I-162　等式制約法での制約式の取捨選択について

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

最適設計での制約条件は数多く存在するが，最適解で実際に効いている制約条件は比較的少数である。よって数多くの制約条件の中から実際に効いている制約条件を如何にして効率よく選び出すかが最適化問題を扱うときに最も重要なことになる。筆者らは等式制約法と称する活性でかつ有利な制約面上で最適解を探索する方法について考察を進めてきた。等式制約法では制約式$\boldsymbol{g}$と変数$\boldsymbol{x}$の中から活性でかつ有利な制約面である等式制約$\boldsymbol{g}_m$とこれに対応した制約変数$\boldsymbol{x}_m$を選んでいるが，$\boldsymbol{g}_m$と$\boldsymbol{x}_m$の取捨選択のアルゴリズムを考える上で最も難しいのが制約式に抵触した場合の処理方法である。筆者らは抵触制約式の処理方法として種々の方法を考えてきたが，ここではその一つとして双対法を参考にした$\boldsymbol{g}_m$と$\boldsymbol{x}_m$の取捨選択について考え方を示す。

2. 等式制約法と双対法

等式制約法は主問題の解法である。等式制約法と双対法では探索が終了した時点で両者共Kuhn-Tucker必要条件を満足するが，探索途中で満足している条件と探索方法が両者では異なる。探索途中では，①等式制約法は(1),(2)式を満足し，②双対法は(2),(3)式を満足している。探索に伴い$\boldsymbol{x}$と双対変数$\boldsymbol{\lambda}$が変化するが，①等式制約法では$\boldsymbol{x}$を動かしてその結果$\boldsymbol{\lambda}$が定まり，②双対法では$\boldsymbol{\lambda}$を動かしてその結果$\boldsymbol{x}$が定まる。

等式制約法では$\boldsymbol{g}_m$を選んだとき(1)式の条件が満足されるように許容できない$\lambda_i<0$（不利な制約式），$g_i>0$（抵触制約式）を除去しておく必要がある。これが制約式の取捨選択であり，その基本操作は(4)式で示される。(4)式の①は$g_i=0$で$\lambda_i<0$となった制約式を$\boldsymbol{g}_m$からはずすだけでよいが，(4)式の②にはなんらかのアルゴリズムが必要である。双対法では$g_i\neq0$の制約式（$\lambda_i=0$で$g_i<0$を除く）は探索方向ベクトル成分$\Delta\lambda_i$により$g_i=0$を目指すが，各$g_i\neq0$について$\Delta\lambda_i$による探索が行われる段階で他のλ_iの影響により$\lambda_i=\lambda_i+\Delta\lambda_i<0$となる制約式が生じ，これは$\lambda_i=0$かつ$g_i<0$となり探索から除外される。また新たに$g_i\neq0$となる制約式も生ずるが，最終的には$g_i=0$かつ$\lambda_i\geqq0$の制約式と$\lambda_i=0$かつ$g_i<0$の制約式に分かれる。

3. $\boldsymbol{g}_m$と$\boldsymbol{x}_m$の選び方

双対法では制約式の次元で探索が行われるが，等式制約法においても$g_i>0$の処理は$\boldsymbol{\lambda}$の次元で行うのが便利である。どの$g_i>0$を$\boldsymbol{g}_m$に加えれば活性な制約面になるかについては抵触の深さが問題になる。抵触の深さとは$g_i>0$のうちどのg_iを$g_i=0$にすると残りのg_iは$g_i<0$になるかであり，抵触の深さの指標としては制約面からの距離等があるが，ここでは$\sum\lambda_i g_i$を指標として取上げる。

