力学的シンセシス (2)

システムデザイン工学科
飯盛 浩司

はじめに

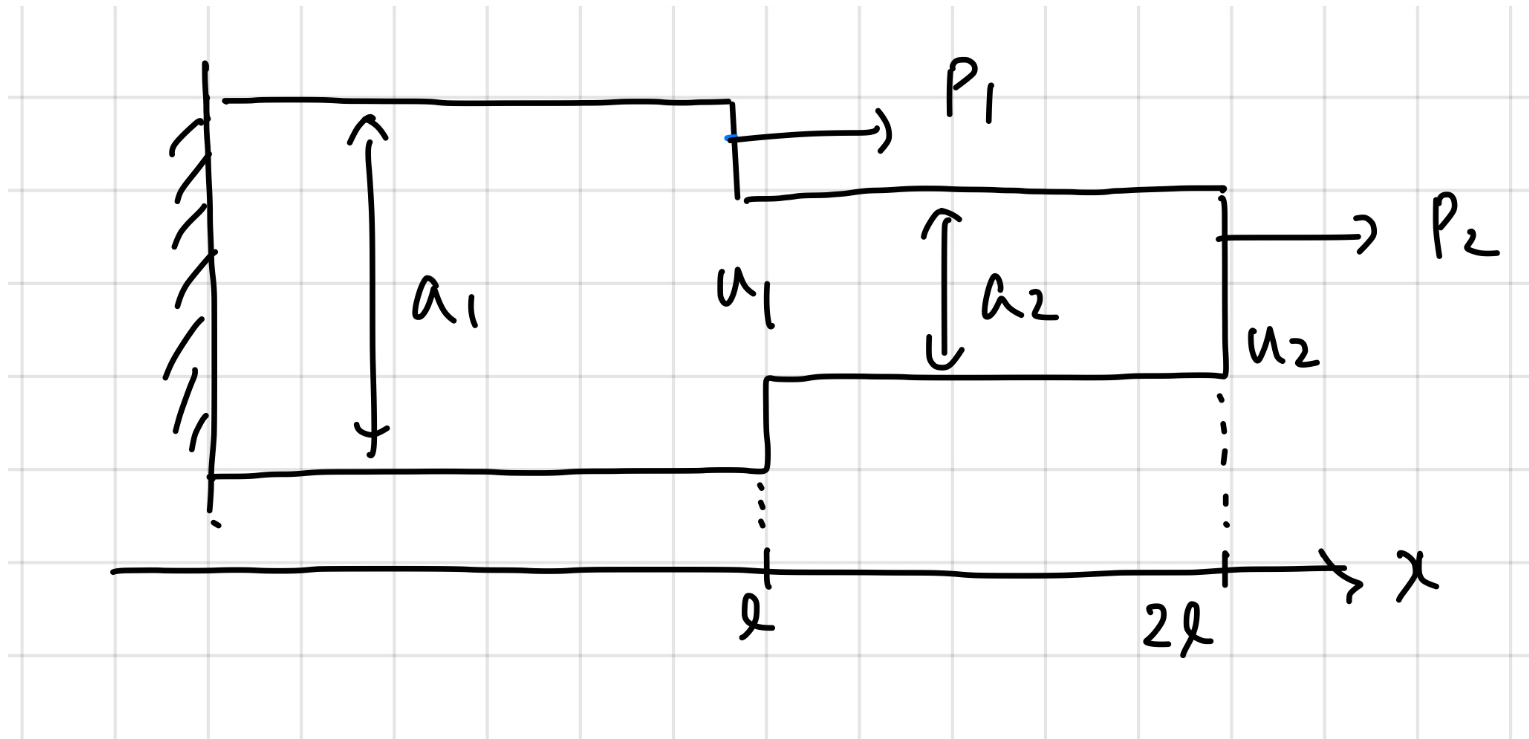
[復習] 力学的シンセシス (特に最適設計問題) で取り扱う問題の例：

Find $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2)^t$

such that $\min\ f(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{p}$

subject to K$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{p}$

$$a_1\ell + a_2\ell = c$$



目標：(非線形) 最適化理論の基礎を習得する

最適化問題の分類

最適化問題の一般形

設計変数 (design variable)

