力学的シンセシス (5)

システムデザイン工学科
飯盛 浩司

はじめに

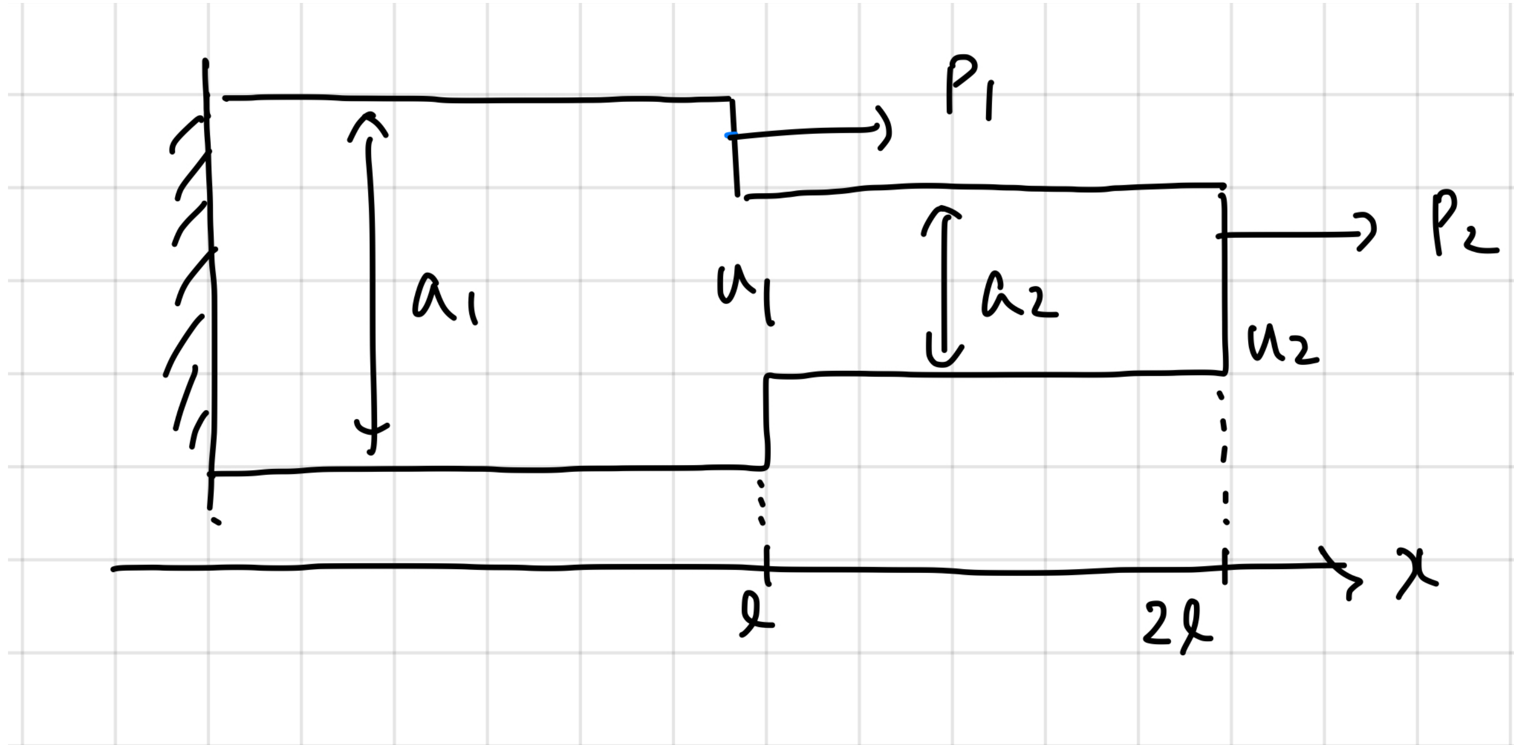
[解きたい問題] 力学的シンセシスで取り扱う問題の例：

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

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

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

$a_1 \ell + a_2 \ell \leq c$



前回, 随伴変数法を学び, 等式制約を満たす設計変数に対して ∇f を計算できるようになった. →不等式制約さえ別で考慮すれば良い. 以降,

Find $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^t$

such that $\min\ f(\boldsymbol{x})$ subject to $g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0$ (for $i = 1, \cdots, m$)

の数値計算法を学ぶ. **今日の目標: 制約付き最適化問題の数値解法**を知る.

有効制約法(KKT条件を使う) 1/3

[例題]

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^t\mathrm{Q}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}^t\boldsymbol{x} \text{ subject to } g_i(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} \mathrm{A}_{ij}x_j - b_i \leq 0 \text{ (for } i = 1,\cdots,m)$$

ただし, $\mathrm{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ は正定値対称行列とする.

