I-511　異なった制約面と共役性

群馬高専　正員　平田恭久

１．はじめに

縮小勾配を用いる最適化手法での最小化に共役方向法，準Newton法（共役方向法等と略す）を適用すると、探索過程で、①独立変数と従属変数の入れ換え，②活性な制約式が異なってくること，によりそれまでに蓄積した情報が使えなくなり、新たに共役方向法等を開始しなければならないという不便を生ずる。上記①の変数の区分が異なることについては、著者はすでに縮小勾配を活性な制約面上の最急勾配に変換することで解決ずみであるが、上記②は非常に難しい問題のため未解決のまま残されている。ここでは、制約式が異なる場合に共役方向法等を適用するための手掛かりをつかむ目的で行った考察結果を報告する。

２．共役性

１）座標$\mathbf{x}$の変化を $d\mathbf{x}$，制約面上の目的関数fの２階微分である Hesse行列をＧとすると、共役性は式(1)で表される。目的関数が２次式で線形制約式なら、fも２次式でＧは定数になる。式(1)の $d\mathbf{x}_j{}^T G$またはG$d\mathbf{x}_k$は２階微分に $d\mathbf{x}$を掛けるので、式(2)のように勾配の変化になり、式(2)を式(1)に代入すると式(3)になる。

式(3)でｋ＜ｊのケースを取り上げてｊ＝ｋ＋１とすると、$\mathbf{x}_{k+1}$ 点が $d\mathbf{x}_k$ 方向のラインサーチ最小点なら式(3)左辺第２項は式(4)になり、式(4)と式(3)から式(3)左辺第１項も０になる。よってｋ＜ｊのケースでは方向ベクトル $d\mathbf{x}_k$ と勾配∇f_j との直交性の式(5)が得られる。

ｋ＞ｊのケースではｊ＝ｋ－１とすると式(3)左辺第１項は式(6)左辺になり、∇f_k に直交するような探索方向は無意味なので、一般に≠０になる。式(6)と式(3)より式(3)左辺第２項も≠０になり、式(7)が得られる。

２）共役方向法では式(1)の共役性を用いて式(8)の共役方向$\mathbf{p}_k$ を導いている。準Newton法での近似行列更新公式の誘導にも共役性が用いられており、準Newton法ＤＦＰ公式について探索方向$\mathbf{p}_{Dk}$を導くと式(9)になり、共役方向$\mathbf{p}_k$ のスカラー倍になっている。ラインサーチ最小点のステップ幅をα_k とすると、共役方向法等では $d\mathbf{x}_k$ は式(10)になり、共役方向法はδ_k＝１に相当する。

$$d\mathbf{x}_j{}^T G d\mathbf{x}_k = 0,\ (k \neq j) \quad \cdots\cdots (1)$$

$$d\mathbf{x}_j{}^T G = d\nabla f_j{}^T = \nabla f_{j+1}{}^T - \nabla f_j{}^T \quad \cdots (2)$$

$$\nabla f_{j+1}{}^T d\mathbf{x}_k - \nabla f_j{}^T d\mathbf{x}_k = 0\ ,(k \neq j) \quad \cdots\cdots (3)$$

$$\nabla f_{k+1}{}^T d\mathbf{x}_k = 0 \quad \cdots\cdots (4)$$

$$\nabla f_j{}^T d\mathbf{x}_k = 0,\ (k<j) \quad \cdots\cdots (5)$$

$$\nabla f_k{}^T d\mathbf{x}_k \neq 0 \quad \cdots\cdots (6)$$

$$\nabla f_{j+1}{}^T d\mathbf{x}_k = \nabla f_j{}^T d\mathbf{x}_k \neq 0\ ,(k>j) \quad \cdots\cdots (7)$$

$$\left.\begin{array}{l} \mathbf{p}_k = -\nabla f_k + b_k \mathbf{p}_{k-1} \\ b_k = \nabla f_k{}^T \nabla f_k / \nabla f_{k-1}{}^T \nabla f_{k-1} \end{array}\right\} \quad (8)$$

