）のコントロールに難点があり、この点に改良を加えたのが乗数法である。乗数法では*subproblem*の*Lagrange*乗数を推定することにより制御パラメータのコントロールを行う。

上記②は非線形計画問題を線形近似した*subproblem*に線形計画法を逐次適用して近似解を改良していく方法であり、同系統の手法に切除平面法等がある。線形計画問題では許容領域を形成する凸多面体の端点に最適解が存在するが、非線形計画問題では端点でない制約面上に存在するのが普通なので、最適解に収束させるための工夫が必要になる。

上記③は制約条件の満足を優先させて目的関数の最小化を図って行く方法である。ある点で線形化した目的関数，制約式より探索方向を生成している。勾配射影法と一般縮小勾配法は本質的には同じものであるとされているが、活性な制約面の接平面上である探索方向に進んだ後に、活性な制約面に復帰することで制約条件を満足させている。これに対し、許容方向法では活性な制約面に抵触しない探索方向を選んでいる。

上記④はある点で目的関数，制約式を*Taylor*展開し、目的関数は２次の項まで、制約式は１次の項までとった*subproblem*を逐次解いていき、最適解に到達する方法である。このままでは収束性に問題があるので、目的関数の２次項の代わりに*Lagrange*関数の２階微分（*Hesse* 行列）で置き換えた方法があり、この*Hesse*行列を近似行列で置き換えた、すなわち準*Newton*法を適用した方法へと発展してきている。逐次２次計画法は現段階では最も有力な手法とされている。

（2）活性な制約式集合

上記（１）の①，②はアルゴリズムの基本構成が等式制約法とは異なっており、最も近い位置にあるのは上記（２）の③の一般縮小勾配法と勾配射影法である。上記（１）の④の逐次２次計画法は若干の差異はあるが、基本構成は等式制約法とほぼ同じである。これらの手法は活性な制約面をなんらかの方法で見つけ出して*Lagrange*関数を構成し、最適解での必要条件を表す連立非線形方程式に*Newton*法を適用して解く形になっている。非線形計画問題に*Newton*法を適用するので、線形化した*subproblem*を逐次解いてる。

一般縮小勾配法，勾配射影法，逐次２次計画法は等式制約法に類似の手法であるが、活性な制約式集合を*Active Set Methods*で求めており、等式制約法とはこの点が異なっている。一般縮少勾配法と勾配射影法で探索方向の算出に*Hesse* 行列を用いると、逐次２次計画法に似た形になるが、逐次２次計画法では活性な制約面に復帰する操作はなくて、探索方向の算出で制約条件の満足を図っている。

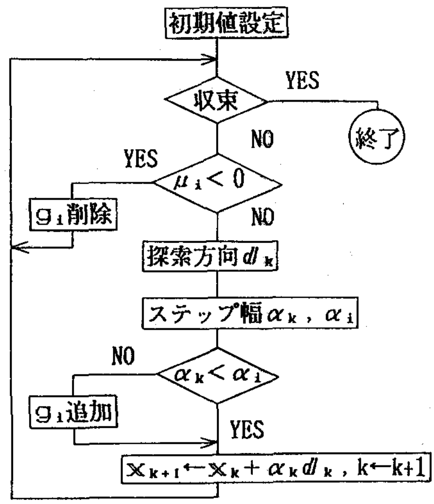
3．活性な制約式の選択

（1）*Active Set Methods*

不等号条件付き線形制約問題に対する*Active Set Methods*の概要を図－１に示すが、活性な制約式g_mについて求めた探索方向d_kでラインサーチを行い、これを反復して最適解での収束条件を満たせば終了する。[1)] アルゴリズムの基本となる活性な制約式g_mの取捨選択は次のように行う。①*Lagrange*乗数μ_mに負のものが含まれているなら、絶対値の最も大きいμ_iの制約式g_iをg_mから削除する。②ラインサーチのときg_m以

外のg_{r-m}についてはd_k方向で最も手前で抵触する制約式g_iのステップ長α_iを算出しておき、ラインサーチ最小点のステップ長α_kよりもα_iが手前にあればその制約式g_iをg_mに追加する。このようにしてg_mの取捨選択が可能になるが、*active set*の初期値設定が全体の効率に大きく影響する。

