Ｉ－8

最適解探索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．筆者らは等式制約探索法と称する（以下は等式制約法と略す）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．この方法では探索途中で実際に効いている制約式を等式制約g_mとして選んでいるが，等式制約g_mの取捨選択のアルゴリズムを考える上で参考になるのが双対法である．

双対法は制約式の次元で探索を行うことにより最適解での制約式を選んでいるが，筆者らは等式制約法と双対法を対応させ，等式制約法での制約式の取捨選択について考察を行った．

2. 双対法

最適化問題についての主問題と双対問題は(2),(3)式で表わされる．Lagrange関数を(1)式で定義したとき，鞍点が存在するなら鞍点$L(x^0,\lambda^0)$は(4)式を解くことにより得られ，主問題の解と双対問題の解は一致する．

双対問題を解くには(4)式の右辺について最初に$\min_{x} L(x,\lambda)$を行うが，これは(5)式の双対関数$h(\lambda)$になり，$\min_{x} L(x,\lambda)$となるxは$\frac{\partial L(x,\lambda)}{\partial x}=0$より求まる．次に$\max_{\lambda\geq 0} h(\lambda)$を行うが，これは(3)式の双対問題である。$\max h(\lambda)$は(6)式に示す$g_i=0$の点になるので，双対法では$\min_{x} L(x,\lambda)$が満足された状態で$g_i\neq 0$の制約式について$g_i=0$の点を目指すことになる．$g_i=0$の点を目指すとき$\lambda\geq 0$が許容範囲であるので，$g_i=0$が$\lambda_i<0$の範囲にあるものは$\lambda_i=0$で留まり，$\lambda_i=0$では$g_i<0$になる．これより探索が終了した時点では各制約式の$g_i$と$\lambda_i$は図－1に示す○印の二つ状態に分かれる．なお双対変数λによる探索には(7)式の探索方向ベクトル$\Delta\lambda$が用いられる．

3. 等式制約法

等式制約法は主問題についての解法である。主問題を解くには(4)式の左辺について最初に$\max_{\lambda\geq 0} L(x,\lambda)$を行うが，$\max_{\lambda\geq 0} L(x,\lambda)$を満足する$g_i$と$\lambda_i$の条件は(8)式で与えられる．(8)式の②，③は図－1の○印の二つの状態に対応している．また(8)式の②，③は$\lambda^T g(x)=0$を意味しているので，これより$L(x,\lambda)=f(x)$になる．これと(8)式①を合わせると$\max_{\lambda\geq 0} L(x,\lambda)$は$g(x)\leq 0$付きの$f(x)$であり，(2)式の主問題になる。

最適化問題が(9)式で与えられたとき，等式制約法では変数x，制約式g_M，双対変数λ_Mを(8)式の②，③に対応して(10)式のよう

$$L(x,\lambda)=f(x)+\lambda^T g(x) \quad \text{----(1)}$$

主問題　　　　　　　　双対問題

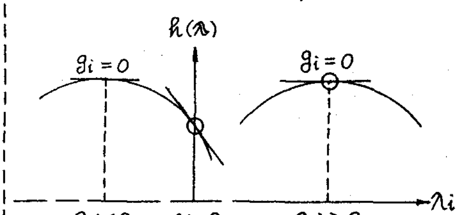
$$\left.\begin{array}{l}\min_{x} f(x)\\ \text{subj. to } g(x)\leq 0\end{array}\right\}\text{--(2)} \qquad \left.\begin{array}{l}\max_{\lambda} h(\lambda)\\ \text{subj. to } \lambda\geq 0\end{array}\right\}\text{--(3)}$$

$$L(x^0,\lambda^0)=\underbrace{\min_{x}\max_{\lambda\geq 0} L(x,\lambda)}_{\text{主問題}}=\underbrace{\max_{\lambda\geq 0}\min_{x} L(x,\lambda)}_{\text{双対問題}} \quad \text{---(4)}$$

$$h(\lambda)=\min_{x} L(x,\lambda) \quad \text{----(5)}$$

$$\frac{\partial h(\lambda)}{\partial \lambda_i}=g_i(x)=0 \quad \text{----(6)}$$

図－1 双対法での探索終了時



$$\Delta\lambda=-\left(\frac{\partial g(x)}{\partial \lambda}\right)^{-1} g(x) \quad \text{----(7)}$$

$$\left.\begin{array}{l}\text{①} g_i>0 \text{ なら } L(x,\lambda) \text{ の max が定まら}\\ \quad \text{ないので } g_i\leq 0 \text{ とするが}\\ \text{②} g_i=0 \text{ なら } \lambda_i\geq 0 \text{ であればよい}\\ \text{③} g_i<0 \text{ なら } \lambda_i=0 \text{ のとき max}\end{array}\right\}\text{---(8)}$$

$$\left.\begin{array}{ll}\min_{x} f(x) & x: n\text{個の変数}\\ \text{subj. to } g_M(x)\leq 0 & g_M: M\text{個の制約式}\end{array}\right\}\text{--(9)}$$

$$\left.\begin{array}{ll}\text{制約変数 } x_m: m\text{個} & \\ \text{探索変数 } x_l: n-m\text{個} & \\ g_m(x)=0 \text{ では } \lambda_m\geq 0 & : m\text{個}\\ g_{M-m}(x)\leq 0 \text{ では } \lambda_{M-m}=0 & : M-m\text{個}\end{array}\right\}\text{--(10)}$$

$$\lambda_i<0,\ g_i>0 \text{ は許容できない} \ \}\text{----(11)}$$

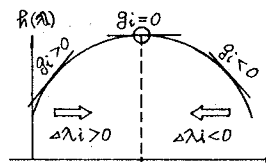
に選ぶ。(10)式は等式制約g_mが満足すべき条件であり，言い換えると(11)式である。条件が満足された状態で$\min_{x} f(x)=\min_{x} L(x,\lambda)$を行うが，これは$\frac{\partial L(x,\lambda)}{\partial x}=0$であり，これと$g_m(x)=0$より$x$, λ_mが定まる。

