構造工学論文集 Vol. 40 A (1994年3月)　　土木学会

活性な制約式集合を用いる最適化手法と等式制約法の比較

A COMPARISON OF AN ACTIVE CONSTRAINT METHOD AND OPTIMIZATION METHODS USING ACTIVE SET STRATEGIES

平田恭久*
by Yashuhisa HIRATA

The author has already proposed an optimization method using selection techniques of active constraints, and has named this method an active constraint method. This method uses a technique based on the duality theory. This technique selects active constraints among inequality constraints, and is similar to a pivot selection technique of the simplex method. There are some optimization methods based on active set strategies: generalized reduced gradient methods, gradient projection methods, and quadratic approximation methods. This paper desribes a comparison of the active constraint method and optimization methods using active set strategies, and describes some considerations of an extending method for the active constraint method.

Key Words : optimization method, active constraint, pivot selection

1. まえがき

与えられた制約条件の下で目的関数の最小化または最大化を図るのが最適化であり、これを設計に適用すると最適設計になる。構造最適設計では制約条件，目的関数は非線形なので、非線形最適化手法が必要になる。種々の最適化手法が使用されてきているが、これを裏返すと決定版がないということである。著者は従来からある最適化手法に飽き足らず、以前から等式制約法と称する非線形最適化手法の開発を行ってきたが、アルゴリズムとしては一応の完成の段階に達したので、類似の最適化手法と比較して手法としての位置付けを明確にすることにした。

著者独自の考え方での開発を進めてきたため、等式制約法が他の最適化手法とどのようなつながりがあり、手法としてのオリジナリティがどこにあるかが明確にされないままになっていた。活性な制約面を前提にして探索方向ベクトルを定める手法であり、かつ現段階では有力な手法とされている一般化縮小勾配法，勾配射影法，逐次２次計画法を類似の手法として取り上げ、アルゴリズムの比較をすることにした。本論文では等式制約法の手法としての独自性を示すことを目的として、計算効率等の比較は省略している。

下記２．では等式制約法開発の経緯を述べることにより、等式制約法の出発点がどこにあるかを示し、次に類似の最適化手法の概要を参考文献[1),2)]によりとりまとめ、等式制約法との関係を述べる。非線形問題

＊　群馬高専教授　土木工学科　（〒３７１　群馬県前橋市鳥羽町５８０）

の解法は線形化した*subproblem*を逐次解いていくのが定石であるが、下記3．では探索方向ベクトルを求める*subproblem*の定式化を主問題の解法としてまとめている。*subproblem*の定式化では、活性な制約面とその従属変数が得られていることを前提にしているが、この前提が双対問題の解法でかなえられることを下記4．で示す。このような展開になるのは等式制約法の基礎に双対性があるためである。以上で等式制約法の原形が出来上がったことになる。

類似の最適化手法では、*subproblem*の定式化で前提となる活性な制約面を*active set strategy* で得ているが、等式制約法では双対問題の解法を具体化したシンプレックス・タブローでの掃き出し計算より得ている。この点が等式制約法と類似の最適化手法との大きな相違点であり、下記6．で*active set strategy* とシンプレックス・タブローでの掃き出し計算との関係を明らかにしている。等式制約法では、n個の設計変数を制約面に従属しているm個の従属変数と独立しているs個の独立変数に分けた縮小勾配を採用しているため、各ラインサーチごとに変数の区分が一定せず、準*Newton*法等の最小化法の適用に不便があった。縮小勾配（s次元での最急勾配）を活性な制約面上のn次元での最急勾配に変換することにより、この点が解決できた経緯が下記5．に述べてある。

2．非線形最適化手法の概要

（1）等式制約法開発の経緯

構造物設計では許容応力度一杯になるように断面を定めることが多いが、これは許容応力度一杯の設計が有利な設計になることが多いからである。最適化ではある制約条件を限度一杯、すなわち等号条件のように扱うことがあるが、このような場合を活性な制約条件と言い、活性な制約条件が形成する制約面を活性な制約面という。活性な制約面は許容領域に直接面しており、最適解は活性な制約面上に存在するので、活性な制約面上で目的関数の最小点を探索すれば最適解が得られることになる。これは構造物設計での最適化の考え方であり、アルゴリズムとして明確化できれば最適化手法としての開発が可能になる。探索途中の点を制約面上に乗せておくには、制約面を等式制約、すなわち方程式として解けばよい。このとき設計変数の内のいくつかが等式制約を満足する従属変数になる。

最適化手法としての方向付けは定まってきたが、アルゴリズムとしての難関は等式制約とその従属変数の選び方である。どの最適化手法でも、探索終了点で最適解の必要条件を満足するようにアルゴリズムを組み立てているが、探索途中の形態に手法としての特色がある。等式制約と従属変数の選び方を明確にするための考察を続け、双対問題の解法と線形計画法でのシンプレックス法の仕組みを組み合わせたアルゴリズムが得られた。この手法は等式制約とその従属変数の選び方に着目したものなので、等式制約法と呼ぶことにした。

最適化手法は二つの側面を持ち、一方は制約条件の処理であり、もう一方は最小点の探索である。最急勾配方向に探索する簡単な最小化法を採用するなら、等式制約法は原形のままで最適化手法として十分に使用できる。最小点を求めることは方程式を解くことと同じであり、効率の良い方程式の解法として準*Newton*法がある。等式制約法では、設計変数は独立変数と従属変数に分かれ、独立変数と従属変数の区分が動くと蓄積した情報の継続性が失われる。これに対し、準*Newton*法は探索過程で蓄積した情報を利用しているため、変数区分の問題が浮上してきた。独立変数に関する勾配を全変数に関する勾配に変換することにより、変数区分の問題が解決できたので最適化手法として一応の完成を見ることができた。