Q1: ∇f を計算せよ.

Q2: $y_i \ (i = 1,\cdots,m)$ をLagrange乗数とし, KKT条件を導け.

有効制約法(KKT条件を使う) 2/3

ある実行可能解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ があったとし, $\sum_{j=1}^{n} A_{ij}\hat{x}_j = b_i$ を満たす i の集合を I と書く.

つまり, $i \in I$ ならば $\sum_{j=1}^{n} A_{ij}\hat{x}_j = b_i$, $i \notin I$ ならば $\sum_{j=1}^{n} A_{ij}\hat{x}_j < b_i$.

$i \notin I$ ならば $y_i = 0$ なので, 以下が成り立つ:

$$\sum_{j \in I} A^t{}_{ij} y_j + \sum_{j=1}^{n} Q_{ij}\hat{x}_j - c_i = 0. \qquad \cdots \mathrm{A}$$

一方, b_i のうち $i \in I$ だけを並べたベクトルを $\hat{\boldsymbol{b}}$ と書くと

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij}\hat{x}_j = \hat{b}_i\,. \qquad \cdots \mathrm{B}$$

A, Bを並べて, $\begin{pmatrix} \mathrm{Q} & \mathrm{A}^t \\ \mathrm{A} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{x}} \\ \hat{\boldsymbol{y}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{c} \\ \hat{\boldsymbol{b}} \end{pmatrix}.$

有効制約法(KKT条件を使う) 3/3

有効制約法

0. $\boldsymbol{x}^{(0)} \in$ (実行可能領域)を与える. $I^{(0)}$ を計算. $k = 0$ とする.

1. $\begin{pmatrix} \mathrm{Q} & \mathrm{A}^t \\ \mathrm{A} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{x}} \\ \hat{\boldsymbol{y}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{c} \\ \hat{\boldsymbol{b}} \end{pmatrix}$ を解く. $\hat{\boldsymbol{x}}$ が実行可能解ならば $\boldsymbol{x}^{(k)} \leftarrow \hat{\boldsymbol{x}}^{(k)}$ とし3へ.

2. $\sum_{j=1}^{n} {A^t}_{ij}(x_j^{(k)} + t(\hat{x}_j^k - x_j^{(k)})) \le b_i$ を満たす最大の t を探し,
   $\boldsymbol{x}^{(k)} \leftarrow \boldsymbol{x}^{(k)} + t(\hat{\boldsymbol{x}}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k)})$ とする. さらに, $I^{(k)}$ を更新.
   (全ての制約に違反しない範囲で $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を $\hat{\boldsymbol{x}}^{(k)}$ に近づける)

3. $\hat{\boldsymbol{y}}^{(k)} \ge \boldsymbol{0}$ ならば $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を最適解として出力.
   そうでなければ, $\hat{\boldsymbol{y}}^{(k)}$ の一番小さい成分のindexを $I^{(k)}$ から除き1へ.

罰金法

罰金法

Find $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^t$ $\min\ f(\boldsymbol{x})$ subject to $g_i(\boldsymbol{x}) \le 0$ (for $i = 1, \cdots, m$)

を直接解くのではなく, 以下の無制約問題

Find $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^t$ $\min\ f(\boldsymbol{x}) + \rho \sum_{i}^{m} \max\ (0, |g_i(\boldsymbol{x})|^2)$

を(反復法で)解く.

Note: 初期値 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ は実行可能解である必要はない.

罰金の係数 ρ はステップ毎に大きくしていくのが良い.

まとめ

反復法

0. $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n,\ 0 < C_A < C_W < 1,\ \varepsilon > 0,\ \alpha^{(0)} > 0$ を与える. $k = 0$ とする.

1. 終了条件を満たすなら $\boldsymbol{x}^{(k)}$ を最適解として出力.

2. **探索方向 $\boldsymbol{d}^{(k)}$** $\in \mathbb{R}^n$ を最急降下法や(準)Newton法で計算.

3. $\alpha^{(k)}$ が**Armijoのルール** $f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \le f(\boldsymbol{x}^{(k)}) + C_A \alpha \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \boldsymbol{d}^{(k)}\ (< f(\boldsymbol{x}^{(k)}))$ を満たさないなら, 満たすまで $\alpha^{(k)} \leftarrow \alpha^{(k)}/(1+\varepsilon)$ とする (減速).