非線形制約式に対しても基本的には図－１のアルゴリズムが適用できるが、線形制約式に比べ種々の難しさが生じてくる。一般縮少勾配法（勾配射影法でもほぼ同様）では最も手前で抵触するステップ長α_iを試算で求め、d_k上のα_i点から$g_m=0$上の点を得ている。*active set*には正確に満足する（$g_i=0$）の制約式g_iが含まれる。これに対し逐次２次計画法では、活性な制約式の主な目的は探索方向の算出である。制約面への復帰ベクトルはなく、探索方向と罰金関数とで制約式の処理を行うが、活性な制約式を正確に満足することはできないので、*active set*の選択基準が複雑になる。このように*active set*の選択基準は採用する最適化手法によっても異なる。



図－1　*Active Set Methods*

（２）等式制約法の場合

等式制約法では双対問題の解法により活性な制約式g_mとその従属変数x_mを選択している。[3)] 式(1)の不等号付き最小化問題について双対問題を作成すると、その*subproblem*は式(2)になる。式(2)で∇Lは*Lagrange*関数の微分でスラック変数に相当し、∇fは定数項に相当しており、双対変数λについての線形計画問題とみなせる。式(2)をシンプレックス法に準じた方法で解くときの掃き出し後のタブローを図－２に示すが、λ_mは変数区分がある場合の*Lagrange*乗数，$\nabla_s L$は縮少勾配であり、ｎ個の設計変数は独立変数x_sと従属変数x_mに、ｒ個の制約式はg_mとg_{r-m}に分かれている。掃き出し後のタブローでは式(3)が成立しており、活性な制約式とその従属変数が選択されたことになる。

$$\left.\begin{array}{l}\min\limits_{x}\ f(x)\\ \text{subject to}\\ \quad g(x)\leq 0\end{array}\right\}\cdots\cdots\quad(1)$$

$$\left.\begin{array}{l}\max\limits_{\lambda}\ L(x,\lambda)=f+g^T\lambda\\ \text{subject to}\\ \nabla f=-\nabla g^T\lambda+\nabla L\\ \lambda\geq 0\end{array}\right\}\cdots\cdots\quad(2)$$

$$g_m=0\text{ なら }\lambda_m\geq 0\quad\cdots\cdots\quad\text{(3)-a}\qquad g_{r-m}\leq 0\text{ なら }\lambda_{r-m}=0\quad\cdots\cdots\quad\text{(3)-b}$$

	f	g_m	g_{r-m}	dx_m	dx_s	
g	$f+\nabla f$	0_m^T	$-g_{r-m}'^T$	dx_m^T	0_s^T	0
x_m	λ_m	I_m	B	D	0	1
x_s	$\nabla_s L$	0	C	E	I_s	n

図－２　タブローでの掃き出し

$$B=-(\nabla_m g_m^T)^{-1}\nabla_m g_{r-m}^T$$

$$C=-\{\nabla_s g_{r-m}^T-\nabla_s g_m^T(\nabla_m g_m^T)^{-1}\nabla_m g_{r-m}^T\}$$

$$D=-(\nabla_m g_m^T)^{-1}$$

$$E=-\nabla_s g_m^T(\nabla_m g_m^T)^{-1}$$

４．変数区分

（１）変数区分の難しさ

非線形最適化手法の中で、独立変数と従属変数に分ける変数区分をアルゴリズムの基礎にしているのは等式制約法と一般縮少勾配法である。しかしながら、一般縮少勾配法の難点は変数区分基準に起因すると言わ

れている。[2] その難点は、①$\nabla_m g_m$が正則でないこと及びx_mの退化についてのチェックとその状態からの復帰が必要，②変数区分の変化の過程で$(\nabla_m g_m)^{-1}$の更新と$\nabla_s L$の再評価のために多くの計算が必要，③準Newton法等を適用する場合は変数区分の変化により蓄積した情報を失う，④変数区分の選択での恣意性であり変数区分は収束に影響をあたえる，である。

これに対し、勾配射影法では変数区分なしに制約面上への射影としてn次元の最急勾配を算出している。等式制約法でも縮少勾配を算出しているが、これらの難点の殆どを解決しており、これは等式制約法の一つの特色になっている。[4),5)] 最急勾配を算出するだけなら変数区分の必要はないが、変数区分の意義がどこにあるかについての明確な結論はまだ得られていない。この点については下記（2）で関連事項に触れており、変数区分の意義を示す例になつている。

