

I-A157 線形制約付き 2 次関数の最適解

群馬高専 正員 平田恭久

1. まえがき

最適化問題の最も簡単な形は線形制約付き 2 次関数である。活性な線形制約式で制約変数を消去して、探索変数のみとした活性制約面上での目的関数は同じ 2 次関数となる。2 次関数では 2 階微分である Hesse 行列は定数となり、ある点での勾配を用いて最小点は求まる。著者は以前から、活性制約面の変化が最適解に与える影響について考察を続けてきたが、活性制約面がある境界で異なってきたときの最適解の移動量を、線形制約付き 2 次関数で表すことが可能かについて検討を行った。通常最適化問題は非線形制約付きの高次の関数であるが、これは線形制約付き 2 次関数の近似とみなせる場合が多いので、ここで得た知見を適用することが可能である。

2. 線形制約付き 2 次関数

1) 定式化 線形制約付き 2 次関数の最小 $\min f(\mathbf{x}) = \mathbf{a} + \mathbf{C}^T \mathbf{x} + 1/2 \mathbf{x}^T \mathbf{G} \mathbf{x}$
 化問題について活性制約式 $\mathbf{g}_m$ が得られたとすると $\text{subject to } \mathbf{g}_m(\mathbf{x}) = \nabla \mathbf{g}_m \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ } …… (1)

式(1)のように表される。変数 $\mathbf{x}$ が探索変数 $\mathbf{x}_s$ と制約変数 $\mathbf{x}_m$ に区分できると、目的関数 f の Hesse 行列 $\mathbf{G}$ の内容は式(2)に、係数 $\mathbf{C}$ の内容は式(3)になる。

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{ss} & \mathbf{G}_{sm} \\ \mathbf{G}_{ms} & \mathbf{G}_{mm} \end{bmatrix} \dots (2) \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_s \\ \mathbf{C}_m \end{bmatrix} \dots (3)$$

$\mathbf{g}_m$ に関係した諸量として式(4)D、式(5)Eがあり、 $\mathbf{D} = -(\nabla_m \mathbf{g}_m^T)^{-1}$ …… (4)

これを用いて $\mathbf{x}_m$ は式(6)により $\mathbf{x}_s$ で表すことがで $\mathbf{E} = \nabla_s \mathbf{g}_m^T (\nabla_m \mathbf{g}_m^T)^{-1}$ …… (5)

きる。式(6)を用いて式(1)の f を $\mathbf{x}_s$ で表すと式(7)が $\mathbf{x}_m = \mathbf{E}^T \mathbf{x}_s - \mathbf{D}^T \mathbf{b}$ …… (6)

得られ、これが線形制約付き 2 次関数の定式 $\min f(\mathbf{x}_s) = \mathbf{a}_{sL} + \mathbf{C}_{sL}^T \mathbf{x}_s + 1/2 \mathbf{x}_s^T \mathbf{G}_{sL} \mathbf{x}_s$
 化である。 $\mathbf{a}_{sL} = \mathbf{a} - (\mathbf{C}_m^T - 1/2 \mathbf{b}^T \mathbf{D} + \mathbf{G}_{mm}) \mathbf{D}^T \mathbf{b}$ } (7)

2) 縮小勾配と最適解 式(7)は活性 $\mathbf{C}_{sL} = \mathbf{C}_s + \mathbf{E} \cdot \mathbf{C}_m - (\mathbf{G}_{sm} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{G}_{mm}) \mathbf{D}^T \mathbf{b}$
 制約式を取り込んで探索変数で表した目的関 $\mathbf{G}_{sL} = \mathbf{G}_{ss} + \mathbf{G}_{sm} \cdot \mathbf{E}^T + \mathbf{E} \cdot \mathbf{G}_{ms} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{G}_{mm} \cdot \mathbf{E}^T$
 数なので、Lagrange 関数に相当している。式(7)を微分すると $\nabla_{sL} = \mathbf{C}_{sL} + \mathbf{G}_{sL} \cdot \mathbf{x}_s$ …… (8)

式(8)が得られ、 ∇_{sL} は探索変数で表した目的関数の制約面上 $\mathbf{x}_s^* = -\mathbf{G}_{sL}^{-1} \mathbf{C}_{sL}$ …… (9)

での勾配であり、縮小勾配と呼ばれている。最小点は式(8)で $\nabla_{sL}' = \mathbf{C}_{sL} + \mathbf{G}_{sL} \cdot \mathbf{x}_s'$ …… (10)