（2）最適化手法の分類

非線形最適化手法については種々の分類があるが、本論文では代表的な手法として、①無制約最小化関数法，②逐次線形計画法，③勾配法，④逐次2次計画法，の四つを取り上げる。上記①は制約式変換法とも呼

ばれ、ペナルティ法，乗数法がある。目的関数と制約式で構成される制約条件のない拡大関数を作り、これに最小化法を逐次適用して近似解を改良していく。制約式を含む罰金項で制約条件を処理しようとするのがペナルティ法であるが、罰金項に付ける制御パラメータ（応答係数）のコントロールに難点があり、この点に改良を加えたのが乗数法である。乗数法では*subproblem*の*Lagrange*乗数を推定することにより制御パラメータのコントロールを行う。

上記②は非線形計画問題を線形近似した*subproblem*に線形計画法を逐次適用して近似解を改良していく方法であり、同系統の手法に切除平面法等がある。線形計画問題では許容領域を形成する凸多面体の端点に最適解が存在するが、非線形計画問題では端点でない制約面上に存在するのが普通なので、最適解に収束させるための工夫が必要になる。

上記③は制約条件の満足を優先させて目的関数の最小化を図って行く方法である。ある点で線形化した目的関数，制約式より探索方向を生成している。勾配射影法と一般化縮小勾配法は本質的には同じものであるとされているが、ある点で活性な制約面の接平面上にある探索方向に進んだ後に、活性な制約面に復帰することで制約条件を満足させている。これに対し、許容方向法では活性な制約面に抵触しない探索方向を選んでいる。

上記④はある点で目的関数，制約式を*Taylor*展開し、目的関数は２次の項まで、制約式は１次の項までとった*subproblem*を逐次解いていき、最適解に到達する方法である。このままでは収束性に問題があるので、目的関数の２次項の代わりに*Lagrange*関数の２階微分（*Hesse* 行列）で置き換えた方法があり、この*Hesse*行列を近似行列で置き換えた、すなわち準*Newton*法を適用した方法へと発展してきている。逐次２次計画法は現段階では最も有力な手法とされている。

（３）類似の最適化手法

本論文では等式制約法のアルゴリズムとしての位置付けを行うものであるから、等式制約法と比較する手法は類似の手法でなければならない。上記（２）の①，②はアルゴリズムの基本構成が等式制約法とは異なっているため除くことにする。最も近い位置にあるのは上記（２）の③の一般化縮小勾配法と勾配射影法である。上記（２）の④の逐次２次計画法は若干の差異はあるが、基本構成は同じなのでこれも類似の手法に加える。

これらの手法の解法は次のとおりである。活性な制約式集合をなんらかの方法で見つけ出すと等号制約条件付き最適化問題とみなせるので、*Lagrange*未定乗数法が適用できる。この適用で得られる最適解での必要条件式は一般に連立非線形方程式になり、*Newton*法で解くことができる。*Newton*法は線形化して収束するまで逐次解く形なので、非線形の等号制約付き最適化問題を線形化した*subproblem*を逐次解くことと結果としては同じになり、後述の式(2)が線形化した*subproblem*である。一般化縮小勾配法と勾配射影法で探索方向の算出に*Hesse* 行列を用いると、逐次２次計画法に似た形になるが、逐次２次計画法では活性な制約面に復帰する操作はなくて、探索方向の算出で制約条件の満足を図っている。一般化縮小勾配法と勾配射影法，逐次２次計画法について、等式制約法とのアルゴリズムの比較を後記６．で行う。

３．主問題の解法

等式制約法，一般化縮小勾配法，勾配射影法ではほぼ同様の定式化になるが、勾配射影法では独立変数と従属変数に分ける変数区分はない。式(1)の非線形最適化問題を解くには、ある$\mathbb{x}_k$点(変数$\mathbb{x}$はｎ次元)で線形化した*subproblem*を作成し、これを逐次解いていくことにする。式(1)のｒ個の制約式$\mathbb{g}$についてなんらかの方法により、ｍ個の活性な制約式$\mathbb{g}_m$が選択されているとすれば、$\mathbb{x}_k$点で制約式を満足しかつ最もfが減少するような方向$\boldsymbol{d}$（ｎ個の成分）は式(2)で表される。式(2)で$\mathbb{g}_m=\mathbb{0}$とすると$-\boldsymbol{d}$は活性な制約面上でのｎ

次元の最急勾配になる。式(2)は式(1)の*subproblem*であり、式(2)の解dが$d\to 0$のとき式(1)の解と一致し、このとき式(1)の局所的最適解の必要条件が成立する。式(2)で$d^T d-1=0$は正規化条件であり、これがないと$\min\ \nabla f^T d$が定まらない。

$$\left.\begin{array}{l}\min\limits_{x}\ f(x)\\ \text{subject to}\\ \quad g(x)\le 0\end{array}\right\}\cdots\cdots\ (1)\qquad\qquad \left.\begin{array}{l}\min\limits_{d}\ \nabla f^T d\\ \text{subject to}\\ \quad g_m+\nabla g_m d=0\\ \quad d^T d-1=0\end{array}\right\}\cdots\cdots\ (2)$$

