目 次

第 7 章　抽象的最適設計問題 **3**
7.1　設計変数の線形空間 4
7.2　状態決定問題 5
7.3　抽象的最適設計問題 6
7.4　最適解の存在 7
7.5　評価関数の微分 10
7.5.1　随伴変数法 12
7.5.2　Lagrange 乗数法 13
7.5.3　評価関数の 2 階 Fréchet 微分 14
7.5.4　Lagrange 乗数法による評価関数の 2 階 Fréchet 微分 16
7.6　評価関数の降下方向 17
7.6.1　抽象的勾配法 17
7.6.2　抽象的 Newton 法 19
7.7　抽象的最適設計問題の解法 20
7.7.1　制約つき問題に対する勾配法 20
7.7.2　制約つき問題に対する Newton 法 24
7.8　第 7 章のまとめ 26

第7章　抽象的最適設計問題

偏微分方程式の境界値問題とはどのような構造をしていてどのようにして解くことができるのかを第5章と第6章でみてきた．第1章でみてきた最適設計問題に対応させてみれば，状態決定問題についてみてきたことになる．本章からはいよいよ，境界値問題が定義された領域の形状や位相を設計対象にした最適設計問題について考えていきたい．本章では両問題に共通するような抽象的な問題を構成して，その解法について考えてみたい．

第1章において，最適設計問題の基礎についてみてきた．そこで扱われた問題では設計変数の線形空間と状態変数の線形空間は共に有限次元ベクトル空間であった．本章では，それらの有限次元ベクトル空間を関数空間に拡張する．また，状態決定問題を抽象的変分問題におきかえる．そのときに注意することは次の点である．有限次元ベクトル空間の双対空間は同じ有限次元ベクトル空間であった．そのために，設計変数の変動に対する評価関数の微分は設計変数と同じ有限次元ベクトル空間の要素であった．しかし，関数空間のようなベクトル空間をえらんだ場合には，その双対空間は，一般には，別のベクトル空間になる．この章ではそのことに注意する必要がある．しかし，それ以外は，第1章でみてきた最適解が満たす条件と同様の結果が得られることになる．

さらに，数値解法 (アルゴリズム) に関しては，第3章で示された勾配法と Newton 法が拡張された抽象的勾配法と抽象的 Newton 法が定義される．それらの解を用いれば，第3章で示されたものと同様の制約つき問題に対する勾配法や Newton 法が考えられる．そうなれば，第3章で示されたアルゴリズムを使って，対応する項目をおきかえるだけで抽象的最適設計問題の数値解法も構成されることになる．

そこで，本章の内容が理解されれば，位相や形状最適化問題の構成法と解法は，抽象的最適設計問題の枠組みの中でそれらの問題に対する関数空間や許容集合を具体化する作業となる．その際，設計変数の変動に対する評価関数の Fréchet 微分の計算法を明らかにして，それを用いた抽象的勾配法や抽象的 Newton 法の解が設計変数の許容集合に入ることを確認することが焦点となる．それらについては第8章と第9章で問題ごとにみていくことにする．

7.1 設計変数の線形空間

第 1 章でみてきた最適設計問題を思いだしながら，最適設計問題を抽象化していくことを考える．ここでは，段つき 1 次元線形弾性体の平均コンプライアンス最小化問題 (問題 1.1.4) を使って，抽象的最適設計問題との対応をみていくことにしよう．

問題 1.1.4 では，設計変数の線形空間を $X = \mathbb{R}^2$ とおき，状態変数の線形空間を $U = \mathbb{R}^2$ とおいた．本章では，X と U は関数空間であってもよいとする．そのとき，X の要素が与えられたならば，状態決定問題が構成されて，U の要素として状態変数が決定され，$X \times U$ 上で定義された評価関数 (汎関数) も計算されるものとする．このとき，第 3 章でみてきたような勾配や Hesse 形式を用いた解法を考えた場合，X と U は Fréchet 微分が定義できるような関数空間である必要がある．さらに，後で示される抽象的勾配法 (問題 7.6.1) や抽象的 Newton 法 (問題 7.6.4) による解法までを考えるならば，X は実 Hilbert 空間であることが必要となる．そこで，本章では，次のように仮定することにしよう．

第 8 章と第 9 章で示される最適化問題では，偏微分方程式の境界値問題が定義された領域が設計対象となる．その際，第 5 章で示されたように，偏微分方程式の境界値問題が定義されるためには，領域は少なくとも Lipschitz 境界 (A.5 節) でなければならない．第 8 章と第 9 章では密度や領域写像を表す関数が設計変数に選ばれる．その際，それらの関数を使って Lipschitz 境界が定義されるためには，それらの関数が入る関数空間 Y は，少なくとも $C^{0,1}$ 級であることが必要となる．さらに，7.4 節で示すように，最適解が存在するためには，Y は X にコンパクトに埋蔵 ($Y \Subset X$) される必要がある．実際，第 8 章では，$d \in \{2, 3\}$ 次元の有界領域 D に対して，$X = H^1 (D; \mathbb{R})$ と $Y = H^2 (D; \mathbb{R}) \cap C^{0,1} (D; \mathbb{R})$ が選ばれる．第 9 章では，有界領域 $D \subset \mathbb{R}^d$ に対して，$X = H^1 \left(D; \mathbb{R}^d\right)$ と $Y = H^2 \left(D; \mathbb{R}^d\right) \cap C^{0,1} \left(D; \mathbb{R}^d\right)$ が選ばれる．$Y \Subset X$ は Rellich-Kondrachov のコンパクト埋蔵定理 (定理 4.4.15) によって保証される．さらに，設計変数の許容集合 $\mathcal{D}$ は，Y の要素に対して，有界の条件を課した関数の集合と定義する．