Find $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

目的関数 (objective function)

such that $\min\ f(\boldsymbol{x})$

不等式制約 (inequality constrain) の数

subject to $g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0$ for $i = 1, \cdots, m_\mathrm{i}$

等式制約 (equality constrain) の数

$h_i(\boldsymbol{x}) = 0$ for $i = m_\mathrm{i} + 1,\ \cdots,\ m_\mathrm{i} + m_\mathrm{e}\ (= m)$

with functions $f, g_i, h_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

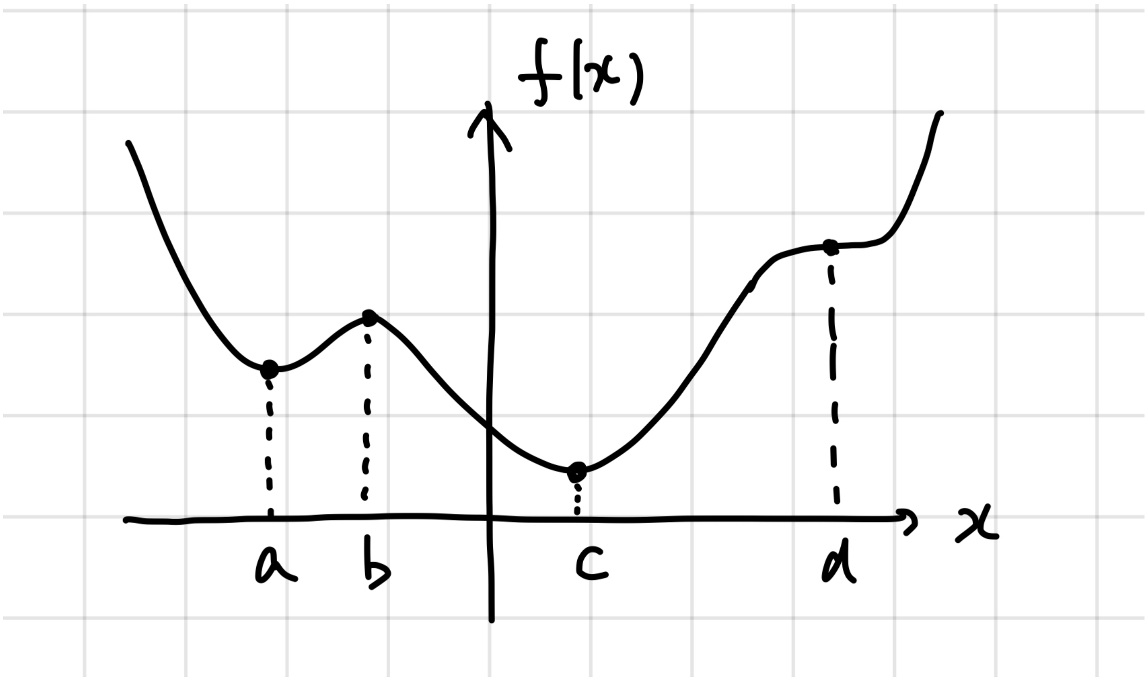
- $m_\mathrm{i} = m_\mathrm{e} = 0$: 制約なし最適化問題
- $m_\mathrm{i} \neq 0$ または $m_\mathrm{e} \neq 0$: 制約付き最適化問題

- f, g_i, h_i が全て一次関数: 線形最適化問題 (あるいは線形計画問題)
- f, g_i, h_i のいずれかが一次関数でない: **非線形最適化問題**
- $g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0$ が凸集合で, かつ h_i が一次関数: 凸最適化問題

最大化は?

