

1. まえがき

等式制約法ではある探索方向について、シンプレックス・タブローを用いて活性な制約面に沿ったラインサーチを目的関数で行っておる。シンプレックス・タブローは探索方向算出点での目的関数 f , 制約式 g の勾配で作成され、このタブローがラインサーチに利用されているため、タブロー作成点から離れた点では目的関数、制約式の非線形性の影響を受けることになる。この点に関しては *penalty function* を用いた通常の最適化手法でのラインサーチでも同様である。非線形性の影響により特に制約面の勾配が実態と合わなくなったり、これに基き計算効率が著しく低下してくる。本論文ではこの点に着目し、等式制約法でのラインサーチの仕組みを説明した後にラインサーチの工夫について考察を加えたものである。

2. ラインサーチの仕組み

等式制約法でのラインサーチを図-2に示すが、タブローでどのように計算するかを図-1の掃き出し後のタブローと対比させて説明する。

図-2の点①で ∇f , ∇g , f , g を計算し、掃き出し前のタブローを作成する。活性な制約面を得るよう掃き出すと、掃き出し後のタブローになり、 $d\mathbf{x}_{mg}$ が得られて $\mathbf{x} = \mathbf{x} + d\mathbf{x}_{mg}$ で点②になる。探索方向 $d\mathbf{x}_s$ で進むとき、 $g_m = 0$ に沿うようにするには $d\mathbf{x}_{ms}$ が必要になる。

これを掃き出し後のタブローで実行するには x_s 行に $d\mathbf{x}_s$ を乗じて \mathbf{g} 行に加えればよい。 $\mathbf{x} = \mathbf{x} + [\mathbf{d}\mathbf{x}_s, \mathbf{d}\mathbf{x}_{ms}]^T$ に変化して点⑧になるが、 \mathbf{g}_m の非線形性のため $\mathbf{g}_m \neq \mathbf{0}$ になっている。

計算量を節約するため、 ∇f , ∇g は点①と同じとして ∇f , ∇g の再計算を省略すると、掃き出し後のタブローがそのまま使用できる。点③で g を計算して $g_m = 0$ となるようタブローを修正するには x_m 行に g_m を乗じたものを g 行から引くと、 g 行 $d\chi_m$ 列に $d\chi_{mg}$ が得られる。 g_{r-m} については $-g_r < 0$ が生じているかを調べ、もし生じていれば $-g_r$ を掃き出しが、これからも $d\chi_{mg}$ が得られる。 $x = x + d\chi_m$ に変化して点④に移行する。点④での x で f を計算すると、点②から点④に進むときの f が計算できる。以上が等式制約法でのラインサーチの仕組みであり、これに黄金分割等のラインサーチのアルゴリズムを組み込めばよい。

3. 非線形性の影響

g の非線形性が強くなればラインサーチ方向上の各点(図-2の点⑧)での g の計算は1回のみとし、 $g_m \neq 0$ に基く $d_{\times mg}$ を反復して求めなくても精度的に十分である。ラインサーチ最小点に近づくにつれ $g_m = 0$ 上の f に近い値が求められる。非線形性が強いと g 計算点のD, Eがタブロー作成でのD, Eから大幅に変化し、これに伴いタブローでの $d_{\times mg}^T = g_m^T D$, $d_{\times ms}^T = d_{\times s}^T E$ が実態から離れてくる。このため各点での g の計算が1回のみでは $g_m = 0$ に対する追隨が悪くなり、ラインサーチ最小点の精度が低下する。タブロー作成点から離れた点でマ f , マ g を計算してタブローを更新すればこの問題点は解決できるが、これでは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ないD, Eを補正する方法が必要になる。

| f | \mathbf{g}_m | \mathbf{g}_{r-m} | $d\mathbf{x}_m$ | $d\mathbf{x}_s$ |
|--|------------------|----------------------------|---------------------------------------|------------------|
| $f + \Delta f$ | $\mathbf{0}_m^T$ | $-\mathbf{g}_{r-m}^{T'} T$ | $d\mathbf{x}_m^T$ | $\mathbf{0}_s^T$ |
| \mathbf{A}_m | \mathbf{I}_m | \mathbf{B} | \mathbf{D} | $\mathbf{0}$ |
| $\nabla_s L$ | 0 | \mathbf{C} | \mathbf{E} | \mathbf{I}_s |
| $-\mathbf{g}_{r-m}^{T'} T = -\{\mathbf{g}_{r-m}^T - \mathbf{g}_m^T (\nabla_m \mathbf{g}_m^T)^{-1} \nabla_m \mathbf{g}_{r-m}^T\}$ | | | | |
| $D = -(\nabla_m \mathbf{g}_m^T)^{-1}$ | | | $d\mathbf{x}_m^T = \mathbf{g}_m^T D$ | |
| $E = -\nabla_s \mathbf{g}_m^T (\nabla_m \mathbf{g}_m^T)^{-1}$ | | | $d\mathbf{x}_m^T = d\mathbf{x}_s^T E$ | |