式(2)は線形化した等号制約条件付き最適化問題であり、*Lagrange*未定乗数法が適用できる。式(2)についての*Lagrange*関数は式(3)になり、μ_mとwは*Lagrange*乗数である。式(3)をdで微分して$=0$と置き転置したのが式(4)であり、n個の成分を持つdで偏微分するので、n個の式が得られる。式(4)でスケールファクタ$2w=1$とする。式(4)はn個の式に対し、n個の成分のdとm個の成分のμ_mが未知数なので、このままでは解が得られない。独立変数x_s(s個の成分)と従属変数x_m(m個の成分)とに変数区分できているとき、活性な制約面$g_m=0$上にdが存在するとすれば式(5)が成立する。式(5)はm個の式であり、これより式の数と未知数の個数が一致する。式(4)をs成分とm成分に分け、式(5)を適用すると式(6)が得られる。式(6)-bにより式(7)が得られ、これを式(6)-aに代入して整理し、式(5)を加味すると式(8)になる。式(8)は式(2)の解であり、これによりsubproblemでの最急勾配$\nabla F=-d$が得られる。

$$L(d,\mu_m,w)=\nabla f^T d+\mu_m^T(g_m+\nabla g_m d)+w^T(d^T d-1)\quad\cdots\cdots\ (3)$$

$$(\partial L/\partial d)^T=\nabla f+\nabla g_m^T\mu_m+2wd=0\quad\cdots(4)\qquad d_{ms}=-(\nabla_m g_m)^{-1}\nabla_s g_m d_s=E^T d_s\quad\cdots(5)$$

$$\nabla_s f+\nabla_s g_m^T\mu_m+d_s=0\quad\cdots(6)\text{-a}\qquad \nabla_m f+\nabla_m g_m^T\mu_m+E^T d_s=0\quad\cdots(6)\text{-b}$$

$$\mu_m=-(\nabla_m g_m^T)^{-1}(\nabla_m f+E^T d_s)\quad\cdots\cdots\ (7)$$

$$\nabla_s F=(I_s+EE^T)^{-1}\nabla_s L=W_s^{-1}\nabla_s L=-d_s\quad\cdots(8)\text{-a}\qquad \nabla_m F=E^T\nabla_s F=-d_{ms}\quad\cdots(8)\text{-b}$$

式(8)-aのI_sはs次元の単位行列，$\nabla_s L$は縮小勾配(s次元での最急勾配)であり、式(8)-aは$\nabla_s F$(n次元での最急勾配∇Fのs成分)と$\nabla_s L$の関係を示し、∇Fのm成分は式(8)-bの$\nabla_m F$である。縮小勾配ではm次元の勾配は0とみなすので、$E^T d_s=-\nabla_m L=0$とすると式(7)μ_mは式(9)になる。式(9)のλ_mは縮小勾配での*Lagrange*乗数であるが、μ_mについても最適解では$E^T d_s=0$より$\mu_m=\lambda_m$になる。勾配射影法では変数区分をしないため、等式制約法，一般化縮少勾配法とは式の誘導が異なってくる。∇g_mと$-d$との直交条件の式(10)より式(11)μ_mが得られ、式(12)に示すように射影マトリックスPを用いて∇Fが得られる。式(11)μ_m，式(12)∇Fを変形すると、それぞれ式(7)μ_m，式(8)∇Fに一致する。

$$\mu_m=-(\nabla_m g_m^T)^{-1}\nabla_m f=\lambda_m\quad\cdots\cdots\ (9)\qquad \nabla g_m(\nabla f+\nabla g_m^T\mu_m)=0\quad\cdots\cdots\ (10)$$

$$\mu_m=-(\nabla g_m\nabla g_m^T)^{-1}\nabla g_m\nabla f\quad\cdots\cdots\ (11)$$

$$\nabla F=(I-\nabla g_m^T(\nabla g_m\nabla g_m^T)^{-1}\nabla g_m)\nabla f=P\nabla f\quad\cdots\cdots\ (12)$$

式(2)でdは制約面$g_m=0$に平行なベクトルなので、g_mが非線形ならg_mの変化に対し、制約面への復帰ベクトルが必要になる。復帰ベクトルは変数区分があれば式(13)d_{mg}に、変数区分がなければ式(14)d_gになる。d_{mg}またはd_gにより$g_m=0$が確保されるので、上述の式誘導では式(2)で$g_m=0$とみなしている。

$$d_{mg}=-(\nabla_m g_m)^{-1}g_m：\text{m個}\quad\cdots\ (13)$$

$$d_g=-\nabla g_m^T(\nabla g_m\nabla g_m^T)^{-1}g_m：\text{n個}\quad\cdots\ (14)$$

式(6)をまとめると式(15)になり、μ_mをλ_mで置き換えると式(1)についての*Lagrange*関数の微分になっている。式(2)を逐次解いていき$d\to 0$になると、式(7)，式(9)より$\mu_m=\lambda_m$，式(2)より$g_m=0$，g_mが活性な制約式であることからg_mと他の制約式g_{r-m}について式(16)が成立する。以上をまとめると局所的最適解での必要条件である式(17)が$d\to 0$のとき成立する。よって、式(2)の*subproblem*を逐次解くことにより元問題の式(1)の解へと収束する。

$$-\boldsymbol{d}=\nabla F=\nabla f+\nabla \boldsymbol{g}_m{}^T\boldsymbol{\mu}_m=\partial L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu}_m)/\partial \boldsymbol{x} \quad \cdots\cdots \quad (15)$$