制約なし最適化問題 1/4

1変数 (=設計変数の数が1) の場合: Find $x \in \mathbb{R}$ such that $\min\ f(x)$



- $x = a, b, c, d$ は**停留点**

$$\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = 0 \text{を満たす.}$$

- $x = a, c$ は**極小点 (局所的最適解)**

$$\frac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2} > 0 \text{を満たす.}$$

$$\text{cf.} \quad \frac{\mathrm{d}^2 f(b)}{\mathrm{d}x^2} < 0, \quad \frac{\mathrm{d}^2 f(d)}{\mathrm{d}x^2} = 0$$

- $x = c$ は**最小点 (大域的最適解)**

$$\forall x \in \mathbb{R},\ \ f(c) < f(x) \text{ を満たす.}$$

制約なし最適化問題 2/4

(板書)

制約なし最適化問題 3/4

n 変数 (=設計変数の数が n) の場合: Find $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ such that $\min\ f(\boldsymbol{x})$

- **停留点**: $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$ を満たす $\boldsymbol{x}^*$.
- **極小点 (局所的最適解):** 停留点かつHesse行列 $H_f(\boldsymbol{x}^*)$ が正定値となる $\boldsymbol{x}^*$

- **最小点 (大域的最適解):** $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n,\ f(\boldsymbol{x}^*) < f(\boldsymbol{x})$ を満たす $\boldsymbol{x}^*$.

  大域的最適解が見つかれば best だが, 多くの場合難しい.

制約なし最適化問題 4/4

戦略 1.

$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ かつ $H_f(\boldsymbol{x})$ が正定値となる点をいくつか探して，$f(\boldsymbol{x})$ が一番小さいものを選ぶ.

戦略 2.

$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ を満たす点をいくつか探して，$f(\boldsymbol{x})$ が一番小さいものを選ぶ.

戦略 3.

たくさんの $\boldsymbol{x}$ に対して $f(\boldsymbol{x})$ を計算して一番小さいものを選ぶ.

等式制約付き最適化問題 1/5

等式制約が1つの場合:

Find $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ such that $\min\ f(\boldsymbol{x})$ subject to $h(\boldsymbol{x}) = 0$.

$\downarrow$ 実行可能領域 $S = \{\boldsymbol{x} \mid h(\boldsymbol{x}) = 0\}$ を定義

Find $\boldsymbol{x} \in S$ such that $\min\ f(\boldsymbol{x})$.

問: **停留点** $\boldsymbol{x}^*$ はどのように特徴付けられるか？

(復習) 制約無しの場合:

$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0} \Leftrightarrow$ 任意の微小変動 $\Delta\boldsymbol{x} := \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*$に対して$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) \cdot \Delta\boldsymbol{x} = 0$.

等式制約がある場合:

$\boldsymbol{x} \in S$ を満たす微小変動 $\Delta\boldsymbol{x} := \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*$に対して$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) \cdot \Delta\boldsymbol{x} = 0$.

実行可能領域 $S = \{\boldsymbol{x} \mid h(\boldsymbol{x}) = 0\}$

等式制約付き最適化問題 2/5

$\boldsymbol{x} \in S$ を満たす微小変動 $\Delta \boldsymbol{x} := \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*$ ？

$\rightarrow h(\boldsymbol{x}^*) = 0$ かつ $h(\boldsymbol{x}) = h(\boldsymbol{x}^* + \Delta \boldsymbol{x}) = 0$

$$\Rightarrow h(\boldsymbol{x}^* + \Delta \boldsymbol{x}) = h(\boldsymbol{x}^*) + \nabla h(\boldsymbol{x}^*) \cdot \Delta \boldsymbol{x} + o(\|\Delta \boldsymbol{x}\|)$$

$$\Rightarrow \nabla h(\boldsymbol{x}^*) \cdot \Delta \boldsymbol{x} = 0$$

- 等式制約が1つの場合の**停留点** $\boldsymbol{x}^*$ の条件:

$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) \cdot \Delta \boldsymbol{x} = 0$ かつ $\nabla h(\boldsymbol{x}^*) \cdot \Delta \boldsymbol{x} = 0$

$\Leftrightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \lambda \nabla h(\boldsymbol{x}^*)$ なる $\lambda \in \mathbb{R}$ が存在する.

Lagrange乗数

- 等式制約が m 個の場合

Find $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ such that $\min f(\boldsymbol{x})$

subject to $h_i(\boldsymbol{x}) = 0$ for $i = 1, \cdots, m$.

の**停留点** $\boldsymbol{x}^*$ の条件:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla h_i(\boldsymbol{x}^*)$$ を満たす $\lambda_i \in \mathbb{R}$ $(i = 1, \cdots, m)$ が存在する.