そこで，本章では，設計変数を ϕ とかくことにして，ϕ は $\mathcal{D} \subset Y \Subset X$ の要素であるとする．さらに，$\mathcal{D}$ における有界の制約は，第 1 章において側面制約とよんだ条件に対応するので，本章以降で，勾配法や Newton 法を考える場合には，ϕ は $\mathcal{D}$ の内部 $\mathcal{D}^\circ$ にあると仮定する．有界の制約が有効になった場合には，不等式制約の一つとして考慮されるものとする．また，設計変数の変動を $\varphi \in X$ (第 9 章では $\varphi \in Y$) と仮定して，任意の φ に対する関数や汎関数の Fréchet 微分を X の双対空間 X' (定義 4.4.5) の要素として定義する．

7.2　状態決定問題

問題 1.1.4 の最適設計問題では，状態変数は $\boldsymbol{u}$ で定義され，$\boldsymbol{a} \in \mathcal{D}$ が与えられたときに状態決定問題 (問題 1.1.3) の解として一意に決定されるように構成されていた．$\boldsymbol{u}$ が入る線形空間は $U = \mathbb{R}^2$ であった．

本章では，状態変数を u とかくことにして，u は設計変数 $\phi \in \mathcal{D}$ が与えられたときに，次のような抽象的変分問題によって与えられた状態決定問題の解として一意に決定されるものとする．この問題は問題 5.2.3 と同じであるが，双 1 次形式 a や 1 次形式 l が ϕ に依存していることから，それぞれ $a(\phi)$ や $l(\phi)$ のようにかきかえられている．問題 5.2.3 と同様に，U は実 Hilbert 空間とする．

問題 7.2.1 (ϕ に対する抽象的変分問題) $\phi \in \mathcal{D}$ に対して $a(\phi)\colon U \times U \to \mathbb{R}$ を強圧的かつ有界な双 1 次形式 U 上の双 1 次形式，$l(\phi) = l(\phi)(\cdot) = \langle l(\phi), \cdot \rangle \in U'$ とする．このとき，任意の $v \in U$ に対して

$$a(\phi)(u, v) = l(\phi)(v)$$

を満たす $u \in U$ を求めよ．□

問題 7.2.1 を次のようにかくことにする.「$\tau(\phi) : U \to U'$ を $a(\phi)(\cdot, \cdot)$ を強圧的かつ有界な双 1 次形式とみなしたときの Lax-Milgram の定理 (定理 5.2.4) によって与えられる同型写像，$l(\phi) \in U'$ を既知項とする．このとき，

$$s(\phi, u) = l(\phi) - \tau(\phi) u = 0_{U'} \tag{7.2.1}$$

を満たす $u \in U$ を求めよ.」なお，第 5 章の例題 5.2.5 で示されたように，非同次 Dirichlet 問題は，式 (7.2.1) の $u \in U$ を $\tilde{u} = u - u_{\mathrm{D}} \in U$ におきかえることによって抽象的変分問題に入る．このとき，$l(\phi)$ は $\hat{l}(\phi) = l(\phi) - \tau(\phi) u_{\mathrm{D}}$ におきかえられて，

$$s(\phi, \tilde{u}) = \hat{l}(\phi) - \tau(\phi) \tilde{u} = 0_{U'} \tag{7.2.2}$$

となる．本章では，簡単のために，式 (7.2.1) を用いることにする．

また，のちに注意 7.6.3 で示されるように，設計変数の変動に対する評価関数の Fréchet 微分が定義されるためには，問題 7.2.1 の解 u は状態変数の許容集合 $\mathcal{S} \subset U$ の要素に入ることが要請される．それが満たされるためには，既知項 $l(\phi)$ や領域の正則性などを適切に設定することが必要となる．それらの条件については，具体的な最適設計問題に応じて，第 8 章と第 9 章の中で示すことにする．ここでは，設計変数 u は $\mathcal{S}$ の要素として得られることを仮定する．

このような設定の下で，第 1 章の状態決定問題 1.1.3 のときと同様に，$v \in U$ を随伴変数 (あるいは Lagrange 乗数) として，

$$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\phi, u, v) = -a(\phi)(u, v) + l(\phi)(v) \tag{7.2.3}$$

を問題 7.2.1 の 状態決定問題に対する Lagrange 関数とよぶことにする．なお，Lagrange 関数で使われる $\boldsymbol{u}$ は状態決定問題の解である必要はないものとする．ただし，任意の $v \in U$ に対して

$$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\phi, u, v) = 0 \tag{7.2.4}$$

を満たす $u \in U$ は，問題 7.2.1 の弱解と同値となる．

7.3 抽象的最適設計問題

問題 1.1.4 では，評価関数 f_0 と f_1 は設計変数と状態変数の関数として定義された．ここでは，7.1 節で定義された設計変数の許容集合 $\mathcal{D} \subset X$ と 7.2 節で定義された状態変数の許容集合 $\mathcal{S} \subset U$ 上で定義された汎関数 $f_0, \cdots, f_m$ を評価関数とおいて，抽象的最適設計問題を次のように定義する．

問題 7.3.1 (抽象的最適設計問題) $(\phi, u) \in \mathcal{D} \times \mathcal{S}$ に対して，$f_0, \cdots, f_m : \mathcal{D} \times \mathcal{S} \to \mathbb{R}$ が与えられたとき，

$$\min_{(\phi, u) \in \mathcal{D} \times \mathcal{S}} \{ f_0(\phi, u) \mid f_1(\phi, u) \le 0, \ldots, f_m(\phi, u) \le 0,\ \text{問題 7.2.1} \}$$