$$\boldsymbol{g}_m=\boldsymbol{0}\text{なら}\boldsymbol{\lambda}_m\geqq\boldsymbol{0} \quad \cdots\cdots \quad (16)\text{-a} \qquad \boldsymbol{g}_{r-m}\leqq\boldsymbol{0}\text{なら}\boldsymbol{\lambda}_{r-m}=\boldsymbol{0} \quad \cdots\cdots \quad (16)\text{-b}$$

$$\partial L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda})/\partial \boldsymbol{x}=\nabla f+\nabla \boldsymbol{g}^T\boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{0} \quad \cdots\cdots \quad (17)\text{-a} \qquad \boldsymbol{g}\leqq\boldsymbol{0} \quad \cdots\cdots \quad (17)\text{-b}$$

$$\boldsymbol{\lambda}\geqq\boldsymbol{0} \quad \cdots\cdots \quad (17)\text{-c} \qquad \boldsymbol{g}^T\boldsymbol{\lambda}=0 \quad \cdots\cdots \quad (17)\text{-d}$$

上述のように等式制約法，一般化縮少勾配法，勾配射影法は、活性な制約式$\boldsymbol{g}_m$の選択を前提にして、制約面に平行なベクトルと制約面への復帰ベクトルとにより、制約面上を目的関数fで探索する手法である。いずれの手法も式(1)を主問題として解いている。勾配射影法では変数区分を用いない点が前２者とは異なる。

4．双対問題の解法

上記３．ではなんらかの方法により活性な制約式$\boldsymbol{g}_m$が得られているとしたが、一般化縮少勾配法，勾配射影法，逐次２次計画法等では*active set strategy* で$\boldsymbol{g}_m$を選択している。これに対し、等式制約法ではこれを双対問題の解法として扱っており、この点が他の最適化手法との大きな相違点になっている。ここでは双対問題の解法による$\boldsymbol{g}_m$の選択について述べ、*active set strategy* については後記６．で概要を示す。

式(1)についての双対問題は式(18)になるが、式(18)では$\nabla L=\boldsymbol{0}$を直ちに満足することはできないので、ある$\boldsymbol{x}_k$点での*subproblem*を逐次解くことになる。式(18)第２行の左半分を用いて制約条件としたのが、式(19)であり、f，$\boldsymbol{g}$，∇f，$\nabla \boldsymbol{g}$は$\boldsymbol{x}_k$点での値である。式(19)は$\boldsymbol{\lambda}$についての線形計画問題とみなすことができるので、*Lagrange*乗数$\boldsymbol{\lambda}$(双対変数)について解けばよい。式(19)で∇fは定数項，∇Lはスラック変数に相当しているが、非負条件は付けていないので、式(19)をシンプレックス法に準じた方法により解くことにする。[3)]

$$\left.\begin{array}{l}\max\limits_{\boldsymbol{\lambda}}\ L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda})=f(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})^T\boldsymbol{\lambda}\\ \text{subject to}\\ \nabla L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda})=\nabla f(\boldsymbol{x})+\nabla \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})^T\boldsymbol{\lambda}=\boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{\lambda}\geqq\boldsymbol{0}\end{array}\right\}\cdots\ (18) \qquad \left.\begin{array}{l}\max\limits_{\boldsymbol{\lambda}}\ L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda})=f+\boldsymbol{g}^T\boldsymbol{\lambda}\\ \text{subject to}\\ \nabla f=-\nabla \boldsymbol{g}^T\boldsymbol{\lambda}+\nabla L\\ \boldsymbol{\lambda}\geqq\boldsymbol{0}\end{array}\right\}\cdots\ (19)$$

式(19)を線形計画問題として解くときのシンプレックス・タブローを図－１に示すが、上段は掃き出し前，下段は掃き出し後である。掃き出しのときの軸要素の選択は、定数項をb_j，係数行列の要素をa_{ji}で表すと式(20)になる。

	f	$\boldsymbol{g}_m$	$\boldsymbol{g}_{r-m}$	$d\boldsymbol{x}_m$	$d\boldsymbol{x}_s$	
$\boldsymbol{g}$	f	$-\boldsymbol{g}_m{}^T$	$-\boldsymbol{g}_{r-m}{}^T$	$\boldsymbol{0}_m{}^T$	$\boldsymbol{0}_s{}^T$	0
$\boldsymbol{x}_m$	$\nabla_m f$	$-\nabla_m\boldsymbol{g}_m{}^T$	$-\nabla_m\boldsymbol{g}_{r-m}{}^T$	I_m	0	1 ⋮
$\boldsymbol{x}_s$	$\nabla_s f$	$-\nabla_s\boldsymbol{g}_m{}^T$	$-\nabla_s\boldsymbol{g}_{r-m}{}^T$	0	I_s	n
	0	1………	………r,	r+1…	r+n	