4. $\alpha^{(k)}$ が**Wolfeのルール** $\nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha \boldsymbol{d}^{(k)}) \cdot \boldsymbol{d}^{(k)} \le C_W \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \boldsymbol{d}^{(k)}$を満たさないなら, $\alpha^{(k)} \leftarrow \alpha^{(k)}/(1-\varepsilon)$ として, 2に戻る (加速).

5. $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \boldsymbol{d}^{(k)}$ と設計変数を更新.
   $\rho \leftarrow \rho/(1-\varepsilon),\ k \leftarrow k+1$ として1.に戻る.

おまけ

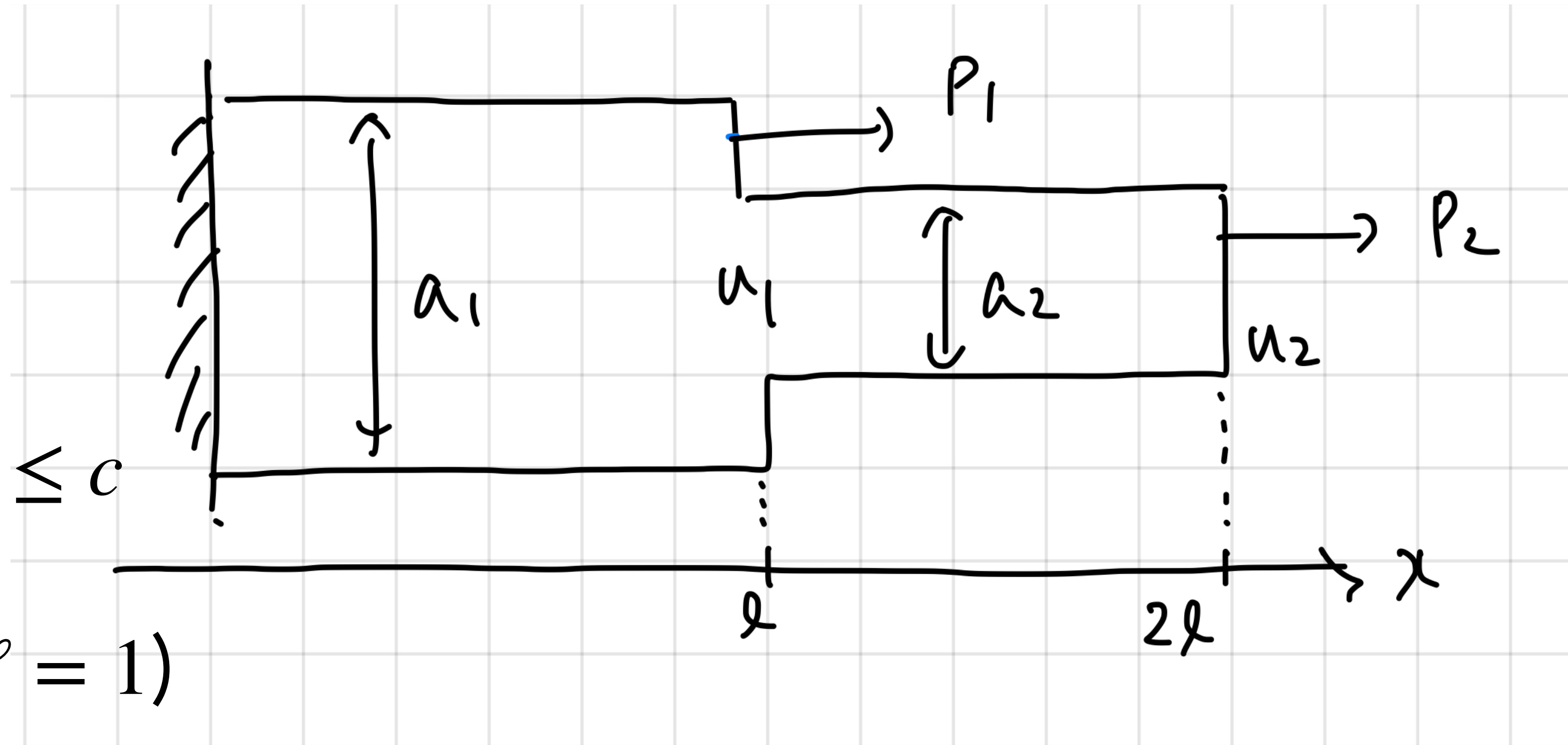
Find $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_n)^t$

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

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

$$\sum_{j=1}^{n} a_j \times (2\ell)/n \leq c$$

$(c = p_i = E = \ell = 1)$



を随伴変数法+罰金法+最急降下法+Armijo&Wolfe rule を使って解いた例