を満たす ϕ を求めよ． □

問題 7.3.1 は図 2.1 から図 2.3 を用いて，次のように考えることができる．X が実 Hilbert 空間になってもこれらの図中の平面のイメージを変更する必要はない．さらに，$\mathcal{D}$ は X の要素に対して，滑らかさなどの制約条件が課されているのみで，直接 X のノルムを使った制約条件が課されていない場合は，やはり X と同様の平面のイメージになる．しかし，そのときの平面は，実数の中の有理数の集合のような，滑らかさなどの制約条件を満たす要素のみからなる平面になると考えられる．なお，第 2 章で設計変数の許容集合とよんだ式 (2.1.1) の集合 S は，本章では，

$$\begin{aligned} S = \big\{ (\phi, u(\phi)) \in \mathcal{D} \times \mathcal{S} \mid f_1(\phi, u(\phi)) \le 0, \cdots, f_m(\phi, u(\phi)) \le 0, \\ s(\phi, u) = 0_{U'} \big\} \end{aligned} \tag{7.3.1}$$

に置き換えられることになる．この集合は，図 2.1 から図 2.3 の中で，$f_1 \le 0$ と $f_2 \le 0$ を満たす平面上の集合のイメージになる．

今後，問題 7.3.1 に対して評価関数の Fréchet 微分や KKT 条件についてみていくことにする．その際，いくつかの意味で Lagrange 関数の用語が使われる．ここでは，混乱をきたさないように，それらの関係をまとめておくことにしよう．問題 7.3.1 に対する Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}(\phi, u, v_0, v_1, \cdots, v_m) = \mathscr{L}_0(\phi, u, v_0) + \sum_{i \in \{1, \cdots, m\}} \lambda_i \mathscr{L}_i(\phi, u, v_i) \tag{7.3.2}$$

とかく．ただし，$\boldsymbol{\lambda} = \{\lambda_1, \cdots, \lambda_m\}^\top$ は $f_1 \leq 0, \cdots, f_m \leq 0$ に対する Lagrange 乗数である．さらに，評価関数 f_i が状態決定問題 (問題 7.2.1) の解 u の汎関数として与えられている場合には，

$$\mathscr{L}_i(\phi, u, v_i) = f_i(\phi, u) + \mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\phi, u, v_i) \tag{7.3.3}$$

を $f_i(\phi, u)$ に対する Lagrange 関数という．ここで，$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}$ は式 (7.2.3) で定義された問題 7.2.1 に対する Lagrange 関数である．また，v_i は，f_i に対して定義される Lagrange 乗数である．f_i に，たとえば Poisson 問題に対して $\int_{\Gamma_{\mathrm{D}}} v_{\mathrm{D}i} \partial_\nu u \, \mathrm{d}\gamma$ のような Dirichlet 境界上の境界積分が含まれるときには，$\tilde{v}_i = v_i - v_{\mathrm{D}i}$ が U の要素であると仮定する．詳細については第 8 章と第 9 章で示される．以下では，簡単のために，f_i に Dirichlet 境界上の境界積分が含まれないと仮定して，v_i は U の要素であると仮定することにする．

7.4　最適解の存在

抽象的最適設計問題 (問題 7.3.1) が定義されたので，その問題に対して解が存在することを確認しておこう．それを考えるための基本原理は，第 2 章で示した Weierstrass の定理 (定理 2.3.2) に示されている．本節ではそれに対応する抽象的最適設計問題に対する定理について考える．ここで使われる概念は文献 [2, Section 2.3, p. 38, Section 2.4, p. 45] に詳しく示されている．

第 2 章で考えた最適化問題では，設計変数のみで評価関数が定義されていた．それに対して，最適設計問題では設計変数 ϕ とそれによって決定される状態変数 $u(\phi)$ の関数として評価関数が定義されている．そこで，第 2 章の定理 2.3.2 において，設計変数の許容集合に対する有界閉部分集合の仮定は，抽象的最適設計問題では $(\phi, u(\phi))$ に対する許容集合，あるいは式 (7.3.1) で定義されたその部分集合 S，の $X \times U$ 上でのコンパクト性の仮定に置き換えられる．$(\phi, u(\phi))$ に対する許容集合は，$u(\phi)$ が $\phi \in \mathcal{D}$ に依存して連続的に決定されることから，ϕ に対する $u(\phi)$ のグラフ

$$\mathcal{F} = \{(\phi, u(\phi)) \in \mathcal{D} \times \mathcal{S} \mid 問題\ 7.2.1\} \tag{7.4.1}$$

によって定義される．そこで，抽象的最適設計問題 (問題 7.3.1) では，$\mathcal{F}$ が $X \times U$ 上でコンパクトであることを示す必要がある．そのために，ϕ に対する抽象的変分問題 (問題 7.2.1) の中で示された仮定に加えて，次の仮定を設けることにする．

仮定 7.4.1 ($a(\phi)$ と $l(\phi)$ の連続性) 問題 7.2.1 で定義された $a(\phi)$ と $l(\phi)$ は，$\phi \in \mathcal{D}$ に対して連続であるとする．すなわち，$\mathcal{D}$ において一様収束する X 上の任意の Cauchy 列 $\phi_n \to \phi$ に対して，$a(\phi_n) \to a(\phi)$ と $l(\phi_n) \to l(\phi)$ が成り立つとする． □

$\mathcal{F}$ のコンパクト性は次のように示される [2, Lemma 2.1, p. 14, Lemma 2.12, p. 39].