等式制約付き最適化問題 3/5

Lagrange定数の意味?

例題

Find $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

such that $\min \ f(\boldsymbol{x})$

subject to $h_i(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j - b_j = 0$ for $i = 1, \ \cdots, \ m$

($\Leftrightarrow$ A$\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$, with A $\in \mathbb{R}^{m \times n}$.)

Q1. $\nabla h_i(\boldsymbol{x})$ の第 k 成分を求めよ.

Q2. Lagrange定数を並べたベクトル $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ の満たす式を導け.

等式制約付き最適化問題 4/5

Lagrange定数の意味?

例題

Find $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

such that $\min \ f(\boldsymbol{x})$

subject to $h_i(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_j - b_j = 0$ for $i = 1, \cdots, m$

($\Leftrightarrow$ A$\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$, with A $\in \mathbb{R}^{m \times n}$.)

(Quizの解答)

等式制約付き最適化問題 5/5

Lagrange定数の意味?

$\min\ f(\boldsymbol{x})$ subject to A$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解 $\boldsymbol{x}^*$ を知っていて,
制約条件が A$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} + \boldsymbol{\delta}$ と変わった時の $f(\boldsymbol{x})$ の最小値を知りたい.

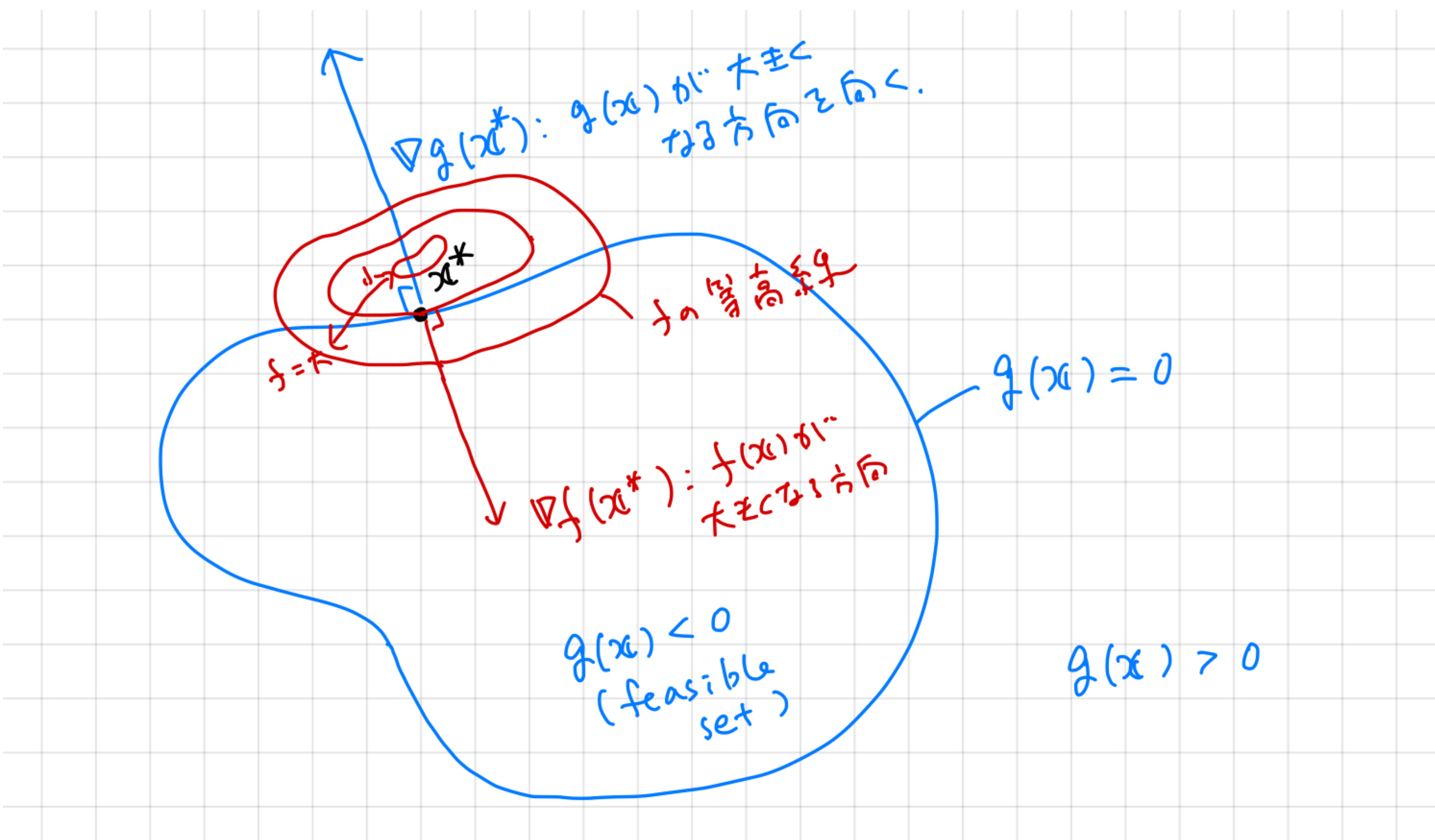
$f(\boldsymbol{x}) \simeq f(\boldsymbol{x}^*) + \boldsymbol{\delta}^t \boldsymbol{\lambda}$ と書けて, $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ は**等式制約の右辺に対する $f(x)$ の最小値の感度**を表していることが分かる.