（2）変数区分の意義

変数区分がない場合の*Lagrange*乗数μ_m算出の基本は式(4)であり、これは最適解以外では成立しないので、探索途中の点では推定値になる。μ_m推定は残差を最小にする式(5)より得られ、式(6)μ_mになる。活性な制約式でありながら$\mu_i<0$を生ずるμ_m推定の例題があるが[1)]、この例題で変数区分のある場合の式(7)λ_mを求めると、$\mu_i=-1<0$に対し$\lambda_i=6>0$になる。式(6)μ_mで$(\nabla_m f+E^T d_s)$のうち$\nabla_m f$がλ_m分であり、これに$E^T d_s$が加わってμ_m分になるため、$\nabla_m f$と$E^T d_s$の符号及び相対的な大きさによりλ_mとμ_mで符号が逆転する場合がある。μ_mは最適解での乗数の推定値を求めているのに対し、等式制約法では式(7)よりλ_mを定めており、独立変数を固定したときの従属変数次元での最適解を求めているとみなされる。乗数の符号判定の役割からすると従属変数次元でのλ_m算出の方が当を得ていると考えられる。

$$\nabla f+\nabla g_m^T \mu_m=0 \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (4) \qquad\qquad min\ \|\nabla f+\nabla g_m^T\mu_m\| \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (5)$$

$$\mu_m=-(\nabla g_m \nabla g_m^T)^{-1}\nabla g_m \nabla f=-(\nabla_m g_m^T)^{-1}(\nabla_m f+E^T d_s) \qquad \cdots\cdots\cdots (6)$$

$$\lambda_m=-(\nabla_m g_m^T)^{-1}\nabla_m f \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (7)$$

ラインサーチでα_iの制約式に抵触したとき、①g_iの代わりにg_mの一つの制約式g_i'が削除される場合，②g_iが純増になる場合，がある。等式制約法では、上記①は制約式交換になる。これに対し*Active Set Methods*では図－1に示すように、制約式交換をg_iを追加→x点更新→g_i'削除の3段階で処理している。この例も変数区分の利点の一つである。なお、等式制約法ではステップ長α_iは算出していないが、これは複数個の制約式に抵触してもその中から活性な制約式が選別できるためであり、*Active Set*とその従属変数を双対問題の解法として選んでいることの利点である。

5．活性な制約面に沿った探索

（1）逐次2次計画法

逐次2次計画法の*subproblem*は式(8)であり、これを等式制約法のように活性な制約面上の探索とすると$g_m=0$となる。Gは*Lagrange*関数の2階微分の近似行列であるが、式(8)の解に変数区分がある場合の近似行列G_Fを適用して整理すると式(9)になる。式(9)のdは等式制約法に準*Newton*法を適用したときの探索方向である。逐次2次計画法では*Active Set*は探索方向算出のためであり，活性な制約面に抵触しながら罰金関数で探索する。一般縮少勾配法のように活性な制約面上に厳密に乗せて目的関数で探索するには多くの計算量が必要であるが、次に述べる方法により計算量の減少が期待できる。

活性な制約式g_mさえ正しく選んであれば、探索途中の点は$g_m=0$を厳密に満足しなくても、探索終了点で厳密に満足できれば最適解に到達できる。ラインサーチにおいても同様でラインサーチ終了点に近づくにつれ、$g_m=0$の満足度を高めていけばよい。適用例の非線形性が弱ければこれで十分であるが、非線形性が強いときは$g_m=0$から離れ過ぎないようにラインサーチに工夫を加える。

$$\left.\begin{array}{l}\min\limits_{\mathbf{d}} \nabla f^{T}\mathbf{d}+1/2\,\mathbf{d}^{T}G\mathbf{d}\\ \text{subject to}\\ \quad \mathbf{g}_{m}+\nabla \mathbf{g}_{m}\mathbf{d}=\mathbf{0}\end{array}\right\}\cdots\cdots \quad (8)$$

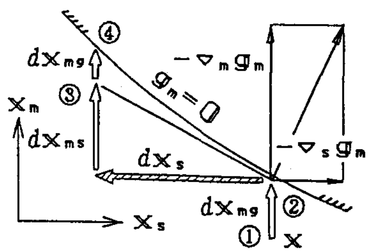
$$\left.\begin{array}{l}\mathbf{d}=-G_{F}^{-1}\nabla F\\ \mu_{m}=-(\nabla \mathbf{g}_{m}\nabla \mathbf{g}_{m}^{T})^{-1}\nabla \mathbf{g}_{m}\nabla f\end{array}\right\}\cdots\cdots \quad (9)$$