補題 7.4.2 ($\mathcal{F}$ のコンパクト性) 問題 7.2.1 の仮定に加えて，仮定 7.4.1 が満たされているとする．このとき，$\mathcal{D}$ において一様収束する X 上の任意の Cauchy 列 $\phi_n \to \phi$ とそれらに対する問題 7.2.1 の解 $u_n = u(\phi_n) \in U$ $(n \to \infty)$ に対して，

$$u_n \to u \quad \text{strongly in } U$$

が成り立ち，$u = u(\phi) \in U$ は問題 7.2.1 の解である． □

証明　ϕ_n に対する問題 7.2.1 の解 u_n に対して，

$$\alpha_n \|u_n\|_U^2 \le a(\phi_n)(u_n, u_n) = l(\phi_n)(u_n) \le \|l(\phi_n)\|_{U'} \|u_n\|_U$$

が成り立つ．ただし，α_n は $a(\phi_n)$ の強圧性の定義で使われる正定数とする．ここで，$\phi_n \to \phi$ が $\mathcal{D}$ において一様収束するとき，α_n は n に依存しない正定数 α に置き換えられる．これより，$\{u_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ は有界となる．そこで，$u_n \to u$ weakly in U なる部分列が存在する．

次に，この u が ϕ に対する問題 7.2.1 の解になることを示す．問題 7.2.1 の定義より，任意の $v \in U$ に対して，

$$\lim_{n\to\infty} a(\phi_n)(u_n, v) = \lim_{n\to\infty} l(\phi_n)(v) \tag{7.4.2}$$

が成り立つ．式 (7.4.2) の右辺は，仮定 7.4.1 より，

$$\lim_{n\to\infty} l(\phi_n)(v) = l(\phi)(v) \tag{7.4.3}$$

となる．式 (7.4.2) の左辺は，

$$\lim_{n\to\infty} a(\phi_n)(u_n, v) = a(\phi)(u, v) \tag{7.4.4}$$

となる．実際，

$$\begin{aligned} &|a(\phi_n)(u_n, v) - a(\phi)(u, v)| \\ &\quad \le |a(\phi_n)(u_n, v) - a(\phi)(u_n, v)| + |a(\phi)(u_n, v) - a(\phi)(u, v)| \\ &\quad \le \|a(\phi_n) - a(\phi)\|_{\mathcal{L}(U\times U,\mathbb{R})} \|u_n\|_U \|v\|_U + |a(\phi)(u_n - u, v)| \end{aligned}$$

に対して，仮定 7.4.1 と $u_n \to u$ weakly in U を用いることによって式 (7.4.4) が得られる．式 (7.4.3) と式 (7.4.4) を式 (7.4.2) に代入すれば，u は ϕ に対する問題 7.2.1 の解になることが示される．

$\{u_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ の u への弱収束が示されているので，強収束は，

$$\|u_n\|_U \to \|u\|_U \quad (n\to\infty) \tag{7.4.5}$$

を示すことで確かめられる．実際，U 上のノルムとして

$$|||v||| = \langle \tau(\phi)\, v, v\rangle$$

を用いれば，

$$\begin{aligned}|||u_n||| &= \langle \tau(\phi)\, u_n, u_n\rangle = \langle (\tau(\phi)-\tau(\phi_n))\, u_n, u_n\rangle + \langle \tau(\phi_n)\, u_n, u_n\rangle\\ &= \langle (\tau(\phi)-\tau(\phi_n))\, u_n, u_n\rangle + l(\phi_n)(u_n)\\ &\to l(\phi)(u) = |||u||| \quad (n\to\infty)\end{aligned} \tag{7.4.6}$$

が成り立つ．よって，$u_n \to u$ strongly in U が示された．□

$u(\phi)$ が $\mathcal{S}$ に入ることは，問題 7.2.1 の設定において保証されているものとする．一方，目的関数に関して，次の仮定を設ける．

仮定 7.4.3 (f_0 の連続性) f_0 は式 (7.3.1) で定義された S 上で下半連続とする．すなわち，$\mathcal{D}$ において一様収束する X 上の任意の Cauchy 列 $\phi_n \to \phi$ に対して，U 上の Cauchy 列 $u(\phi_n) \to u(\phi)$ $((\phi_n, u(\phi_n)), (\phi, u(\phi)) \in S)$ が定まり，

$$\lim_{n\to\infty} \inf f_0(\phi_n, u(\phi_n)) \geq f_0(\phi, u(\phi))$$

が成り立つとする．□

これらの仮定と補題を用いれば，抽象的最適設計問題 (問題 7.3.1) の解の存在について，次の結果を得る [2, Theorem 2.1, p. 16, Theorem 2.8, p. 41].

定理 7.4.4 (最適解の存在) 問題 7.2.1 の仮定に加えて，仮定 7.4.1 が満たされているとする．式 (7.3.1) の S は空集合ではなく，$X\times U$ 上でコンパクトであるとする．また，f_0 は S 上で下半連続 (仮定 7.4.3) とする．このとき，問題 7.3.1 の最小点が存在する．□

証明　$\{\phi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ $(\phi_n \in \mathcal{D})$ を問題 7.3.1 の最小化列として，

$$q = \inf_{(\phi,u(\phi))\in S} f_0(\phi, u(\phi)) = \lim_{n\to\infty} f_0(\phi_n, u(\phi_n)) \tag{7.4.7}$$

とおく．$\mathcal{D}$ はコンパクトなので，$\{\phi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ の部分列が存在して，

$$\phi_n \to \phi^* \quad \text{strongly in } X \tag{7.4.8}$$

なる $\phi^* \in \mathcal{D}$ が存在する．補題 7.4.2 より，

$$u(\phi_n) \to u(\phi^*) \quad \text{strongly in } U \tag{7.4.9}$$

を得る．ここで，$u(\phi_n)$ と $u(\phi^*)$ はそれぞれ ϕ_n と ϕ^* に対する問題 7.2.1 の解である．式 (7.4.8), 式 (7.4.9), 式 (7.4.7) および f_0 の S 上での下半連続性より，

$$q = \liminf_{n\to\infty} f_0(\phi_n, u(\phi_n)) = f_0(\phi^*, u(\phi^*))$$

を得る．すなわち，$(\phi^*, u(\phi^*)) \in S$ は問題 7.3.1 の最小点である． □

7.5　評価関数の微分

抽象的最適設計問題 (問題 7.3.1) の解が存在する条件は満たされていると仮定して，これ以降，その解を求める方法について考えていくことにする．本書では，勾配法に基づく解法を用いることにする．そのために，評価関数 f_i の ϕ の変動に対する X 上の Fréchet 微分を求める方法について考えよう．ここでは，抽象的変分問題 (問題 7.2.1) の等式制約が満たされたもとで，X 上の Fréchet 微分を求める必要がある．有限次元ベクトル空間上の等式制約問題に対しては 2.6.2 項で説明された Lagrange 乗数法 (あるいは 2.6.5 項で説明された随伴変数法) が使われた．その原理は定理 2.6.4 に基づいている．ここでは，それを関数空間に拡張することを考えよう．

