４．最適化手法と近似手法

４．１　全体近似法と最適化手法

応答曲面法は基本的にテイラー展開と同じであり，未知関数を２次までのテイラー展開する場合が２次応答曲面に相当する．例えば，２次項までテイラー展開したときの近似関数は次式になる．

$$\hat{f}(x)=f(x_0)+\sum_{i=1}^{k}\frac{\partial f(x_0)}{\partial x_i}(x_i-x_i^0)+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{k}\frac{\partial^2 f(x_0)}{\partial x_i\partial_j}(x_i-xx_i^0)(x_j-x_j^0) \qquad (4.1.1)$$

これは，x_0 周辺の２次応答曲面の係数が関数の偏微分で決定されることを意味している．つまり，基本的には微分可能な連続関数であれば必ず狭い領域では２次の応答曲面で近似可能である．実際には微分可能でなくても，最小２乗の原理にしたがって，およその値を用いて適切な間隔の範囲内であればせいぜい２次多項式で十分な精度で近似可能である．

近似がうまく行かない場合の多くは，設計者が十分狭い間隔と感じている変数の領域が実際の応答の変化にとっては広い領域であり，大きな応答変化がある場合である．

したがって，現状の状態からわずかな変更を行うだけであれば，変更可能な変数範囲全体を一つの応答曲面に近似しても十分な精度が得られる．あるいは，変数変換などを用いて，凹凸の少ない非線形性の少ない関数に変換できれば全体を一つの応答曲面で近似できる．このような近似が可能であれば，残る問題は最適化だけである．

ここでは例として２次計画法の最急降下法とニュートン法による最適化手法を示す．なお，関数 f と制約条件が全て１次関数であれば，線形計画法によって最適化可能となる．詳細については参考文献[1][2]を参照されたい．

i)最急降下法（Steepest Descent Method）

関数 f を最小化する問題を考える．関数 f は変数 k 個からなる微分可能な関数である．f の偏微分係数を要素とする k 次元ベクトルを点 x における関数 f の勾配(gradient)は次式となる．

$$\nabla f(x)=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial f(x)}{\partial x_1}\\ \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_2}\\ \vdots\\ \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_k}\end{pmatrix} \qquad (4.1.2)$$

この勾配ベクトルの方向は関数 f の点 x における傾き最大の方向であり，その点での等高線の法線方向となっている．したがって，$-\nabla f(x)$方向は関数 f の値を最も減少させる方向である．最急降下法はこの方向に最小点を探索し，繰返し計算で最小値に到達する手法である．点 $x^{(m)}$の次の候補点 $x^{(m+1)}$は次式で与えられる．

$$x^{(m+1)}=x^{(m)}+\alpha^{(m)}\left(-\nabla f(x^{(m)})\right) \qquad (4.1.3)$$

ここで，α は f を最小化するステップ幅であり，直線探索で与えられる．

最急降下法は簡単であるが，収束が非常に遅いという欠点を持つ．

ii)ニュートン法

ニュートン法は関数が十分最適解近傍で２次関数にテイラー展開可能である．式(4.1.1)に示すように２次のテイラー展開を行う．簡単のため，ｄ＝x-x_0とおくと，式(4.1.1)は次式に書きなおすことができる．ただし，$x_0 = x^{(m)}$とした．

$$g^{(d)}(d) = f(x^{(m)}) + \nabla f(x^{(m)})d + \frac{1}{2}d^T\nabla^2 f(x^{(m)})d \tag{4.1.4}$$

式（4.1.4）はｄについて２次関数であり，g(d)を最小にするｄは次式を満たす点として与えられる．

$$\nabla g^{(m)}(d) = \nabla f(x^{(m)}) + \nabla^2 f(x^{(m)})d = 0 \tag{4.1.5}$$

$$d^{(m)} = -\nabla^2 f(x^{(m)})^{-1}\nabla f(x^{(m)}) \tag{4.1.6}$$

したがって，$x^{(m)}$から$d^{(m)}$だけ移動した点$x^{(m+1)} = x^{(m)} + d^{(m)}$は関数ｆの最小値である．ニュートン法はこの方法を繰り返して最小値を求める．

簡単な例として，参考文献[1]にあげられている２変数の４次間数 f(x)の最小化を解く問題を示す．

$$f(x) = (x_1 - 1)^2 + 10(x_1^2 - x_2)^2 \tag{4.1.7}$$

この問題の最適解は x=(1,1)で f=0 である．初期値を x=(0,1)とした場合，最急降下法では５００回の繰返しでも近似解 x=(0.99838,0.99669)に達するだけであるが，ニュートン法ではわずか６回の繰返しで正解に達する．