（2）等式制約法でのラインサーチ

図－3が等式制約法でのラインサーチであるが、図－2の掃き出し後のタブローと対比させて説明する。[6]点①で∇f，$\nabla \mathbf{g}$，f，$\mathbf{g}$を計算し、活性な制約面を得るように掃き出すと、式(10)より$\mathbf{x}=\mathbf{x}+d\mathbf{x}_{mg}$で点②になる。$d\mathbf{x}_{s}$で進むとき$\mathbf{g}_{m}=\mathbf{0}$に沿うようにするには$\mathbf{x}_{s}$行に$d\mathbf{x}_{s}$を乗じて$\mathbf{g}$行に加えれば、式(11)より$\mathbf{x}=\mathbf{x}+[d\mathbf{x}_{s},d\mathbf{x}_{ms}]^{T}$に変化して点③になる。点③で$\mathbf{g}$を計算して$\mathbf{g}_{m}=\mathbf{0}$となるように$\mathbf{x}_{m}$行に$\mathbf{g}_{m}$を乗じたものを$\mathbf{g}$行から引くと式(10)より$\mathbf{x}=\mathbf{x}+d\mathbf{x}_{mg}$に変化して点④に移行する。等式制約法では、①厳密に乗せなくても*Active Set*の選択が可能，②タブローの掃き出しでの目的関数の変化dfは式(12)であり$\mathbf{g}^{T}\lambda$は基本的には罰金関数と同じ働き，の二点がある。これを考慮すると逐次２次計画法と一般縮少勾配法の中間段階も可能となり、等式制約法の利点を残したままの拡張版になる。

$$d\mathbf{x}_{mg}^{T}=\mathbf{g}_{m}^{T}D \quad \cdots\cdots \quad (10) \qquad d\mathbf{x}_{ms}^{T}=d\mathbf{x}_{s}^{T}E \quad \cdots\cdots \quad (11)$$

$$df=\nabla f^{T}d\mathbf{x}=\mathbf{g}^{T}\lambda \quad \cdots\cdots \quad (12)$$



図－3　ラインサーチの仕組み

6．ラインサーチの工夫

（1）ラインサーチでの補正

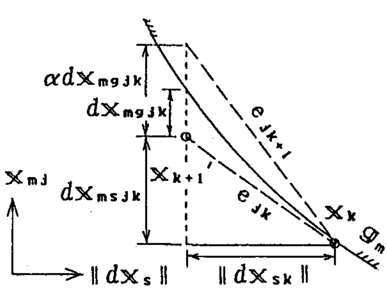
$\mathbf{g}$の非線形性が強くなければ各点での$\mathbf{g}$の計算は１回のみとし、$d\mathbf{x}_{mg}$を反復して求めなくてもラインサーチ最小点に近づくにつれ$\mathbf{g}_{m}=\mathbf{0}$上の$f$に近い値が求められる。非線形性が強いと$\mathbf{g}$の計算のD，Eがタブローでの D，Eから大幅に変化し、$d\mathbf{x}_{mg}^{T}=\mathbf{g}_{m}^{T}D$，$d\mathbf{x}_{ms}^{T}=d\mathbf{x}_{s}^{T}E$が実態から離れ$\mathbf{g}$の計算が１回のみでは$\mathbf{g}_{m}=\mathbf{0}$に対する追随が悪くなる。タブロー作成点から離れた点で∇f，$\nabla \mathbf{g}$を計算すれば解決できるが、計算量の大幅な増加になるので、ラインサーチの進捗に伴いD，Eを補正する方法が必要になる。