4. 制約式の取捨選択

等式制約法では等式制約g_mを選んだとき，(10)式の条件が満足されるように許容できない$\lambda_i<0$，$g_i>0$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，制約式の取捨選択の基本操作は(12)式で示される。(12)式の①は簡単であり，$g_i=0$で$\lambda_i<0$となった制約式をg_mからはずすだけでよいが，(12)式の②にはなんらかのアルゴリズムが必要である。(12)式の②は双対法での$\Delta\lambda_i$による探索に相当しており，等式制約法では変数xの次元で制約式の取捨選択が行われるので，一度に処理できる$g_i>0$の数は探索変数の個数までである。

①$g_i=0$で$\lambda_i<0$の制約式をg_mからはずすと$\lambda_i=0$で$g_i<0$になる
②$\lambda_i=0$で$g_i>0$の制約式をg_mに加えると$g_i=0$で$\lambda_i>0$になる
(12)

図－2 双対法での探索



$\lambda_i=0$かつ$g_i<0$以外の$g_i\neq0$について

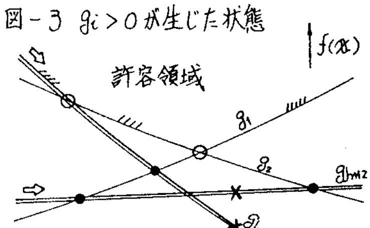
双対法では図－2に示すように$g_i\neq0$の制約式($\lambda_i=0$で$g_i<0$を除く)は探索方向ベクトル成分$\Delta\lambda_i$により$g_i=0$を目指すが，各$g_i\neq0$について$\Delta\lambda_i$による探索が行われる段階で他のλ_iの影響により$\lambda_i=\lambda_i+\Delta\lambda_i<0$となる制約式が生じ，これは$\lambda_i=0$かつ$g_i<0$となり探索から除外される。また新たに$g_i\neq0$となる制約式も生ずるが，最終的には図－1のように$g_i=0$かつ$\lambda_i\geqq0$の制約式と$\lambda_i=0$かつ$g_i<0$の制約式に分かれる。双対法では制約式の次元で探索が行われるので，$g_i\neq0$の制約式の個数に関係なく処理できる。

制約式の取捨選択は，①等式制約法では(12)式の基本操作による制約式の入換え　②双対法では$\Delta\lambda_i$による探索　により処理されるが，両者は対応しているので，上記①は双対法を用いて説明することができる。

5. 取捨選択のアルゴリズム

探索中に$g_i>0$が生じた状態を図－3に等式制約がg_{m1}，g_{m2}の二つの例で示す。探索中なので探索変数は少なくとも1個は存在するが，この例では1個とする。×印は$g_i>0$を見つけた点であり，両者共$g_1>0$，$g_2>0$である。$g_i>0$をg_mに加えたとき●印には$g_i>0$があり，○印には$g_i>0$がない。取捨選択のアルゴリズムの例を(13)式に示す。

図－3 $g_i>0$が生じた状態



探索変数は1個とする

g_{m1}は$g_i>0$がない状態で探索中に$g_i>0$が生じた場合であり，(13)式により取捨選択が実行できる。g_{m2}は最初から$g_i>0$がある状態で探索した場合であり，図に示すケースでは(13)式だけでは取捨選択が不可能である。これはg_mの中にはずすべき制約式が残っているのに$g_i>0$をg_mに加えるに必要な探索変数が不足している場合である。このケースを処理するにはg_mの中から仮に1個の制約式をはずし，$g_i>0$をg_mに加えることによりはずすべき制約式を見つけることができるので，はずすべき制約式が残っているかを判定して上記の処理を行う手順を(13)式に追加すればよい。

①$g_m=0$の点を求め，λ_mを計算
②$\lambda_i<0$があればg_mからはずす
③$g_i>0$がなければ④へ行く
　$g_i>0$があればそのうちの1個をg_mに加え①に行くが，もし探索変数が残っていなければ先にg_mに加えた制約式をはずしてから加える
④次の処理
(13)

6. まとめ

以上に述べたように双対法での$\Delta\lambda_i$による探索と等式制約法での制約式の入換えとを対応させて考察を進めていくことにより，実際に効いている制約式を取捨選択するアルゴリズムを生み出していくことができる。取捨選択のアルゴリズムとしては，①$\lambda_i<0$，$g_i>0$の除去が確実に処理できる　②処理に要する計算量が少ない　③手順が単純明解である　ことが必要条件である。ここでは取捨選択アルゴリズムの一例を示したが，現段階ではアルゴリズムの厳密化，効率化を図っていく余地がまだ残っている。