問題 2.6.1 を $X \times U$ 上で定義された問題に拡張しよう．次のような等式制約つき最適化問題を考えよう．ただし，f_i をある $i \in \{1, \cdots, m\}$ のときの評価関数とする．

問題 7.5.1 (等式制約つき抽象的最適設計問題) $(\phi, u) \in X \times U$ に対して，$f_i : X \times U \to \mathbb{R}$ が与えられたとき，

$$\min_{(\phi,u)\in X\times U} \{ f_i(\phi, u) \mid s(\phi, u) = 0_{U'} \}$$

を満たす (ϕ, u) を求めよ．ただし，$s(\phi, u)$ は式 (7.2.1) で定義されているとする．
□

本節では，(ϕ, u) の任意変動を $(\varphi, w) \in X \times U$ とかくことにして，f_i と s の Fréchet 微分を

$$\begin{aligned} f_i'(\phi, u)[\varphi, w] &= f_{i\phi}(\phi, u)[\varphi] + f_{iu}(\phi, u)[w] \\ &= \langle g_{f_i}, \varphi \rangle + f_{iu}(\phi, u)[w], \\ s'(\phi, u)[\varphi, w] &= s_\phi(\phi, u)[\varphi] + s_u(\phi, u)[w] \end{aligned} \tag{7.5.1}$$

$$= g_h[\varphi] - \tau(\phi) w \tag{7.5.2}$$

とかくことにする．これらの表記を用いて，定理 2.6.4 が拡張された結果を次に示す．

定理 7.5.2 (Lagrange 関数を用いた極小点 1 次の必要条件) 問題 7.5.1 の f_i と s をそれぞれ $C^1(X \times U; \mathbb{R})$ および $C^1(X \times U; U')$ の要素とする．f_i と s の任意の $\varphi \in X$ に対する Fréchet 微分をそれぞれ式 (7.5.1) と式 (7.5.2) とかくことにする．このとき，(ϕ, u) が問題 7.5.1 の極小点ならば，任意の $(\varphi, w) \in X \times U$ に対して

$$\langle g_{f_i}, \varphi \rangle + \langle g_h[\varphi], v_i \rangle + \langle f_{iu}(\phi, u) - \tau^*(\phi) v_i, w \rangle = 0, \tag{7.5.3}$$

$$\langle l(\phi) - \tau(\phi) u, w \rangle = 0 \tag{7.5.4}$$

を満たす $v_i \in U$ が存在する．ただし，$\tau^*(\phi) : U \to U'$ は $\tau(\phi)$ の随伴作用素とする． □

証明　$s \in C^1(X \times U; U')$ の仮定と $s(\phi, u) = 0_{U'}$ を満たす解 u が一意に決まることから，$s : X \times U \to U'$ は，$(\phi, u) \in X \times U$ の近傍 $B_X \times B_U \subset X \times U$ において，Banach 空間の陰関数定理 (定理 A.4.2) の仮定

(1) $s(\phi, u) = 0_{U'}$,

(2) $s \in C^0(B_X \times B_U; U')$,

(3) 任意の $y = (\varphi, w) \in B_X \times B_U$ に対して $s(\phi, \cdot) \in C^1(B_U; U')$ で，かつ $s_u(\phi, u) = -\tau : U \to U'$ は (ϕ, u) で連続,

(4) $(s_u(\phi, u))^{-1} = -\tau^{-1} : U' \to U$ は有界線形

を満たす．そこで，陰関数定理より，ある近傍 $U_X \times U_U \subset B_X \times B_U$ と連続な写像 $\upsilon : U_X \to U_U$ (υ はギリシャ文字 upsilon) が存在して，$s(\phi, u) = 0_{U'}$ は

$$u = \upsilon(\phi) \tag{7.5.5}$$

とかける．したがって，$y(\phi) = (\phi, \upsilon(\phi)) \in C^1(\mathcal{D}; X \times U)$ を定義することができる．

そこで，$\tilde{f}_i(\phi) = f_i(\phi, \upsilon(\phi)) = f_i(y(\phi))$ とかくことにする．$f_i \in C^1(X \times U; \mathbb{R})$ が仮定されたので，ϕ が極小点のとき，任意の $\varphi \in X$ に対して，

$$\tilde{f}_i'(\phi)[\varphi] = y'^*(\phi) \circ g_i(\phi, \upsilon(\phi))[\varphi] = 0 \tag{7.5.6}$$

が成り立つ．ただし，

$$g_i(\phi, \upsilon(\phi)) = f_i'(\phi, \upsilon(\phi)) \in \mathcal{L}\left(X; X' \times U'\right) = \mathcal{L}(X; \mathcal{L}(X \times U; \mathbb{R})),$$
$$y'(\phi) \in \mathcal{L}(X; X \times U), \quad y'^*(\phi) \in \mathcal{L}\left(X' \times U'; X'\right)$$

である．なお，$\mathcal{L}(X; U)$ は有界線形作用素 $X \to U$ を表す．また，$\circ$ は合成作用素を表す．以下で，式 (7.5.6) の関係をかきかえる．

まず，(ϕ, u) の許容集合を

$$S = \{(\phi, u) \in X \times U \mid s(\phi, u) = 0_{U'}\} \tag{7.5.7}$$

とかくことにする．$(\phi, u) \in S$ を固定して，$y(\phi) = (\phi, u) \in S$ における $s'(\phi, u) \in \mathcal{L}(X \times U; U')$ の零空間 (核空間) を

$$T_S(\phi, u) = \left\{ (\varphi, \hat{v}) \in X \times U \;\middle|\; s'(\phi, u)[\varphi, \hat{v}] = 0_{U'} \right\} \tag{7.5.8}$$