Eに関する補正を図－４に示すが、タブロー作成点でのEのままでは制約面から離れが大きくなる。各制約変数ごとの係数e_{j}を式(13)で定義して、$\mathbf{x}_{mj}$の変化を２次式と仮定すると式(14)の$\alpha=2$になり、e_{jk+1}が算出できる。Dに関する補正を図－５に示すが、２回の$\mathbf{g}$の計算より得られた$d\mathbf{x}_{mgj}$①$+d\mathbf{x}_{mgj}$②が近似値に採用できるとみなして、Dに関する補正係数d_{j}を式(15)で定める。このd_{j}を式(10)の$d\mathbf{x}_{mgj}$に掛けることにより、$d\mathbf{x}_{mgj}$の補正を行う。

$$d\mathbf{x}_{msj}=e_{j}\,\|d\mathbf{x}_{s}\| \quad \cdots\cdots \quad (13)$$

$$e_{jk+1}=(d\mathbf{x}_{msjk}+\alpha d\mathbf{x}_{mgjk})/\|d\mathbf{x}_{sk}\| \quad \cdots\cdots \quad (14)$$

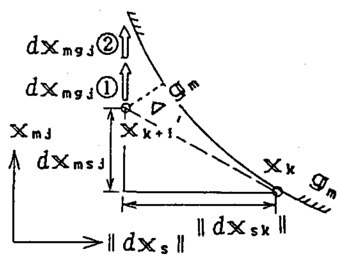
$$d_{j}=(d\mathbf{x}_{mgj}①+d\mathbf{x}_{mgj}②)/d\mathbf{x}_{mgj}① \quad \cdots\cdots \quad (15)$$



図－４　Eに関する補正

（2）中間的な探索法

上記（1）の補正の効果は簡単な計算例について、①e_{j}補正は計算量の増加がなくてかなりの効果，②$d\mathbf{x}_{mg}$反復は$\mathbf{g}$計算による計算量の増加があるが$\nabla \mathbf{g}$を固定しても確実な効果，③d_{j}補



図－５　Dに関する補正

正によりある程度の効果，があることが認められた。補正を実行するときの方針は、①ラインサーチでは補正の機会（g計算点）が多いのでゆるやかな補正を続けて精度を高めていく，②各補正手段はお互いに影響しあっているのでお互いの関連を考慮して補正する，ことが良いと考えられる。

ラインサーチでの補正により制約面への追随性が向上することから、制約面上に厳密に乗せなくても探索が可能になる。これにより等式制約法は一般縮少勾配法型でありながら、制約面への復帰ベクトルに要する計算量を軽減し、制約面に若干抵触しながらラインサーチ終了点ではほぼ$g_m=0$を満足できる探索法へと変化してくる。この探索法ではラインサーチの精度は落ちないので、準*Newton*法等の適用上の問題はない。

7．結論

（1）等式制約法を他の非線形最適化手法と比較し次の３点を示すことができた。①等式制約法は一般縮少勾配法，勾配射影法と同じカテゴリーに属する。②活性な制約式集合を選択する方法として*Active Set Methods* が代表的であるが、等式制約法ではこれを双対問題の解法として処理している点が大きな相違点である。③シンプレックス・タブローでの掃き出しにより、活性な制約式とその従属変数の選択及び活性な制約面に沿った探索に必要なdxを得ている点が大きな特色である。

（2）上記（1）－③の特色に関連した見解として次の２点を示した。①活性な制約式g_mさえ正しく選択できていれば、探索途中では$g_m=0$を厳密に満足させない方が計算量を軽減できるが、等式制約法ではこのような方法が可能であることを考慮すると、一般縮少勾配法と逐次２次計画法との中間段階の方法へと拡張する可能性があることを述べた。②制約式の非線形性が強いとラインサーチのとき活性な制約面への追随が悪くなるが、ラインサーチでの補正によりこの点を解決すれば中間段階の探索法になる。

参考文献

1) Gill,P.E.,Murray,W.and Wright,M.H.:Practical Optimization,Academic Press, pp.167 ～pp.175, pp.205～pp.251,1981

2) Reklaitis,G.V.,Ravindran,A.and Ragsdell,K.M.:Engineering Optimization,Wiley-Interscience, pp. 377 ～pp.463,1983

3) 平田恭久・伊藤文人：活性な制約面の選択を主眼にした最小化問題の解法，土木学会論文集，第386 号／I-8,PP.257～pp.266，1987年10月

4) 平田恭久：縮少勾配法の最小化法への適用，構造工学論文集，Ｖｏｌ．38A，PP.413 ～pp.420，1992年3月

5) 平田恭久：制約付き最小化法への縮少勾配の適用，構造工学論文集，Ｖｏｌ．39A，PP.485 ～pp.492，1993 年3月

6) 平田恭久：ランイサーチの改良について，土木学会第48回年次学術講演会講演概要集，I-515