$$\left.\begin{array}{l} \mathbf{p}_{Dk} = \delta_k \mathbf{p}_k \\ \delta_k = \dfrac{1}{\nabla f_k{}^T \nabla f_k} \Big/ \displaystyle\sum_{i=0}^{k} \dfrac{1}{\nabla f_i{}^T \nabla f_i} \end{array}\right\} \quad (9)$$

$$d\mathbf{x}_k = \alpha_k \delta_k \mathbf{p}_k \quad \cdots\cdots (10)$$

$$\alpha_k \delta_k \left(-\nabla f_j{}^T \nabla f_k + b_k \nabla f_j{}^T \mathbf{p}_{k-1}\right) = 0,\ (k<j) \quad \cdots\cdots (11)$$

$$\nabla f_j{}^T \nabla f_k = 0,\ (k \neq j) \quad \cdots\cdots (12)$$

$$\left.\begin{array}{l} \nabla f_k{}^T(-\nabla f_k + b_k \mathbf{p}_{k-1}) \\ = \nabla f_{k-1}{}^T(-\nabla f_k + b_k \mathbf{p}_{k-1}) \end{array}\right\} \quad \cdots (13)$$

$$-\nabla f_k{}^T \nabla f_k - \nabla f_{k-1}{}^T b_k \mathbf{p}_{k-1} = 0 \quad \cdots\cdots (14)$$

$$\nabla f_{k-1}{}^T d\mathbf{x}_k = -\nabla f_k{}^T \nabla f_k \alpha_k \delta_k \quad \cdots (15)$$

$$\nabla f_k{}^T d\mathbf{x}_k = \nabla f_{k-1}{}^T d\mathbf{x}_k = \cdots\cdots = \nabla f_0{}^T d\mathbf{x}_k = -\nabla f_k{}^T \nabla f_k \alpha_k \delta_k \quad \cdots (16)$$

共役方向法等では探索方向が式(8)$\mathbf{p}_k$，式(10) $d\mathbf{x}_k$ で表されることを利用して式(5)，式(7)を変形する。ｋ＜ｊのケースの式(5)を式(8)，式(10)で変形すると式(11)になり、式(11)の（　）内第２項は式(5)より０なので第１項も０である。第１項＝０はｊとｋを入れ換えても同じなので式(12)が得られ、式(12)は勾配∇fで表した直交性である。

ｋ＞ｊのケースの式(7)を式(8)，式(10)で変形し、ｋ＝ｊ＋１とすると式(13)になる。式(13)は直交性より式(14)になり、これを式(8)，式(10)，式(12)で変形すると式(15)が得られる。式(7)はすべてのｋ＞ｊについて成立するので

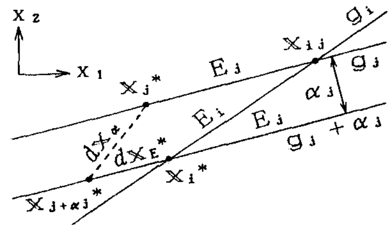
、式⒂と式⑺を対比することにより式⒃が得られる。以上により式⑴の共役性と式⑻の共役方向から、式⑿の直交性と式⒃の等価性（仮称）が導かれた。

３． 異なった制約面

１）同一制約面上を式⑻の共役方向で探索すると共役性は成立しているが、探索途中で活性な制約面が異なったものになると、式⑻をそのまま適用したのでは共役性が成立しなくなる。よって新たな制約面に対し共役方向法を再出発しなければならない。

この不便を改善するには以前に蓄積した情報をなんらかの手段で修正し、新たな制約面上で共役性を成立させる必要がある。このためには、①新旧制約面の差異の表現方法，②蓄積した情報の修正方法，③上記①，②を組み合わせたときの共役性の実現方法，について検討する必要がある。

検討のための探索例として、目的関数が２次式で線形制約式、変数の個数ｎ＝３または４，活性な制約式の個数ｍ＝１，探索変数の個数ｓ＝２または３を用い、探索途中で活性な制約面が異なるようにした。この探索例ではＧが定数なので、同一制約面上なら共役方向法等はｓ回のラインサーチで最適解に到達する。