$\nabla_{sL} = 0$ のときであり、これより式(9)の $\mathbf{x}_s^*$ が得られるが、 $d\nabla_{sL} = \nabla_{sL}' - \nabla_{sL}$
 $\mathbf{C}_{sL}$ 、 $\mathbf{G}_{sL}$ は定数である。任意の $\mathbf{x}_s'$ 点での縮小勾配は式(10) $= \mathbf{G}_{sL}(\mathbf{x}_s' - \mathbf{x}_s) = \mathbf{G}_{sL} \cdot d\mathbf{x}_s$ } (11)

になり、式(10)から式(8)を引くことにより任意の 2 点間の縮小 $\mathbf{x}_s^* - \mathbf{x}_s^*$
 勾配差 $d\nabla_{sL}$ は式(11)になる。式(11)を導く過程では $\mathbf{C}_{sL}$ 、 $\mathbf{G}_{sL}$ $= -\mathbf{G}_{sL}^{-1}(\mathbf{G}_{sm} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{G}_{mm}) \mathbf{D}^T \mathbf{b}$ } (12)

が定数であることを用いている。式(1)の線形制約式では定数項 $= \mathbf{b}$ としているが、定数項 $= 0$ での最適解との差を求めると式(12)になり、定数項による最適解の移動量を表している。

3. 制約面の境界

1) f 等高線と制約面の傾き g_1 上で最適解 $\mathbf{x}_s^*$ を探索してきたとき、 $\mathbf{x}$ 点で g_2 に抵触してその後は g_2 上で最適解 $\mathbf{x}_s^*$ を探索することになる。ここでは $\mathbf{x}$ 点を制約面の境界と称しているが、活性制約面が g_1 から g_2 へ移ったときの最適解の移動を図示したのが図-1 である。 f 等高線と制約面の傾きが最適解

の移動に関係していることが分かる。

2) 縮小勾配差 制約面が異なることによる最適解の移動量 $d\mathbf{x}_s^*$ を考えたときの指標となるのが、制約面の境界での縮小勾配差である。式(11)の $d\nabla_{sL}$ は同一制約面上での2点間の縮小勾配差であったが、境界での縮小勾配差は制約面の傾きである式(5)Eに基づくものである。式(8) ∇_{sL} に式(7)で示した $\mathbf{C}_{sL}$ 、 $\mathbf{G}_{sL}$ を代入すると式(13)が得られるが、 ∇_{sF} は f についての $\mathbf{x}_s$ による微分、 ∇_{mF} は $\mathbf{x}_m$

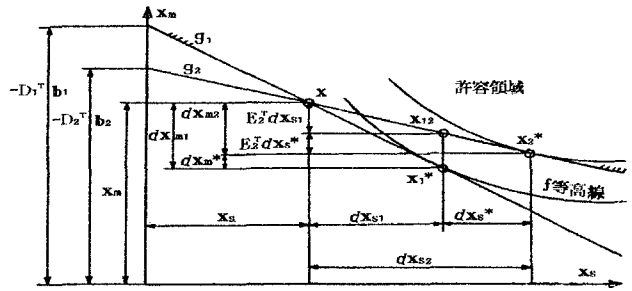


図-1 制約面と最適解の関係

による微分である。 $\mathbf{x}_2^*$ と $\mathbf{x}$ 点との縮小勾配差は式(14)であり、 $\mathbf{x}_1^*$ と $\mathbf{x}$ 点との縮小勾配差は式(15)になる。式(14)から式(15)を引くことにより式(16)が得られ、これが制約面の境界での縮小勾配差を表す。

4. 最適解の移動量

1) $d\mathbf{x}_s^*$ 、 $d\mathbf{x}_m^*$ の表現

制約面の境界での縮小勾配差である式(16)に式(7)で示した $\mathbf{G}_{sL}$ を代入して整理すると式(17)が得られる。最適解の移動量 $d\mathbf{x}^*$ のうち、 $\mathbf{x}_s$ 成分が $d\mathbf{x}_s^*$ 、 $\mathbf{x}_m$ 成分が $d\mathbf{x}_m^*$ である。 $\mathbf{x}_{s1}^*$ での ∇f の $\mathbf{x}_m$ 成分が ∇_{mF1} であり、式(17)は式(16)と対応した形になっている。 $d\mathbf{x}_s^*$ の別の表現として式(18)があり、 $\mathbf{x}_1^*$ と $\mathbf{x}_s$ 成分は同じにした g_2 上の $\mathbf{x}_{12}$ 点での縮小勾配が ∇_{sL12} である。図-1に $d\mathbf{x}_s^*$ 、 $d\mathbf{x}_m^*$ が図示されているが、 $d\mathbf{x}_m^*$ は式(19)で表される。