とかく．それに対して，$T_S(\phi, u)$ の直交補空間を

$$\begin{aligned} &T'_S(\phi, u) \\ &\quad = \left\{ (\psi, w) \in X' \times U' \;\middle|\; \langle (\varphi, \hat{v}), (\psi, w) \rangle = 0 \text{ for all } (\varphi, \hat{v}) \in T_S(\phi, u) \right\} \end{aligned} \tag{7.5.9}$$

とかく．

また，$T_S(\phi, u)$ と $y'(\phi)$ の関係は，次のように得られる．$s(\phi, u) = 0_{U'}$ の両辺の任意の $\varphi \in X$ に対する Fréchet 微分をとると，

$$s'(\phi, u) \circ y'(\phi)[\varphi] = 0_{U'} \tag{7.5.10}$$

となる．この関係は $y'(\phi)$ の値空間 (像空間) $\operatorname{Im} y'(\phi)$ が $s'(\phi, u)$ の零空間 $\operatorname{Ker} s'(\phi, u)$ になっていることを表している．すなわち，

$$T_S(\phi, u) = \operatorname{Im} y'(\phi) \tag{7.5.11}$$

が成り立つ．

以上の関係を用いて，式 (7.5.6) をかきかえる．ϕ が極小点のとき，$g_i(\phi, v(\phi))$ は任意の $(\varphi, v_i) \in T_S(\phi, u)$ に対して直交していなければならないので，

$$g_i(\phi, v(\phi)) \in T'_S(\phi, u) \tag{7.5.12}$$

となる．ここで，式 (7.5.11) と零空間と像空間の直交補空間に関する定理より，

$$T'_S(\phi, u) = \operatorname{Im} s'^*(\phi, u)$$

が成り立つ．したがって，式 (7.5.12) は，任意の $(\varphi, w) \in X \times U$ に対して

$$\begin{aligned} &f_{i\phi}(\phi, u)[\varphi] + f_{iu}(\phi, u)[w] + \langle s_\phi(\phi, u)[\varphi], v_i \rangle + \langle s_u(\phi, u)[w], v_i \rangle \\ &\quad = \langle g_{f_i}, \varphi \rangle + \langle g_h[\varphi], v_i \rangle + \langle f_{iu}(\phi, u) - \tau^*(\phi) v_i, w \rangle = 0 \end{aligned}$$

を満たす $v_i \in U$ が存在することと同値である．すなわち，式 (7.5.3) が成り立つ．また，式 (7.5.4) は u が式 (7.2.1) の解ならば成り立つ．□

7.5.1　随伴変数法

定理 7.5.2 に基づいて，随伴変数法を次のように定義しよう．$v_i \in U$ を f_i に対する随伴変数とよび，式 (7.5.3) の左辺第 2 項が 0 になるように決定する．すなわち，次の問題の解とする．

問題 7.5.3 (f_i に対する随伴問題) $\phi \in X$ とそのときの式 (7.2.1) の解 $u \in U$ と $f_{iu}(\phi, u) \in U'$ が与えられたとき，

$$f_{iu}(\phi, u) - \tau^*(\phi) v_i = 0_{U'} \tag{7.5.13}$$

を満たす関数 $v_i \in U$ を求めよ．ただし，$\tau(\phi)$ は式 (7.2.1) と同一である．□

問題 7.5.3 の解 v_i を用いれば，式 (7.5.3) は

$$\langle g_{f_i}, \varphi \rangle + \langle g_h [\varphi], v_i \rangle = \langle g_i, \varphi \rangle = 0 \tag{7.5.14}$$

のようにかかれる．

このときの g_i は，任意の $\varphi \in X$ により設計変数が変動しても，u は状態決定問題 (問題 7.2.1) の解でありつづけたときの f_i の $\varphi \in X$ に対する Fréchet 微分の勾配になる．そこで，定理 7.5.2 の証明の中で定義された式 (7.5.5) の $\upsilon(\phi)$ を用いれば，$\tilde{f}_i(\phi) = f_i(\phi, \upsilon(\phi))$ に対して，

$$\tilde{f}_i'(\phi)[\varphi] = \langle g_i, \varphi \rangle \tag{7.5.15}$$

とかけることになる．

7.5.2　Lagrange 乗数法

評価関数 f_i の設計変数の任意の変動 $\varphi \in X$ に対する Fréchet 微分の勾配 g_i は，次に示される Lagrange 乗数法によっても求められる．第 8 章と第 9 章では，手続きが明快であるとの理由で，この方法を用いることにする．

Lagrange 乗数法は，問題 2.6.5 で定義されたように，等式制約つき最適化問題を Lagrange 関数の停留条件におきかえて，解の候補をみつける方法である．そこで，問題 7.5.1 の Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}_i(\phi, u, v_i) = f_i(\phi, u) + \langle s(\phi, u), v_i \rangle = f_i(\phi, u) + \mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\phi, u, v_i) \tag{7.5.16}$$

とおく．ただし，$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\phi, u, v_i)$ は状態決定問題 (問題 7.2.1) の Lagrange 関数である．ここで，u は必ずしも問題 7.2.1 の解である必要はないとする．v_i は f_i のために用意された状態決定問題に対する Lagrange 乗数で，定理 7.5.2 と同様，v_i は U の要素であると仮定する．このとき，(ϕ, u, v_i) の任意変動 $(\varphi, \hat{u}, \hat{v}_i) \in X \times U \times U$ に対する $\mathscr{L}_i(\phi, u, v_i)$ の Fréchet 微分は

$$\begin{aligned} &\mathscr{L}_i'(\phi, u, v_i)[\varphi, \hat{u}, \hat{v}_i] \\ &\quad = \mathscr{L}_{i\phi}(\phi, u, v_i)[\varphi] + \mathscr{L}_{iu}(\phi, u, v_i)[\hat{u}] + \mathscr{L}_{iv_i}(\phi, u, v_i)[\hat{v}_i] \end{aligned} \tag{7.5.17}$$

