

群馬高専 正員 平田恭久
東京都立大学 正員 伊藤文人

1. 概要

- 1) 筆者らは以前から活性重合成析を例にして最適解の探索方法について考察を進めてきたが、ここで述べる等式制約探索法はその考察から得られた方法である。この方法での基本的な考え方は、①最適解はなんらかの制約面上に存在するので、活性な制約面上を探索していけば最適解に到達できる。②活性な制約面上に解を乗せておくには、不等式制約の中から他の制約式を不等号で満足するような何個かの制約式を選んで等式制約とし、この連立方程式を解けばよい。③選んだ等式制約が“不利な組合せ”であると最適解には到達できないので、等式制約についてこのLagrange乗数を用いるとなるようにしておくことである。等式制約をえて最適解を探索するという意味で等式制約探索法と略称したが、この方法の出発点はプレートガーダーでの最適析高であり、最適析高の探索をより一般的なものに拡張したものといえる。
- 2) この方法の利点は、①活性な制約面でかつ不利な組合せでない制約面上を探索するので、探索途中の解は単なる許容解ではなくて、探索変数を指定したときの最も有利な解になっている。②設計ではどの制約条件により形状寸法が定まるかが重要であるが、この方法では形状寸法を定めている制約条件すなわち等式制約を明確にしておくことができる。③探索変数ある間隔で指定して計算すると、解の全体の状況が簡単に把握できる。④等式制約を連立方程式として解くことにより制約条件を処理しているので、最適解への収束性がよいことである。この方法の問題点としては、①アルゴリズムが若干複雑である。②方程式を解くため及びそれを求めるための計算量が必要である。シビアである。

2. 考え方

- 1) 最適解の必要条件 Lagrange関数(1)式を定義したとき、
 (2)式の不等式制約付き最小化問題について \mathbf{x}^* が最適解であるための Kuhn-Tucker必要条件は、 \mathbf{x}^* , λ^* が(1)式に対し(3)式を満たすことである。ここで等号で満足する制約式を m 個 ($m \leq n$) とすると、不等号で満足する制約式は $M-m$ 個である。(3)式第2~3行は(4)式が成立していれば満足できる。(3)式第1行は \mathbf{x}^* が $f(\mathbf{x})$ の制約条件付きの極値を与える条件なので、最小値が探索できれば(3)式第1行が満足できる。よって最小値を探しておいたとき(4)式が成立していればこの解 \mathbf{x}^* は(3)式すなわち最適解の必要条件を満足している。

- 2) 探索の段階で備えすべき条件 n 個の変数のうち m 個の制約変数 \mathbf{x}_M は制約式 $g_M(\mathbf{x}) = 0$ に制約され、残りの $n-m$ 個の探索変数 \mathbf{x}_m について探索を行う。等式制約として選んだ m 個の制約式 $g_m(\mathbf{x}) = 0$ が備えすべき条件を(5)式で示す。(5)式を満足するよう等式制約を選び探索を行いつつ最小値 \mathbf{x}^* が得られたとすると、(5)式第1~2行は(4)式と同じであるので、(3)式が成立する。よって \mathbf{x}^* は最適解の必要条件を満足している。(5)式第3行は等式制約を与えるという操作のために必要となる条件である。制約面の交線上(交線上の点 \mathbf{x} は連立方程式 $g_m(\mathbf{x}) = 0$ を解くことにより定まる)を探索していくので、 $g_m(\mathbf{x}) = 0$ の解が存在するような等式制約を与える必要がある。(5)式の条件は“活性でありかつ不利でない制約面の交線上”を意味している。

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda^T g_M(\mathbf{x}) \quad (1)$$

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x}: n \text{ 個の変数} \quad (2)$$

$$\text{Subj. to } g_M(\mathbf{x}) \leq 0 \quad g_M: M \text{ 個の制約式}$$

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}^*, \lambda^*)}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial f(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}} \right)^T + \lambda^T \frac{\partial g_M(\mathbf{x}^*)}{\partial \mathbf{x}} = 0$$

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}^*, \lambda^*)}{\partial \lambda} \lambda_M^* = \lambda_M^T g_M(\mathbf{x}^*) = 0, \lambda_M^* \geq 0 \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \text{等号で満足 } g_m(\mathbf{x}^*) = 0 \text{ では, } \lambda_m^* \geq 0 \\ & \text{不等号で満足 } g_{M-m}(\mathbf{x}^*) < 0 \text{ では, } \lambda_{M-m}^* = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & g_{M-m}(\mathbf{x}) < 0 : \text{他の制約式を不等号で満足} \\ & [\text{これと } g_m(\mathbf{x}) = 0 \text{ とで } g_M(\mathbf{x}) \leq 0 \text{ である}] \end{aligned} \quad (5)$$