⇩

	f	$\boldsymbol{g}_m$	$\boldsymbol{g}_{r-m}$	$d\boldsymbol{x}_m$	$d\boldsymbol{x}_s$
$\boldsymbol{g}$	$f+\nabla f$	$\boldsymbol{0}_m{}^T$	$-\boldsymbol{g}_{r-m}{}'^{\,T}$	$d\boldsymbol{x}_m{}^T$	$\boldsymbol{0}_s{}^T$
$\boldsymbol{x}_m$	$\boldsymbol{\lambda}_m$	I_m	B	D	0
$\boldsymbol{x}_s$	$\nabla_s L$	0	C	E	I_s

$$-\boldsymbol{g}_{r-m}{}'^{\,T}=-\{\boldsymbol{g}_{r-m}{}^T-\boldsymbol{g}_m{}^T(\nabla_m\boldsymbol{g}_m{}^T)^{-1}\nabla_m\boldsymbol{g}_{r-m}{}^T\}$$

$$B=-(\nabla_m\boldsymbol{g}_m{}^T)^{-1}\nabla_m\boldsymbol{g}_{r-m}{}^T$$

$$C=-\{\nabla_s\boldsymbol{g}_{r-m}{}^T-\nabla_s\boldsymbol{g}_m{}^T(\nabla_m\boldsymbol{g}_m{}^T)^{-1}\nabla_m\boldsymbol{g}_{r-m}{}^T\}$$

$$D=-(\nabla_m\boldsymbol{g}_m{}^T)^{-1}$$

$$E=-\nabla_s\boldsymbol{g}_m{}^T(\nabla_m\boldsymbol{g}_m{}^T)^{-1}$$

図－１　タブローでの掃き出し

$$\left.\begin{array}{ll}\text{列の選択} & i=1\cdots\cdots,\ r \quad -g_i<0\text{の}k\text{列}\\ \text{行の選択} & j=1\cdots\cdots,\ n \quad b_j/a_{jk}\geqq0\text{について } min\text{の}\ell\text{行}\end{array}\right\}\cdots\cdots\ (20)$$

$$\left.\begin{array}{l}\lambda_j{}'=\lambda_j-b_\ell/a_{\ell k}\cdot a_{jk}\geqq0\text{について}\quad \lambda_j\geqq0,\ b_\ell/a_{\ell k}\geqq0\text{なので、}\\ a_{jk}\leqq0\text{なら成立、}a_{jk}>0\text{のときは}b_\ell/a_{jk}=min\ (\lambda_j/a_{jk})\text{なので成立}\end{array}\right\}\cdots\cdots\ (21)$$

$-g_k<0$, $a_{jk}>0$ より、$-g_\ell=0-(-g_k)\cdot 1/a_{\ell k}>0$ が成立 …… (22)

掃き出しのとき $\lambda_m\geqq 0$, $g_{r-m}\leqq 0$ が確保される状況を掃き出し後のタブローで説明する。$\nabla_s L$ は符号を考慮しなくてよいので、$\lambda_j\geqq 0$ について $\lambda_m\geqq 0$ の確保を考えればよい。式(20)の b_j は $\nabla_s L$ または λ_m、a_{jk} はB，Cであり、式(21)より掃き出し後も $\lambda_j'>0$ が成立するので、$\lambda_m\geqq 0$ は確保される。g_{r-m} 列に $-g_k<0$ があったとき、これを x_m 行に掃き出さない限りは g 行 g_m 列の 0_m^T は変化しない。x_m 行に掃き出すときは $b_\ell=\lambda_\ell\geqq 0$ なので、軸要素は $a_{\ell k}>0$ の筈である。g_k の掃き出し行 ℓ 行に対応した g_ℓ は、g_k の掃き出しにより g_m から g_{r-m} へと移るが、$-g_\ell$ は式(22)のように変化する。$-g_\ell>0$ の成立より $-g_k<0$ の掃き出しに伴って新たな抵触は生じないので、$g_{r-m}\leqq 0$ は確保される。以上のことから、双対問題タブローの掃き出し計算により式(16)の条件は満足されることが明らかにされた。

タブローでの掃き出しが終了すると式(16)が成立していることから、活性な制約式の集合、すなわち*active set* が得られている。式(19)第2行をs成分とm成分に分けると式(23)になり、掃き出しにより $\nabla_m L=0$ となるように λ_m を定めている。これに対し、探索途中では $\nabla_s L=0$ となるよう探索が必要になるが、縮少勾配を用いた最急降下法の場合で説明する。

$\nabla_s L=\nabla_s f+\nabla_s g_m^T\lambda_m$ … (23)-a

$\nabla_m L=\nabla_m f+\nabla_m g_m^T\lambda_m$ … (23)-b

掃き出し後のタブローに式(5)のEがあるので、x_s 行に $d_s=-\nabla_s L=dx_s$ を乗じて g 行に加えると、g 行の dx_m 列は $dx_m^T+dx_{ms}^T$, dx_s 列は $0_s^T+dx_s^T$ になり、この dx_{ms} が式(5)の d_{ms} である。この x の変化により非線形制約式では $g_m\neq 0$ になり、$g_m=0$ への復帰ベクトルが必要になるが、タブローにある式(13)の $D=-(\nabla_m g_m^T)^{-1}$ を利用する。$x=x+[dx_s, dx_{ms}]^T$ 点での g を求め、この g についてタブローの g 行 g_m 列が 0_m^T となるように掃きだすと、g 行の dx_m 列は $dx_m^T+dx_{ms}^T+dx_{mg}^T$, dx_s 列は $0_s^T+dx_s^T$ になり、この dx_{mg} が式(13)の d_{mg} である。

dx_s の変化に対し新しい x 点は近似的に $g_m=0$ 上に乗っていることになる。g の非線形性が強くなければこの x で f を計算することによりラインサーチが実行できる。g の非線形性が強い場合は、dx_{mg} の反復計算やラインサーチ途中での ∇g_m の更新が必要になる。以上のように、①式(2)の前提となる活性な制約式 g_m , ②式(2)の解を誘導する際に用いた変数区分，③式(2)の解 d ($d_s=-\nabla_s L$, d_{ms} , d_{mg}) , が双対問題の解法の具体的手段であるタブローの掃き出しより得られる点が等式制約法の大きな特色である。