不等式制約付き最適化問題 1/2

不等式制約が1つの場合:

$$\text{Find } \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \text{ such that } \min\ f(\boldsymbol{x}) \text{ subject to } g(\boldsymbol{x}) \leq 0.$$

- $g(\boldsymbol{x}^*) < 0$ を満たす停留点では:　$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$
- $g(\boldsymbol{x}^*) = 0$ を満たす停留点では:　$\lambda \geq 0$ が存在して $-\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \lambda \nabla g(\boldsymbol{x}^*)$



不等式制約付き最適化問題 2/2

不等式制約が1つの場合:

Find $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ such that $\min\ f(\boldsymbol{x})$ subject to $g(\boldsymbol{x}) \leq 0$.

- $g(\boldsymbol{x}^*) < 0$ を満たす停留点では: $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$
- $g(\boldsymbol{x}^*) = 0$ を満たす停留点では: $\lambda \geq 0$ が存在して $-\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \lambda \nabla g(\boldsymbol{x}^*)$

➡ まとめ

1つの不等式制約付き最適化問題の局所最適解 $\boldsymbol{x}^*$ において
ある数 λ が存在して, 以下を満たす:

$$-\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \lambda \nabla g(\boldsymbol{x}^*)$$

$$\lambda g(\boldsymbol{x}^*) = 0, \quad \lambda \geq 0$$

$$g(\boldsymbol{x}^*) \leq 0$$

等式＆不等式制約付き最適化問題

Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 条件

Find $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

such that $\min f(\boldsymbol{x})$

subject to $g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0$ for $i = 1, \cdots, m_\mathrm{i}$

$h_i(\boldsymbol{x}) = 0$ for $i = m_\mathrm{i} + 1, \ \cdots, m_\mathrm{i} + m_\mathrm{e} \ (= m)$

with functions $f, g_i, h_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ に対して, $\boldsymbol{x}^*$ が局所最適解であり,

$\{\nabla g_1(\boldsymbol{x}^*), \cdots, \nabla g_{m_\mathrm{i}}(\boldsymbol{x}^*), \nabla h_1(\boldsymbol{x}^*), \cdots, \nabla h_{m_\mathrm{e}}(\boldsymbol{x}^*)\}$ が一次独立であるとする.

このとき, $\lambda_1, \cdots, \lambda_{m_\mathrm{i}}, \mu_1, \cdots, \mu_{m_\mathrm{e}} \in \mathbb{R}$ が存在して, 以下を満たす:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{m_\mathrm{e}} \lambda_i \nabla g_i(\boldsymbol{x}^*) + \sum_{i=1}^{m_\mathrm{i}} \mu_i \nabla h_i(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$\lambda_i g_i(\boldsymbol{x}^*) = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad g_i(\boldsymbol{x}^*) \leq 0.$$

$$h_i(\boldsymbol{x}^*) = 0$$