図-1 掃き出し後のタブロー

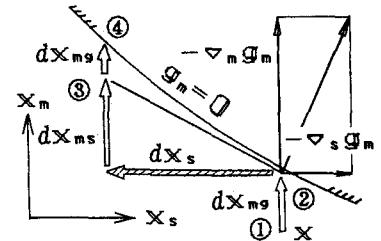


図-2 ラインサーチの仕組み

4. Eに関する補正

$E = -\nabla_s \mathbf{g}_m^T (\nabla_m \mathbf{g}_m^T)^{-1}$ は制約面に沿って進むための探索変数 \mathbf{x}_s に対する制約変数 \mathbf{x}_m の割合を示している。 $\nabla \mathbf{g}_m$ が変化すれば E も変化してくるので、タブロー作成点での E のままで制約面からの離れが大きくなる。ラインサーチ方向 ($d\mathbf{x}_s$ 方向) での E の変化そのものを補正することはできないので、式(1)の代わりに各制約変数ごとの係数 e_j を式(2)で定義して、 e_j を補正していくことにする。式(3)で e_j を補正するが、補正の概要を図-3に示す。 \mathbf{x}_s 方向は絶対値 $\|d\mathbf{x}_s\|$ で表し \mathbf{x}_m 方向は各 \mathbf{x}_{mj} で表してある。 $\|d\mathbf{x}_s\|$ に対する \mathbf{x}_{mj} の変化を2次式と仮定すると式(3)の $\alpha = 2$ になり、 e_{jk+1} が算出できる。

図-3は同一の制約面についての補正であったが、ラインサーチの途中で活性な制約面が \mathbf{g}_m^0 から \mathbf{g}_m^1 に移行した場合は図-4のように処理する。 \mathbf{x}_{jk+1}' 点で活性な制約面が \mathbf{g}_m^0 になったとすると、 \mathbf{x}_k 点でのタブローはそのまま残っているので、 \mathbf{g}_m^0 を掃き出して $\mathbf{g}_m^0 = \mathbf{0}$ に近づく $d\mathbf{x}_{mgjk}$ を求めることができる。 $d\mathbf{x}_{mgjk}^0$ は図-4より式(4)になり、これを式(3)の $d\mathbf{x}_{mgjk}$ の代わりに代入すれば制約面が異なる場合の e_{jk+1} が算出できる。

5. Dに関する補正

Dに関する補正もEと同様に扱うことにして、図-5で説明する。Dはタブロー作成点での値なので、 \mathbf{x}_{k+1}' 点の $\Delta \mathbf{g}_m$ について式(5)で算出した $d\mathbf{x}_{mg}$ では $\mathbf{g}_m = \mathbf{0}$ を近似的に満足することができない。よって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(6)で定める。式(6) d_j は \mathbf{x}_{k+1}' 点の近傍で適用できるとするが、 $\Delta \mathbf{g}_m$ に依存する値なので、他の $\Delta \mathbf{g}_m$ に対する適合性に若干の問題がある。この d_j を式(5)の $d\mathbf{x}_{mgj}$ に掛けることにより、 $d\mathbf{x}_{mgj}$ の補正を行う。 $\|d\mathbf{x}_s\|$ が小さくなると近傍での補正の連続になるので、正しい値に収束するようになり、これはEに関する補正でも同様である。よってラインサーチで E_j 、 d_j に基づく補正を続けていくことにより、真の解へ到達できると考えられる。

6. まとめ

非線形性が強い場合にラインサーチでの精度をいかに維持するかの観点から、等式制約法でのラインサーチについて考察を行った。制約面の勾配 $\nabla \mathbf{g}$ の変化に追隨するための工夫として、Eに関する補正とDに関する補正を扱った。計算例での結果からすると、正しい E 、Dから得られる $d\mathbf{x}_{ms}$ 、 $d\mathbf{x}_{mg}$ に近づけることには無理があるが、正しいラインサーチ最小点への収束ではかなりの効果が得られている。しかしながら、係数 e_j 、 d_j の算出方法には改良の余地が残されており、今後の検討が必要である。

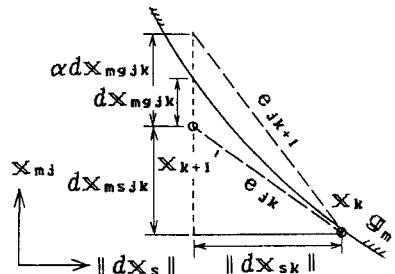


図-3 Eに関する補正

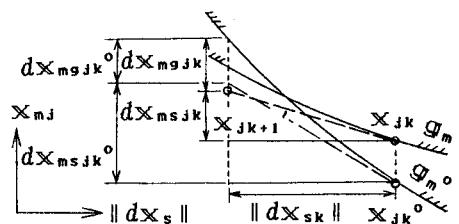


図-4 制約面が異なる場合

$$d\mathbf{x}_{ms} = E^T d\mathbf{x}_s \quad \dots \dots \dots (1)$$

$$d\mathbf{x}_{msj} = e_j \|d\mathbf{x}_s\| \quad \dots \dots \dots (2)$$

$$e_{jk+1} = (d\mathbf{x}_{msjk} + \alpha d\mathbf{x}_{mgjk}) / \|d\mathbf{x}_{sk}\| \quad \dots \dots \dots (3)$$

$$d\mathbf{x}_{mgjk}^0 = d\mathbf{x}_{mgjk} + (d\mathbf{x}_{msjk} - d\mathbf{x}_{msjk}^0) + (\mathbf{x}_{jk} - \mathbf{x}_{jk}^0) \quad \dots \dots \dots (4)$$

$$d\mathbf{x}_{mg} = D^T \Delta \mathbf{g}_m \quad \dots \dots \dots (5)$$

$$d_j = (d\mathbf{x}_{mgj} \text{ ①} + d\mathbf{x}_{mgj} \text{ ②}) / d\mathbf{x}_{mgj} \text{ ①} \quad \dots \dots \dots (6)$$

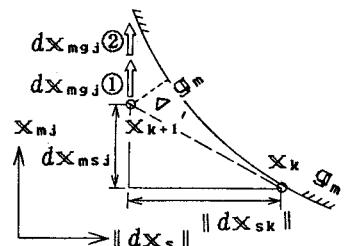


図-5 Dに関する補正