5．最小化法との関連

上記4．では縮少勾配を用いた最急降下法でラインサーチを説明したが、最小化法として最急降下法を採用するなら縮少勾配の利用にはなんら支障を生じない。しかしながら、準*Newton*法，共役方向法を最小化法として採用すると、縮少勾配では独立変数と従属変数の区分を固定しておくことが困難である。変数区分が異なるとそれまでに蓄積した情報が使えなくなり、準*Newton*法等を新たに開始しなければならないため、実際上準*Newton*法等を採用できない状態であった。この点に関して著者は、①上記3．の式(8)で示すように縮少勾配 $\nabla_s L$ をn次元での最急勾配 ∇F に変換する方法[4] , ②後述するタブローでの変数交換の機能を用いて変数区分を固定する方法[5] , の二つの工夫を行った。

$\nabla_s L$ はどの変数を独立変数 x_s に選ぶかにより異なってくるので、組み合わせは ${}_nC_s$ 個存在する。どの組み合わせの $\nabla_s L$ から算出しても同じ ∇F になることは、変数区分のない式(12)から ∇F が得られることから明らかである。よって、タブローの掃き出しより得られた $\nabla_s L$ を式(8)、すなわち式(25)で ∇F に変換すれば準*Newton*法等の適用での変数区分の問題は解決される。縮少勾配 $\nabla_s L$ を式(5)のEを用いて表すと式(24)になる。式(12)は勾配射影法での射影マトリックスPで表した ∇F であるが、等式制約法では変数区分があるので

、射影マトリックスは式(25)のP_Eになる。W_sは式(26)であり式(8)-aで用いている。W_sの代わりに式(27)W_mを用いて表すとP_Eは式(28)になり、このP_EはPと対応した形であり、変形するとPと一致する。式(27)のI_mはm次元の単位行列である。

$$\nabla_s L = \nabla_s f + E \nabla_m f \qquad \cdots (24)$$

$$\nabla F = P_E \nabla f = \begin{bmatrix} W_s^{-1} & , W_s^{-1}E \\ E^T W_s^{-1} & , E^T W_s^{-1} E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla_s f \\ \nabla_m f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W_s^{-1} \nabla_s L \\ E^T W_s^{-1} \nabla_s L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla_s F \\ \nabla_m F \end{bmatrix} \qquad \cdots (25)$$

$$W_s = (I_s + E E^T) \qquad \cdots (26)$$

$$W_m = (I_m + E^T E) \qquad \cdots (27)$$

$$P_E = \begin{bmatrix} I_s - E W_m^{-1} E^T & , E W_m^{-1} \\ W_m^{-1} E^T & , I_m - W_m^{-1} \end{bmatrix} \qquad \cdots (28)$$

r−m	m	
B：m一定 制約式交換	D：m減少	m
C：m増加	E：m一定 変数交換	s

図－２　タブローの軸要素

図－１の掃き出し後のタブローでＢ，Ｃ，Ｄ，Ｅを取り上げて図示したのが、図－２のタブローの軸要素である。Ｅを軸要素にするとdx_mの１個とdx_sの１個が入れ換わる（$\nabla_s L$の値は変化する）だけなので、等式制約g_mの個数（x_mの個数）ｍは一定である。これを利用することにより、任意の従属変数（列の選択）を任意の独立変数（行の選択）と入れ換えることができるので、変数の区分を操作することが可能になる。

式(7)μ_mは式(11)μ_mと同じなので、μ_mは変数区分に依存しない値である。最適解では$E^T d_s = 0$より$\mu_m = \lambda_m$になることから、どの変数を従属変数x_mに選んでも最適解ではλ_mは同じ値になる。よって、活性な制約式さえ正しく選んであれば最適解では変数の選択は問題にならない。このことを探索途中にまで拡張すると次の方法が可能になる。式(20)の軸要素選択規則を適用すれば活性な制約式が正しく選択できるので、変数区分の操作により、前回のラインサーチと変数区分を合わせても最適解に到達できる。

等式制約法に準*Newton*法等の最小化法を適用するときの変数区分の問題は、①縮少勾配$\nabla_s L$を変数区分に無関係な∇Fへ変換する，②変数交換を利用して変数区分を固定する，二つの方法で解決可能となった。上記①は確実な方法であるが、W_s^{-1}の計算過程が加わる。上記②はタブローの操作のみで済むが、変数交換の実行性に注意する必要がある。二つの方法にはそれぞれ特徴があるので、用途に応じて使い分けることができる。