ニュートン法は式(4.1.6)においてヘッセ行列と呼ばれる$\nabla^2 f(x)$の逆数が必要であり，全ての場合に適用できるわけではない．ニュートン法のいくつかの欠点を修正した手法が準ニュートン法であり，多くの非線形計画に適用される．以下に準ニュートン法を利用した Microsoft　Excel による最適化の例を示す．

iii)準ニュートン法の例題

Micorsoft Excel のソルバー機能を用いて次の応答曲面の最小値を求めよ．

$$y = 1 + 0.5x_1 - 2x_2 - 0.2x_1^2 + 3x_2^2 + 0.4x_1x_2$$

$$0 \le x_1,\ x_2 \le 1$$

解答

Excel のセル A,B,C に以下の通りに代入する．

	A	B	C
1	X1	X2	Y
2	0.5	0.5	=1+0.5*A2-2*B2-0.2*A2*A2+3*B2*B2+0.4*A2*B2

セル A2 は変数 x_1，セル B2 は変数 x_2，セル C２は応答ｙである．

ツールメニューのソルバーを起動し（ソルバーはデフォルトではインストールされないので追加インストールが必要）目的セルを C2，変化させるセルを A2:B2 とする．最小ボタンをチェックする．制約条件の追加を指定し，A2≦１，A2≧０，B2≦１，B2≧０を入力して実行ボタンを押す．

最小値は x1=0，x2=0.33333，y=0.66667 となる．

注意：Excel のソルバー機能はデフォルトではインストールされない．したがって，Excel のツールメニューにソルバーが無い場合には，Office か Excel の CD-ROM を入れて追加インストールで Excel のソルバーをインストールしなければならない．

４．２ 応答曲面近似の改善手法

応答曲面法において，大きな問題点は応答の近似精度である．非線形性が強い問題や，設計空間中にスパイク状の変化があるような複雑な設計空間では，応答の近似精度が悪化してしまう．このような場合にいくつかの対応策がある．これには，拡大近似手法，領域分割近似，高次多項式近似がある．

拡大近似手法では多段階に応答曲面を作成する．これは全体応答曲面では設計空間をおよそ近似可能であるが近似精度に不満が残るような場合に適用される．全体を近似する全体応答曲面で最適点候補を求めた後に，最適点候補周囲だけの拡大応答曲面を作成し，真の最適点を探索する手法である．拡大範囲は急激に拡大することは危険であり，全体の 1/2 から 1/5 程度が良い．拡大応答曲面での最適点は拡大応答曲面の適用範囲に含まれていることを確認する必要がある．

応答曲面は別の観点では先に述べたように，未知関数の Taylor 展開と同じである．複雑な設計空間でも，微分可能であれば分割された小領域では１次，２次や３次などの多項式で十分近似可能である．設計空間を複数の小領域に分割し，その領域内で応答曲面を作成して最適化を実施し，最適点の候補を求め，その集合から最適な点を選択する手法である．この方法は微分可能なスパイク状の変化がある設計空間でも適用可能であり，非常に複雑な空間にも適用可能である．しかし，領域の分割方法に注意が必要であり，少なくとも想定されるスパイク状の変化が推定される領域の大きさ程度に小さく分割する必要がある．このような場合には非常に多数点の応答を求める必要がある．領域分割と多段応答曲面を使用すれば，設計空間が微分可能な限り理論的にはどのような複雑な設計空間でも高精度で近似可能であり，最適解が得られる．ただし，微分不可能な関数，例えばインパルス関数のような場合には近似できない．しかし，このような場合には，むしろ最適解はわずかな変数の変動で急激に変化するため，実用的なロバスト性を有していないので実用的な最適解ではない．

設計空間の概形が既知である場合には，それを利用して領域を分割することが可能である．例えば，y=f(x)の関数近似で応答ｙがおよそ山が３つある場合には，２次多項式で３つの領域に分割することで，精度の良い近似が低次の多項式で可能である．このような場合，高次多項式を用いることも選択肢の一つであり，高次多項式を用いるほうが実験点は少なくなる．しかし，高次多項式では，高次の交互作用項が一般に適用されており，これは実験に誤差が多く含まれる場合には，ごくわずかな変数の変動も大きな応答変化に近似してしまう．このような観点から，一般には高次多項式は危険であり，領域分割した低次の多項式による応答曲面が有効である．例外的に，変数がおよそ３次多項式になっていることが既知であるとか，変数の高次項は含まれるが，高次の交互作用項はないということが明らかな場合には高次多項式も有効である．

参考文献

[1]福島雅夫,「システム制御情報ライブラリー　数理計画入門」，朝倉書店 (1996)
[2]山川宏,「計算力学と CAE シリーズ９　最適化デザイン」，培風館，（1993）