となる．式 (7.5.17) の右辺第 3 項に対しては，

$$\mathscr{L}_{iv_i}(\phi, u, v_i)[\hat{v}_i] = \mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\phi, u, \hat{v}_i) \tag{7.5.18}$$

を得る．式 (7.5.18) の右辺は状態決定問題 (問題 7.2.1) の Lagrange 関数になっている．そこで，u が状態決定問題の解ならば，式 (7.5.17) の右辺第 3 項はゼロとな

る．また，

$$\begin{aligned}\mathscr{L}_{iu}(\phi,u,v_i)[\hat{u}] &= f_{iu}(\phi,u)[\hat{u}] + \mathscr{L}_{\mathrm{S}u}(\phi,u,v_i)[\hat{u}] \\ &= \langle f_{iu}(\phi,u) - \tau^*(\phi)v_i, \hat{u}\rangle \end{aligned} \tag{7.5.19}$$

となる．任意の $\hat{u}\in U$ に対して式 (7.5.19) がゼロとなる条件は，随伴問題 (問題 7.5.3) の弱形式と一致する．そこで，随伴問題の弱解を v_i とおけば，式 (7.5.17) の右辺第 2 項はゼロとなる．

さらに，式 (7.5.17) の右辺第 1 項は，

$$\mathscr{L}_{i\phi}(\phi,u,v_i)[\varphi] = \langle g_{f_i},\varphi\rangle + \langle g_h[\varphi], v_i\rangle = \langle g_i,\varphi\rangle \tag{7.5.20}$$

となる．式 (7.5.20) の g_i は式 (7.5.14) の g_i と一致する．

この関係は第 1 章の式 (1.1.37) が抽象化された表現になっている．第 8 章と第 9 章では，ここで示されたように，f_i に対する Lagrange 関数の停留条件を用いて g_i を求めていくことにする．

7.5.3 評価関数の 2 階 Fréchet 微分

さらに，設計変数の変動に対する評価関数の 2 階微分を Fréchet 微分の定義 (定義 4.5.4) に基づいて考えてみよう．

1.1.6 項では，段つき 1 次元線形弾性問題を状態決定問題とおいたときの設計変数の変動に対する平均コンプライアンスの 2 階微分を Lagrange 関数 $\mathscr{L}_0$ の 2 階微分を用いて求めた．その際，状態変数の変動 $\hat{\boldsymbol{u}}$ には，定理 2.6.6 と定理 2.6.7 に基づいて，状態決定問題の等式制約が満たされたもとでの $\boldsymbol{u}$ の変動 $\hat{\boldsymbol{v}}$ を代入することが重要であった．ここでは，等式制約つき抽象的最適設計問題 (問題 7.5.1) に対して同様のことを考えてみよう．

式 (7.5.16) で定義された $\mathscr{L}_i$ に対して，第 2 章の定義にしたがって，(ϕ,u) を設計変数と考える．このとき，式 (7.5.7) と式 (7.5.8) の S と $T_S(\phi,u)$ に対して，$(\phi,u)\in S$ の任意変動 $(\varphi_1,\hat{v}_1)\in T_S(\phi,u)$ と $(\varphi_2,\hat{v}_2)\in T_S(\phi,u)$ に対する $\mathscr{L}_i$ の 2 階 Fréchet 微分は

$$\begin{aligned}&\mathscr{L}_{i(\phi,u)(\phi,u)}(\phi,u,v_i)[(\varphi_1,\hat{v}_1),(\varphi_2,\hat{v}_2)] \\ &\quad= (\mathscr{L}_{i\phi}(\phi,u,v_i)[\varphi_1] + \mathscr{L}_{iu}(\phi,u,v_i)[\hat{v}_1])_{\phi}[\varphi_2] \\ &\qquad+ (\mathscr{L}_{i\phi}(\phi,u,v_i)[\varphi_1] + \mathscr{L}_{iu}(\phi,u,v_i)[\hat{v}_1])_{u}[\hat{v}_2] \\ &\quad= \mathscr{L}_{i\phi\phi}(\phi,u,v_i)[\varphi_1,\varphi_2] + \mathscr{L}_{iu\phi}(\phi,u,v_i)[\hat{v}_1,\varphi_2] \\ &\qquad+ \mathscr{L}_{i\phi u}(\phi,u,v_i)[\varphi_1,\hat{v}_2] + \mathscr{L}_{iuu}(\phi,u,v_i)[\hat{v}_1,\hat{v}_2]\end{aligned} \tag{7.5.21}$$

となる．これを用いれば，定理 2.6.6 に対応して，次の結果を得る．

定理 7.5.4 (Lagrange 関数を用いた極小点 2 次の必要条件) $f_i \in C^2(X \times U; \mathbb{R})$ および $s \in C^2(X \times U; U')$ のとき，(ϕ, u) が問題 7.5.1 の極小点であれば，任意の $(\varphi, \hat{v}) \in T_S(\phi, u)$ に対して，

$$\mathscr{L}_{i(\phi,u)(\phi,u)}(\phi, u, v_i)[(\varphi, \hat{v}), (\varphi, \hat{v})] \geq 0 \tag{7.5.22}$$

が成り立つ．□

証明　定理 7.5.2 の証明において，陰関数定理の仮定 $s(\phi, \cdot) \in C^1(B_U; U')$ が $s(\phi, \cdot) \in C^2(B_U; U')$ に置き換えられることから，式 (7.5.5) の $\upsilon(\phi)$ を用いて $y(\phi) = (\phi, \upsilon(\phi)) \in C^2(\mathcal{D}; X \times U)$ が決定される．式 (7.5.10) より，任意の $y'(\phi)[\varphi] \in T_S(\phi, u)$ に対して，

$$s''(\phi, u)\left[y'(\phi)[\varphi], y'(\phi)[\varphi]\right] = 0_{U'} \tag{7.5.23}$$