６．活性な制約式集合

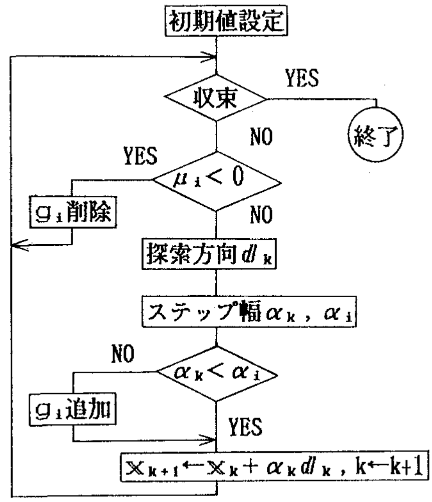
（１）*Active Set Methods*

上記３．主問題の解法ではなんらかの方法により活性な制約式が得られているとしたが、その代表的な方法がここで紹介する*Active Set Methods*であり、[1]上記４．で述べた等式制約法での双対問題の解法に対応している。不等号条件付き線形制約問題に対するアルゴリズムの概要を図－３に示すが、活性な制約式g_mについて求めた探索方向d_kでラインサーチを行い、これを反復して最適解での収束条件を満たせば終了する。

アルゴリズムの基本となる活性な制約式g_mの取捨選択は次のように行う。①*Lagrange*乗数μ_mに負のものが含まれているなら、絶対値の最も大きいμ_iの制約式g_iをg_mから削除する。②ラインサーチのときg_m以外のg_{r-m}についてはd_k方向で最も手前で抵触する制約式g_iのステップ長α_iを算出しておき、ラインサーチの最小点のステップ長α_kよりもα_iが手前にあればその制約式g_iをg_mに追加する。上記①，②では１回の判定につきそれぞれ１個の制約式が削除または追加され、活性な制約式が選択されていく。α_k点または

α_i点のうち手前にある方が1回のラインサーチの終了点になる。このようにしてg_mの取捨選択を行うが、*active set* の初期値設定が全体の効率に大きく影響する。

非線形制約式に対しても基本的には図－3のアルゴリズムが適用できるが、線形制約式に比べ種々の難しさが生じてくる。例えば図－3のアルゴリズムでは、①活性な制約面への復帰ベクトルがない，②抵触制約式のステップ長α_iの算出が複雑，が直ちに生じてくる。一般化縮少勾配法（勾配射影法でもほぼ同様）では最も手前で抵触するステップ長α_iを試算で求め、d_k上のα_i点から$g_m=0$上の点を得ている。*active set*には正確に満足する($g_i=0$)の制約式g_iが含まれる。これに対し逐次2次計画法では、活性な制約式の主な目的は探索方向の算出である。制約面への復帰ベクトルはなく、探索方向と罰金関数とで制約式の処理を行うが、活性な制約式を正確に満足することはできないので、*active set*の選択基準が複雑になる。このように*active set*の選択基準は採用する最適化手法によっても異なる。



図－3　*Active Set Methods*

（2）変数区分の難点

非線形最適化手法の中で、独立変数と従属変数に分ける変数区分をアルゴリズムの基礎にしているのは等式制約法と一般化縮少勾配法である。しかしながら、一般化縮少勾配法の難点は変数区分基準に起因すると言われている。[2] その難点は、①$\nabla_m g_m$が正則でないこと及びx_mの退化についてのチェックとその状態からの復帰が必要，②変数区分の変化の過程で$(\nabla_m g_m)^{-1}$の更新と$\nabla_s L$の再評価のために多くの計算が必要，③準*Newton*法等を適用する場合は変数区分の変化により蓄積した情報を失う，④変数区分の選択での恣意性であり変数区分は収束に影響を与える，である。

これらの難点にもかかわらず、変数区分を採用しているのは制約面上でのｓ次元の最急勾配（縮少勾配）を算出しているためであるが、勾配射影法では変数区分なしに制約面上への射影としてｎ次元の最急勾配を算出している。等式制約法でも縮少勾配を算出しているが、これらの難点の殆どを解決していることは上記２．～５．の記述から明らかであり、これは等式制約法の一つの特色になっている。最急勾配を算出するだけなら変数区分の必要はないが、変数区分の意義がどこにあるかについての明確な結論はまだ得られていない。この点については下記（３）で関連事項に触れている。

（3）変数区分の意義

変数区分がない場合の*Lagrange*乗数μ_mは、直交条件の式(10)より得られる式(11)であるとしたが、μ_m算出の基本は式(29)であり、これは最適解以外では成立しないので、探索途中の点では推定値になる。μ_m推定は残差を最小にする式(30)より得られ、式(11)μ_mと一致する。活性な制約式でありながら$\mu_i<0$を生ずるμ_m推定の例題があるが[1]、この例題で変数区分のある場合の式(9)λ_mを求めると、$\mu_i=-1<0$に対し$\lambda_i=6>0$になる。式(7)μ_mで$(\nabla_m f+E^T d_s)$のうち$\nabla_m f$がλ_m分であり、これに$E^T d_s$が加わってμ_m分になるため、$\nabla_m f$と$E^T d_s$の符号及び相対的な大きさによりλ_mとμ_mで符号が逆転する場合がある。μ_mは最適解での乗数の推定値を求めているのに対し、等式制約法では式(19)よりλ_mを定めており、独立変数を固定したときの従属変数次元での最適解を求めているとみなされる。乗数の符号判定の役割からすると従属変数次元でのλ_m算出の方が当を得ていると考えられる。

$$\nabla f+\nabla g_m^T \mu_m=0 \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (29)$$

$$\min \|\nabla f+\nabla \mathbb{g}_m{}^T \mu_m\| \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad (30)$$