$\boldsymbol{g}_m$, $\boldsymbol{x}_m$の選び方と$\boldsymbol{x}$の動かし方は，①ある点$\boldsymbol{x}$で$\boldsymbol{g}$, $\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}$, $\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}}$を計算　②$g_i<0$なら$\lambda_i=0$なので除き，$g_i>0$の中から(5)式の条件を満足するものを選ぶ　③選んだ$\boldsymbol{g}_m$, $\boldsymbol{x}_m$で$\boldsymbol{g}_m=\boldsymbol{0}$を解き，$\boldsymbol{g}_m$点に移行する　④$\boldsymbol{x}$のうち$\boldsymbol{x}_m$以外は探索変数$\boldsymbol{x}_\ell$であり，$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}_\ell}=\boldsymbol{0}$となるように探索する。$\sum\lambda_i g_i$は(6)式に示すように$\Delta f$であり，$\lambda_i>0$，$g_i>0$とすると$\Delta f_i>0$である。$\min f$を実行することにより抵触する制約式について$g_i>0$を解消するには$f_i$の増加が必要である。このような制約式について活性でない制約式を$\boldsymbol{g}_m$に選ぶとまだ$g_i>0$が残っており，これを$g_i=0$にすれば$\sum\lambda_i g_i(\Delta f)$は増加するが，活性な制約面になれば$\sum\lambda_i g_i$の増加は期待できない。よって$\max\sum\lambda_i g_i$とすることにより活性な制約面上に出ることができるとしたのが上記手順の考え方である。なお最大値制限のような$g_i>$

$$\left.\begin{array}{l} g_i=0 \text{ なら } \lambda_i\geqq 0 \\ \lambda_i=0 \text{ なら } g_i<0 \end{array}\right\} \cdots\cdots (1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}_m}=\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}_m}+\boldsymbol{\lambda}^T\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}_m}=\boldsymbol{0}\cdots(2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}_\ell}=\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}_\ell}+\boldsymbol{\lambda}^T\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}_\ell}=\boldsymbol{0}\cdots(3)$$

$$\left.\begin{array}{l} \text{①} g_i=0 \text{ で } \lambda_i<0 \text{ の制約式を } \boldsymbol{g}_m \text{ から} \\ \quad \text{はずすと } \lambda_i=0 \text{ で } g_i<0 \text{ になる} \\ \text{②} \lambda_i=0 \text{ で } g_i>0 \text{ の制約式を } \boldsymbol{g}_m \text{ に} \\ \quad \text{加えると } g_i=0 \text{ で } \lambda_i>0 \text{ になる} \end{array}\right\}(4)$$

0を解消するとfが減少する制約式に抵触している場合には(5)式だけでは$g_i>0$を解消できないことがあり，この場合は$g_i>0$の解消に$\frac{\partial L}{\partial x_l}=0$すなわち$x_l$による探索が必要である。また上記手順の$g_m$, x_mの選び方は線形近似による近似解を求めているものなので，g_m点に移行したとき$g_i>0$，$\lambda_i<0$が残っていることもあり，この場合は再び上記手順を反復する。

$$\left.\begin{array}{ll} \frac{\partial g_m}{\partial x_m}\text{の det.}=0 & (\text{条件1}) \\ \lambda_m \geq 0 & (\text{条件2}) \\ \max \sum_i^m \lambda_i g_i & (\text{条件3}) \\ \lambda_m^T \frac{\partial g_m}{\partial x_m} = -\frac{\partial f}{\partial x_m} & (\text{計算式}) \end{array}\right\} \quad (5)$$

4. Simplex法の応用

(5)式のうち条件1はλ_mが定まるための前提条件であり，λ_mが求まることはx_mも定まることを意味している。よって残りの3個の式からλ_mを定めることになるが，x_m, λ_mをx, λに拡張して式を整理すると(7)式になる。(7)式はλについて線形であり，線形計画問題とみなすことができる。(7)式にsimplex法を適用するには(7)式第2行にslack変数を加え基準型に変換しなければならない。(7)式第2行には不等号$\gtreqless$があるためslack変数は非負条件の付いた2個の変数の差$\lambda_{j+}-\lambda_{j-}$として表わされる。slack変数の係数1または-1は最小値制限または最大値制限を加えたのと同じ作用があり，最大値制限では無限解が生ずる場合がある。このためsimplex法を適用するとき若干の工夫が必要であり，例えば本来の制約式からλを定めていき最後にslack変数が残るようにする。なおsimplex法では係数行列は常に基底形式になっており，λ_mは基底変数なので条件1の$\frac{\partial g_m}{\partial x_m}$のdet.=0は成立している。simplex法によりλ_mを定めたとき係数行列のλ_mに対応したx_j行が制約変数x_mであり，残りのx_j行が探索変数x_lである。slack変数は(8)式で表わされ$\frac{\partial L}{\partial x_j}$は探索方向を示す。

