（Ⅰ－35）　等式制約法における最小化法について

群馬高専　正員　平田恭久

1．まえがき

最適解の探索には制約条件の処理と最小点の探索の二つの側面がある。最適化手法は制約条件の処理に主眼があり、最小点の探索には一般の無制約最小化法が用いられる。著者は等式制約法と称する最適化手法を開発してきたが、活性な制約面を得るという制約条件の処理に関しては一応の完成を見ている。しかしながら、次の２点から探索法の改善が必要である。①現実の探索では最小化法の探索効率に占める割合は非常に大きいが、現段階の等式制約法では簡便な探索方向ベクトルで処理しており、より効率の高い探索方向ベクトルの採用を検討しなければならない。②無制約最小化法では制約面の影響を考慮していないのが普通であるが、最適解の探索という点からは制約面の変化に伴う探索すべき関数の変化は無視できない。上記②に関しては、等式制約法は活性な制約面を掌握して探索を行う方法であるから、制約面を考慮した最小化法の開発には適した手法である。ここでは、リニアサーチを中心にした等式制約法における最小化法について、考察を行ってみる。

2．現段階の最小化法

等式制約法の$\triangle x_m$掃出しに伴う*tableau*内容が図－１であるが、この*tableau*には活性な制約面g_mに近づく$\triangle x_m$と探索方向を示す$\partial L/\partial x_s$が得られている。$\partial L/\partial x_s$を式(1)で探索方向ベクトルに変換し、この$\triangle x_s$で$\triangle x_s$掃出しを行うと*tableau*のg行$\triangle x_m$列は式(2)になり、式(2)第２項が$\triangle x_{ms}$である。この操作を反復することにより、活性な制約面に沿って最適解に近づくことができる。このように現段階の等式制約法では、最小化法として最急降下法を用いている。最小化法として可変計量法を採用しようとすると、リニアサーチが必要になるが、*tableau*の掃出し計算を利用したリニアサーチを次に考えてみる。

	f	g_m	g_{r-m}	$\triangle x_m$	$\triangle x_s$
g	$f+\triangle f_m$	$0_m{}^T$	A	$\triangle x_m{}^T$	$0_s{}^T$
x_m	λ_m	I_m	B	$\left(-\dfrac{\partial g_m{}^T}{\partial x_m}\right)^{-1}$	0
x_s	$\dfrac{\partial L^T}{\partial x_s}$	0^T	C	D	I_s

図－１　$\triangle x_m$掃出しに伴う*tableau*内容

$$x_{sj}=-\frac{\partial L}{\partial x_{sj}}\bigg/\left|\frac{\partial f}{\partial x_{sj}}\right|x_{sj}\cdot\beta_j \quad \cdots(1)$$

$\triangle x_s$掃出しに伴うg行$\triangle x_m$列

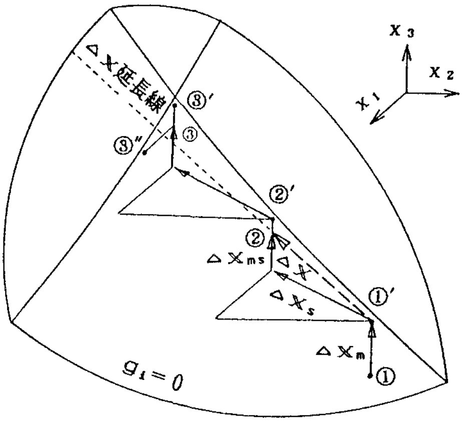
$$=\triangle x_m{}^T+\triangle x_s{}^T\left\{-\frac{\partial g_m{}^T}{\partial x_s}\left[\frac{\partial g_m{}^T}{\partial x_m}\right]^{-1}\right\} \cdots(2)$$

3．等式制約法でのリニアサーチ

乗数法と同じ形の *penalty function* は式(3)になり、等式制約法では$g_i \leqq 0$を常に確保しているので、P（x，λ）＝L（x，λ）＝f（x）である。P（x，λ）を計算する点で$\partial f/\partial x$，$\partial g/\partial x$が必要であるが、このための計算量は多いので、探索方向ベクトルを定めるときのみこれらの数値を計算する。以降は*tableau*のgのみを各点で求め、このgについての掃出し計算より得られたxでfを更新する。これは制約面を線形近似していることであり、f，gが急激に変化せず、かつ、$\partial f/\partial x$，$\partial g/\partial x$を計算した点とP（x，λ）の最小点が大きく離れていなければ、線形近似の誤差は小さいと考えられる。