ラインサーチでα_iの制約式に抵触したとき、①$\mathbb{g}_i$の代わりに$\mathbb{g}_m$の一つの制約式$\mathbb{g}_i'$が削除される場合，②$\mathbb{g}_i$が純増になる場合，がある。等式制約法では図－２に示すようにタブローの軸要素が従属変数次元mで分割されており、上記①は軸要素Ｂの制約式交換になり、上記②は軸要素Ｃになる。これに対し*Active Set Methods* では図－３に示すように、制約式交換を$\mathbb{g}_i$を追加→$\mathbb{x}$点更新→$\mathbb{g}_i'$削除の３段階で処理している。この例も変数区分の利点の一つである。なお、等式制約法ではステップ長α_iは算出していないが、これは複数個の制約式に抵触してもその中から活性な制約式が選別できるためであり、*Active Set*とその従属変数を双対問題の解法として選んでいることの利点である。

（４）逐次２次計画法

逐次２次計画法の*subproblem*は式(31)であり、これを等式制約法のように活性な制約面上の探索とすると$\mathbb{g}_m=\mathbb{0}$となる。Ｇは*Lagrange*関数の２階微分の近似行列であるが、式(31)の解に変数区分がある場合の近似行列G_Fを適用して整理すると式(32)になる。式(32)のdlは等式制約法に準*Newton*法を適用したときの探索方向である。逐次２次計画法では*Active Set*は探索方向算出のためであり，活性な制約面に抵触しながら罰金関数で探索する。一般化縮少勾配法のように活性な制約面上に厳密に乗せて目的関数で探索するには多くの計算量が必要であるが、次に述べる方法により計算量の減少が期待できる。

活性な制約式$\mathbb{g}_m$さえ正しく選んであれば、探索途中の点は$\mathbb{g}_m=\mathbb{0}$を厳密に満足しなくても、探索終了点で厳密に満足できれば最適解に到達できる。ラインサーチにおいても同様でラインサーチ終了点に近づくにつれ、$\mathbb{g}_m=\mathbb{0}$の満足度を高めていけばよい。適用例の非線形性が弱ければこれで十分であるが、非線形性が強いときは$\mathbb{g}_m=\mathbb{0}$から離れ過ぎないようにラインサーチに工夫を加える。等式制約法では、①厳密に乗せてなくても*Active Set*の選択が可能，②タブローの掃き出しでの目的関数の変化dfは式(33)であり$\mathbb{g}^T\mathcal{R}$は基本的には罰金関数と同じ働き，の二点がある。これを考慮すると逐次２次計画法と一般化縮少勾配法の中間段階も可能となり、等式制約法の利点を残したままの拡張版になる。

$$\left.\begin{aligned}&\min_{dl}\ \nabla f^T dl+1/2\, dl^T G\, dl\\&\text{subject to}\\&\quad \mathbb{g}_m+\nabla \mathbb{g}_m dl=\mathbb{0}\end{aligned}\right\}\cdots\cdots \quad (31)$$

$$\left.\begin{aligned}&dl=-G_F{}^{-1}\nabla F\\&\mu_m=-(\nabla \mathbb{g}_m\nabla \mathbb{g}_m{}^T)^{-1}\nabla \mathbb{g}_m\nabla f\end{aligned}\right\}\cdots\cdots \quad (32)$$

$$df=\nabla f^T d\mathbb{x}=\mathbb{g}^T\mathcal{R} \quad \cdots\cdots \quad (33)$$

７．結論

（１）他の非線形最適化手法と比較したとき、等式制約法の手法としての類似性と独自性を明確にすることを目的として次の３点を示すことができた。①主問題の解法としての*subproblem*の定式化では、等式制約法は一般化縮少勾配法，勾配射影法と同じカテゴリーに属する。②活性な制約式集合を選択する方法として、他の非線形最適化手法では*Active Set Methods*が代表的であるが、等式制約法ではこれを双対問題の解法として処理している点が大きな相違点である。③双対問題の解法の具体的手段であるシンプレックス・タブローでの掃き出しにより、活性な制約式とその従属変数の選択及び活性な制約面に沿った探索に必要な$d\mathbb{x}$を得ている点が大きな特色であり、この方法には多くの利点がある。

（２）上記（１）－③の特色に関連した見解として次の２点を示した。①一般化縮少勾配法では難点であった変数区分の問題を等式制約法では解決していることから、変数区分を用いることの積極的意義として、乗数の符号判定、抵触での制約式交換の例を述べた。②活性な制約式$\mathbb{g}_m$さえ正しく選択できていれば、探索途中では$\mathbb{g}_m=\mathbb{0}$を厳密に満足させない方が計算量を軽減できるが、等式制約法ではこのような方法が可能であることを考慮すると、一般化縮少勾配法と逐次２次計画法との中間段階の手法へと拡張する可能性があることを述べた。

参考文献

1) Gill,P.E.,Murray,W.and Wright,M.H.:Practical Optimization,Academic Press, pp.167 ～pp.175, pp.205～pp.251,1981

2) Reklaitis,G.V.,Ravindran,A.and Ragsdell,K.M.:Engineering Optimization,Wiley-Interscience, pp. 377 ～pp.463,1983

3) 平田恭久・伊藤文人：活性な制約面の選択を主眼にした最小化問題の解法，土木学会論文集，第386 号／I-8,PP.257～pp.266，1987年10月

4) 平田恭久：縮少勾配法の最小化法への適用，構造工学論文集，Ｖｏｌ．38A，pp.413 ～pp.420，1992年3月

5) 平田恭久：制約付き最小化法への縮少勾配の適用，構造工学論文集，Ｖｏｌ．39A，pp.485 ～pp.492 ，1993 年3月

(1993 年9月16日受付)