2) 制約式交換との関連

制約面の境界で活性制約式の一部(m 個のうち p 個)が入れ換わると、活性制約式集合 $\mathbf{g}_m$ が $\mathbf{g}_m'$ へと移行する。制約変数 $\mathbf{x}_m$ の入れ換えがないとすると、これは制約式交換と称するものになる。著者は制約式交換についてすでに考察を行っているが、制約式交換での関係式が最適解の移動量に関連してくる。式(20)は式(5)E、式(21)は式(13) ∇_{sL} についての関係式であり、式(20)、式(21)を用いて制約面の境界での縮小勾配差が式(22)のように導ける。式(20)で $\nabla_s \mathbf{g}_{r-m}$ は活性でない制約式の $\mathbf{x}_s$ についての微分であり、式(21)の λ_{mp}' は入れ換えた p 個の制約式に関するLagrange乗数である。

5. まとめ

- 1) 最も扱いやすい最適化問題である線形制約付き2次関数を定式化し、縮小勾配と最適解の式を導いた。
- 2) 制約面が異なることによる最適解の移動量の指標となる制約面の境界での縮小勾配差の式を導いた。
- 3) この縮小勾配差の式を基にして最適解の移動量が何に依存しているかを明確にするため、最適解の移動量を $d\mathbf{x}_s^*$ 、 $d\mathbf{x}_m^*$ で表現した。
- 4) 最適解の移動量と制約式交換との関連を示したが、現段階では両者を直接的に結び付けるものは得られていない。
- 5) 活性制約面が入れ換わる制約面の境界で最適解の移動量が式表現できれば、探索で蓄積した情報が新しい制約面での探索に利用可能となる。

$$\begin{aligned} \nabla_{sL} &= (\mathbf{C}_{sL} + \mathbf{G}_{ss} \cdot \mathbf{x}_s + \mathbf{G}_{sm} \cdot \mathbf{x}_m) \\ &\quad + \mathbf{E} (\mathbf{C}_m + \mathbf{G}_{ms} \cdot \mathbf{x}_s + \mathbf{G}_{mm} \cdot \mathbf{x}_m) \end{aligned} \quad (13)$$

$$= \nabla_{sF} + \mathbf{E} \cdot \nabla_{mF} \quad (14)$$

$$\mathbf{G}_{sL2} \cdot d\mathbf{x}_{s2} = 0 - \nabla_{sL2} \quad (15)$$

$$\mathbf{G}_{sL1} \cdot d\mathbf{x}_{s1} = 0 - \nabla_{sL1} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} &= -(\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) \nabla_{mF} \\ &= (\mathbf{G}_{ss} + \mathbf{E}_2 \cdot \mathbf{G}_{ms}) d\mathbf{x}_s^* \\ &\quad + (\mathbf{G}_{sm} + \mathbf{E}_2 \cdot \mathbf{G}_{mm}) d\mathbf{x}_m^* \end{aligned} \quad (17)$$

$$= -(\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) \nabla_{mF1} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{sL2} \cdot d\mathbf{x}_s^* &= -\nabla_{sL12} \\ d\mathbf{x}_m^* &= d\mathbf{x}_{m2} - d\mathbf{x}_{m1} \end{aligned} \quad (19)$$

$$= \mathbf{E}_2^T d\mathbf{x}_{s2} - \mathbf{E}_1^T d\mathbf{x}_{s1} \quad (20)$$

$$\mathbf{E} - \mathbf{C} \cdot \mathbf{D}_p' = \mathbf{E}' \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= -\nabla_s \mathbf{g}_{r-m}^T - \mathbf{E} \cdot \nabla_m \mathbf{g}_{r-m}^T \\ \nabla_{sL} - \mathbf{C} \cdot \lambda_{mp}' &= \nabla_{sL}' \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \lambda_{mp}' &= \mathbf{D}_p' \cdot \nabla_{mF} \\ \nabla_{sL}' - \nabla_{sL} &= -\mathbf{C} \cdot \mathbf{D}_p' \cdot \nabla_{mF} \end{aligned} \quad (23)$$