図－２にリニアサーチの概要を示すが、①点で$\partial f/\partial x$，$\partial g/\partial x$を計算し、$\triangle x_m$掃出しを行うと①′点となる。探索変数x_sについての探索方向$\triangle x_s$にある*step*幅を掛けて、$\triangle x_s$掃出しを行うと②点になる。$\triangle x_s$と$\triangle x_{ms}$の合ベクトルが$\triangle x$であり、縮小勾配を用いない他の最適化手法の探索方向に相当する。②点でg_mを計算するとg_mの非線形性のため、$g_i=0$ではなく$g_i>0$になっている。この$g_i>0$を掃出すことにより②′点になる。このように*tableau*でのgの値と新たに求めたgの値とに差$\triangle g$が生じ、これはxに伴う制約面の変化を示しており、$\triangle g$がある範囲内にあれば①点で計算した*tableau*の誤差は小さい。

図－２ではX_1, X_2が探索変数、X_3が制約変数であるが、もし、③点で$g_i>0$を掃出すとき制約変数がX_1になれば、③′点ではなく③″点が得られる。掃出し行（制約変数行）は$\triangle f$の小さい方を選ぶので、新たに制約条件$g_i{}'$に抵触すると、制約変数が今までとは異なったものになることがある。等式制約法では探索方向は$\triangle x_s$のみを定めており、$\triangle x_m$は掃出しにより定まるので、すべての変数を含めた探索方向はリニアサーチ開始点と最小点を結んだ直線になる。



図－２　等式制約法でのリニアサーチ

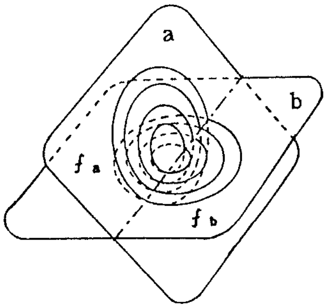
上記の方法は*tableau*の$\partial f/\partial x$, $\partial g/\partial x$を一定のままgのみを更新して、式(3)の$P(x, \lambda)$の精度を確保するようにしており、計算量は通常の最小化法でのリニアサーチと同程度であるが、式(3)のλは正しく計算されているので、$P(x, \lambda)$の精度はよい。*tableau*の$\partial f/\partial x$, $\partial g/\partial x$の変化も加味しようとしたのが、式(4)の*tableau*差分である。Tは*tableau*の内容（配列）であり、図－２の①点，②点で$\partial f/\partial x$, $\partial g/\partial x$を計算し、その差を*tableau*差分として記憶しておき、以降の*tableau*にはその差を加えていく。その後は数点おきに$\partial f/\partial x$, $\partial g/\partial x$を計算し、*tableau*差分を更新することにより*tableau*の精度を保つようにする。α_1は*tableau*差分を求めるときの*step*幅，α_kはT_kからT_{k+1}への*step*幅である。

$$\left.\begin{array}{l} P(x, \lambda)=f(x)+\lambda^T\langle g\rangle \\ g_i>0\text{のとき}\ \langle g_i\rangle=g_i \\ g_i\leqq 0\text{のとき}\ \langle g_i\rangle=0 \end{array}\right\}\cdots(3)$$

$$T_{k+1}=T_k+(T_2-T_1)\,\alpha_k/\alpha_1 \quad (4)$$

４．活性な制約面の変化

等式制約法の最小化法として可変計量法を用いるときの問題点に活性な制約面の変化がある。罰金法，制約付き可変計量法等の手法では、制約条件の抵触（活性な制約面の変化に相当）により*penalty function*が変化するが、同一の関数として可変計量法を適用している。図－３に活性な制約面の境界を示すが、$\partial P/\partial x$は不連続である。制約面ａ上のfａと制約面ｂ上のfｂは別の関数であり、最小点はａ上にあるので、ｂ上で定めた探索方向は正しい最小点に向いていない。可変計量法は探索方向ベクトルの直交性を利用しており、一つの関数を対象にしたものである。図－３のケースに可変計量法を適用した場合の処理は明らかにされていないが、基本的な考え方としては二つ以上の関数を対象として、ある関数から他の関数への乗り移りを検討する必要がある。



図－３　活性な制約面の変化

可変計量法では少しづつ*Hesse*行列の近似度を高めていくが、一つのアイデアとして、以前の制約面で得られた経緯を新たな制約面へ変換することが考えられる。近似行列の作成に*tableau*内容が関係するのは、探索変数と制約変数の区別，最急勾配方向，リニアサーチ等である。以前の制約面と新たな制約面とでは、*tableau*内容に差が生じただけであるが、以前の制約面での経緯をどのように修正するかが問題である。

５．まとめ

等式制約法の最小化法として可変計量法を採用するに当っての問題点として、①リニアサーチの方法、②活性な制約面の変化に対する処理、の二つがあり、これらについて考察を行った。リニアサーチについては一つの方法を示し、これを発展させていけば比較的少ない計算量で精度のよいリニアサーチができる見通しが得られた。活性な制約面の変化についてはまだ具体的な処理方法を提案するまでには至ってはおらず、問題点の提起に終わっているが、この問題点を追及していけば活性な制約面を考慮した可変計量法の開発が可能になると考えられる。