$$\lambda_m \geq 0 : \text{不利な組合せでない}$$

$$\begin{aligned} & g_{M-m}(\mathbf{x}) < 0 \text{ の制約式では } \lambda_{M-m} = 0 \\ & [\text{両者を合わせると } \lambda_m \geq 0 \text{ である}] \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial g_m}{\partial \mathbf{x}_m} \text{ の rank } = m : g_m(\mathbf{x}) = 0 \text{ の解が存在する} \\ & \text{すると, (5)式第1~2行は(4)式と同じであるので, (3)式が成立する。よって } \mathbf{x}^* \text{ は最適解の必要条件を満足している。} \\ & (5) \text{ 式第3行は等式制約を与えるという操作のために必要となる条件である。制約面の交線上(交線上の点 } \mathbf{x} \text{ は連立方程式 } g_m(\mathbf{x}) = 0 \text{ を解くことにより定まる)を探索していくので, } g_m(\mathbf{x}) = 0 \text{ の解が存在するような等式制約を与える必要がある。(5)式の条件は“活性でありかつ不利でない制約面の交線上”を意味している。} \end{aligned} \quad (5)$$

3. アルゴリズム

1) 探索の段階では活性であり（抵触しない）かつ不利でない ($\alpha_i < 0$ がない) の条件を満たすために次の二つの処理を行う。①抵触したときの処理は抵触した制約式を等式制約 g_m に入れ、同じグループの制約式を g_m からはずす。この $g_m(\bar{x}) = 0$ を解いたとき抵触がなければよい（もしあれば同じ操作を反復する）。② $\alpha_i < 0$ があるときの処理は $\alpha_i < 0$ の制約式を g_m からはずし、“対応した変数”を制約変数 x_m から探索変数 x_m へ移しこの変数で探索する。この探索では他の制約式に抵触するかまたは最小点が得られるかの二つのケースがある。前者のケースでは抵触した制約式を g_m に探索中の変数を x_m に入れ α を計算する。両者とも $\alpha_i < 0$ がなければよい（もしあれば同じ操作を反復する）。この処理により α_i が満たされるので、以前の探索に戻る。

2) 図の例は $g_m = g_{c1} \cdot g_{t1}$, $\chi_m = A_c \cdot A_t$, $\chi_t = \rho_w$ で探索中に点①で g_{c2} に抵触した。活性な交線は点②または点③である（この例では点③が不利な組合せとする）。① $g_{H-m}(\chi) < 0$ を満たすには抵触した制約式と同じグループの g_{c1} を g_{c2} で置き換え、 $g_m(\chi) = 0$ を解くと点④が得られる。②点③で入を計算すると $\chi_m \equiv 0$ になっている。③もし g_{t1} を g_{c2} で置き換え、 $g_m(\chi) = 0$ を解くと点⑤が得られる。このときは入 $c_1 < 0$ になるので、入 $i < 0$ の制約式 g_{c1} を g_m からはずして g_{c2} 上を A_t で探索する ($\rho_w = \text{一定}$)。④この探索で g_{t1} に抵触するので、 g_{t1} を g_m に探索中の変数 A_t を χ_m に入れ、 $g_m(\chi) = 0$ を解くと点⑥が得られる。この点では入 $i < 0$ がないので、 $\chi_m \equiv 0$ が満たされる。よって以前の探索変数箱へ探索が戻り、 $g_m = g_{c2} \cdot g_{t1}$, $\chi_m = A_c \cdot A_t$ になる。

3) アルゴリズムの中心は、①等式制約 g_m での制約式の入れ換え ②探索変数 x_m と制約変数 g_m との入れ換えと共にこれと伴う探索変数の制御 である。プログラムを作成するための小道具として、①探索変数の制御を行うための“設計変数表” ② $g_m(x)=0$ を解くのを用いる Newton 法で g_m, x_m が絶えず変化するので、Jacobi 行列 $\frac{\partial g_m}{\partial x_m}$ での添字の入れ換えを行うための“添字表” ③ $g_m(x)=0$ の解が存在するようにするためになるべく不利な組合せが生じないよう \rightarrow するための“制約式・変数対応表” の三つの配列を用意する。

4) 軸方向探索を用いた場合が最も理解しやすいので、軸方向探索1回分の概要フローチャートを図10示す。 j は変数番号で設計変数表 $X(j) = -1$ なら探索変数である。入力 $\langle \rangle$ が生じたときは「対応する変数」に探索が移行するので、探索中の変数番号を $W = -j$ で記憶しておき、対応する変数での探索が終了すると $j = -W, W = 0$ で探索が元の探索変数に戻る。等式制約の数 $m (m \leq n)$ は探索能率と関係があり、交線の次元と同じでなくとも探索は可能である。交線の次元より m が小さいと交線を沿ってジグザグト進むが、方程式を解くときの次元は小さくて済む。準 Newton 法を用いて方程式を解くと Jacobian 行列の逆行列の近似行列が得られるので、次の計算は非常に簡単になる。なお $m < n$ の判定は回数を若干省略しても探索には支障をきたさない場合が多い。

4まとめ

ここでは等式制約探索法の考え方とアルゴリズムの概要を示した。現段階では検討しなければならない点が多く残っておりアルゴリズムもまだ洗練されていないが、この方法は構造物の最適設計に向いた探索法であると考えられる。またかなり自由度のある方法なので、個々の最適設計問題ごとの特徴を織り込んでいけば個々の問題向きのより簡単なアルゴリズムを作成することができる。