$$\left.\begin{array}{l} \lambda^T g = -\frac{\partial f}{\partial x}\left(\frac{\partial g^T}{\partial x}\right)^{-1} g \\ \quad = \frac{\partial f^T}{\partial x}\Delta x = \Delta f \end{array}\right\} \cdots (6)$$

$$\left.\begin{array}{ll} \max\limits_{\lambda} & \lambda^T g \\ \text{subj. to} & -\lambda^T \frac{\partial g}{\partial x} \gtreqless \frac{\partial f}{\partial x} \\ & \lambda \geq 0 \end{array}\right\} (7)$$

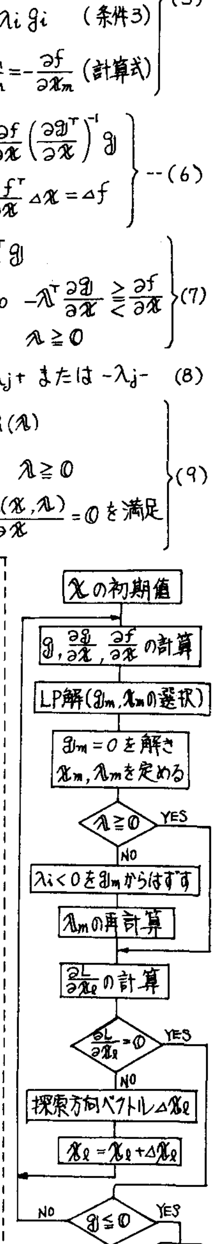
$$\frac{\partial L}{\partial x_j} = +\lambda_{j+} \text{ または } -\lambda_{j-} \quad (8)$$

$$\left.\begin{array}{ll} \max\limits_{\lambda} & h(\lambda) \\ \text{subj. to} & \lambda \geq 0 \\ x\text{は} & \frac{\partial L(x,\lambda)}{\partial x} = 0 \text{ を満足} \end{array}\right\} (9)$$

5. LP解利用の等式制約法

等式制約法でのg_m, x_mの選択にsimplex法を応用することを述べたが，得られたLP解(選択したg_m, x_m)を用いてx_lにより探索を行うと最適解に到達できるかどうかは次のように考える。①λを定めるときxを固定しているのでこの段階ではfは定数であり，max $\lambda^T g$はmax$(f+\lambda^T g)$= max $h(\lambda)$と書き直せる　②$\frac{\partial L}{\partial x_m}=0$が成立するように$\lambda \geq 0$を定めている　③$g_m$点に移行することにより$g_m=0$が成立し，残りの制約式は$\lambda_i=0$で$g_i<0$であり，これはmax $h(\lambda)$を意味する　④よって制約変数x_mの次元で(9)式の双対問題を解いていることになる　⑤次にx_lの探索により$\frac{\partial L}{\partial x_l}=0$が成立すると上記②と合わせて$\frac{\partial L}{\partial x}=0$であり，(9)式の解が得られる。

LP解を利用した等式制約法の概要フローチャートの一例を右図に示す。LP解とx_lの探索により活性でかつ有利な制約面が得られるので，探索途中の解が活性でかつ有利な制約面に常に乗っていることにこだわらなければフローチャートに示した$g \leqq 0$及び$\lambda \geqq 0$の判定は基本的には必要ないと考えられる。



6. まとめ

実際に効いている制約式を取捨選択するための一方法としてg_m, λ_mの選択がLP解として得られる方法を示したが，この方法には次の特色がある。①simplex法を応用するのでg_m, λ_mの選択に関するアルゴリズムが明確である。②設計変数の次元とは関係なく多数の抵触制約式を同時に処理できる　③活性でかつ有利な制約面上を探索できるので，探索途中の解は設計上有用な解である　④双対法の考え方を利用しているがxを動かしてその結果としてλを定めており，この点が双対法とは異なる　⑤g_m, λ_mの選択にのみLPを用いて非線形のf，gについて探索を行っており，この点がSLPとは異なる