図－１　最適解の移動量

$$d\mathrm{x}^* = \mathrm{x}_j^* - \mathrm{x}_i^* = d\mathrm{x}_E^* + d\mathrm{x}_\alpha \qquad (17)$$

$$\left.\begin{aligned} d_s &= (I_s + EE^T)^{-1}(\nabla_s f + E\nabla_m f) \\ d_m &= E^T d_s \end{aligned}\right\} \qquad \cdots\cdots (18)$$

$$E = -\nabla_s g_m^T (\nabla_m g_m^T)^{-1} \qquad \cdots\cdots (19)$$

$$\left.\begin{aligned} \Delta g_j &= \nabla g_j^T \Delta \mathrm{x} = -\alpha_j \\ &= g_j - (g_j + \alpha_j) \end{aligned}\right\} \qquad \cdots (20)$$

２）異なった制約面での探索を図－１で説明する。g_i上を探索中にx_{ij}でg_jに抵触し、新たな制約面g_j上を探索して最適解x_j^*に到達するが、以前の制約面g_i上の最適解x_i^*からの移動量 $d\mathrm{x}^*$は式⒄になる。x_i^*を通るようにg_jを平行移動したのが$g_{j+\alpha j}$であり、x_i^*ではg_i上の勾配＝０であるが、$g_{j+\alpha j}$上ではＥが異なるため勾配≠０になり、これによる最適解の移動量が$d\mathrm{x}_E^*$である。$g_{j+\alpha j}$上の最適解$\mathrm{x}_{j+\alpha j}^*$から$\mathrm{x}_j^*$への移動量が $d\mathrm{x}_\alpha$ であり、異なった制約面での最適解の移動量は、①Ｅ差と②α_j 差で構成される。

制約面上の目的関数fが２次式なら勾配∇fは線形であり、Ｇが定数となるのでxの変化による勾配差Ｇ $d\mathrm{x}$は $d\mathrm{x}$に比例する。g_j と平行移動の$g_{j+\alpha j}$との等勾配点を結ぶベクトル $d\mathrm{x}_\alpha$ は常に一定なので、両制約面の勾配、座標は平行移動したものが対応している。よってg_j 上の探索経路を $d\mathrm{x}_\alpha$ だけ平行移動したものが$g_{j+\alpha j}$上の探索経路になり、両者で共役性が成立する。これに対しＥ差があると、g_i 上とg_j 上の等勾配点を結ぶベクトルは場所ごとに変化するので、探索経路を例えば勾配で対応させると座標($d\mathrm{x}$) が対応しなくなる。よって勾配または座標で対応させたg_j 上の探索経路では共役性が成立しなくなる。

３）共役性の実現へ結び付けるために最初に取り上げた工夫は、以前の制約面での探索経路（ラインサーチ出発点の座標，勾配，方向ベクトル）を新たな制約面上へ射影する方法である。探索変数と制約変数の区別をしたときのＥ上への射影変換は式⒅で行う。Ｅは制約面の傾きを示すもので式⒆になり、I_s はｓ次元の単位行列である。座標，勾配，方向ベクトルの探索変数部分を$\nabla_s f$，制約変数部分を$\nabla_m f$とし，射影変換後のそれぞれはd_s，d_mになる。勾配，方向ベクトルの射影は式⒅だけでよいが、座標の射影には制約式の定数項部分(α_j)の補正が必要になり、式⒇の$\Delta\mathrm{x}$がこの補正量に相当している。

探索例を調べてみると新たな制約面上への射影では成立に近い値になるが、共役性が成立していないことが分かる。射影変換だけでは新たな制約面での共役方向は算出できないので、異なった制約面での最適解の移動量及び制約面上の勾配と射影変換との組み合わせを検討したが、まだ成果は得られていない。

５． まとめ

制約面が異なった場合にも共役方向法等が適用できるように考察を続けてきたが、共役性での式誘導と異なった制約面の特性について適用での手掛かりとなるような成果が得られた。しかしながら、この両者を組み合わせて異なった制約面で共役方向が算出できるようにする当初の目的は未解決のままである。