を得る．そこで，もしも，(ϕ, u) が問題 7.5.1 の極小点であれば，任意の $y'(\phi)[\varphi] \in T_S(\phi, u)$ に対して，

$$\mathscr{L}_{i(\phi,u)(\phi,u)}(\phi, u, v_i)\left[y'(\phi)[\varphi], y'(\phi)[\varphi]\right] = \tilde{f}_i''(\phi)[\varphi, \varphi] \geq 0 \tag{7.5.24}$$

が成り立つ．□

さらに，定理 2.6.7 に対応して，次の結果を得る．

定理 7.5.5 (Lagrange 関数を用いた極小点 2 次の十分条件) 定理 7.5.4 の仮定の下で，$(\phi, u, v_i) \in X \times U^2$ において式 (7.5.3) と式 (7.5.4) が満たされ， 式 (7.5.22) において $\geq$ を $>$ に置き換えた不等式が成り立つとき，(ϕ, u) は問題 7.5.1 の極小点である．□

証明　$(\phi, u, v_i) \in X \times U^2$ が S における $\mathscr{L}_i$ の停留点であれば，$y(\phi) = (\phi, u)$ の近傍 $B \subset S$ における任意の点 $y(\phi + \varphi) = y(\phi) + z(\varphi)$ において，任意の $y(\phi) + z(\varphi) \in B$ に対して

$$\tilde{f}_i(\phi + \varphi) - \tilde{f}_i(\phi) = \frac{1}{2}\mathscr{L}_{i(\phi,u)(\phi,u)}(\phi + \theta\varphi, u(\phi + \theta\varphi), v_i)[z(\varphi), z(\varphi)]$$

を満たす $\theta \in (0, 1)$ が存在する．仮定より，右辺は 0 以上なので，$\tilde{f}_i(\phi) \leq \tilde{f}_i(\phi + \varphi)$ が成り立つ．□

定理 7.5.4 と定理 7.5.5 より，式 (7.5.24) の左辺は，ϕ の任意変動 $\varphi \in X$ に対する $\tilde{f}_i$ の Hesse 形式となっている．そこで，それを $h_i(\phi, u, v_i) \in \mathcal{L}^2(X \times X; \mathbb{R})$ (定義 4.5.4) とかくことにする．h_i は

$$\begin{aligned}
&h_i(\phi, u, v_i)[\varphi_1, \varphi_2] \\
&\quad = \left(\mathscr{L}_{i\phi}(\phi, u, v_i)[\varphi_1] + \mathscr{L}_{iu}(\phi, u, v_i)[\hat{v}_1]\right)_{\phi}[\varphi_2] \\
&\qquad + \left(\mathscr{L}_{i\phi}(\phi, u, v_i)[\varphi_1] + \mathscr{L}_{iu}(\phi, u, v_i)[\hat{v}_1]\right)_{u}[\hat{v}_2] \\
&\quad = \mathscr{L}_{i\phi\phi}(\phi, u, v_i)[\varphi_1, \varphi_2] + \mathscr{L}_{iu\phi}(\phi, u, v_i)[\hat{v}_1, \varphi_2]
\end{aligned}$$

$$+\mathscr{L}_{i\phi u}(\phi,u,v_i)[\varphi_1,\hat{v}_2]+\mathscr{L}_{iuu}(\phi,u,v_i)[\hat{v}_1,\hat{v}_2] \tag{7.5.25}$$

によって計算される．ただし， $j\in\{1,2\}$ に対して $(\varphi_j,\hat{v}_j)\in T_S(\phi,u)$ となるために，$\hat{v}_j=v'(\phi)[\varphi_j]$ は，任意の $\varphi_j\in X$ に対して

$$\mathscr{L}_{\mathrm{S}\phi u}(\phi,u,v)[\varphi_j,\hat{v}_j]=0 \tag{7.5.26}$$

によって決定される必要がある．h_i の具体的な結果は第 8 章と第 9 章で示される．

7.5.4 Lagrange 乗数法による評価関数の 2 階 Fréchet 微分

評価関数の 2 階 Fréchet 微分を Lagrange 乗数法を用いて求める場合には，次のようになる．式 (7.5.20) の $\langle g_i,\varphi_1\rangle$ に対する Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}_{\mathrm{I}i}(\phi,u,v_i,w_i,z_i)=\langle g_i,\varphi_1\rangle+\mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\phi,u,w_i)+\mathscr{L}_{\mathrm{A}i}(\phi,v_i,z_i) \tag{7.5.27}$$

とおく．ここで，$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}$ は式 (7.2.3) で与えられる．また，$\mathscr{L}_{\mathrm{A}i}$ は，f_i に対する随伴問題 (問題 7.5.3) の Lagrange 関数を表し，

$$\mathscr{L}_{\mathrm{A}i}(\phi,v_i,z_i)=\mathscr{L}_{iu}(\phi,u,v_i)[z_i]=\langle f_{iu}(\phi,u)-\tau^*(\phi)v_i,z_i\rangle \tag{7.5.28}$$

となる．ただし， $\mathscr{L}_{iu}(\phi,u,v_i)[z_i]$ は式 (7.5.19) で与えられる．$w_i\in U$ と $z_i\in U$ は，g_i が u と v_i の関数であるために用意された随伴変数である．φ_1 は $\mathscr{L}_{\mathrm{I}i}$ においては定ベクトルとみなす．

(ϕ,u,v_i,w_i,z_i) の任意変動 $(\varphi_2,\hat{u},\hat{v}_i,\hat{w}_i,\hat{z}_i)\in X\times U^4$ に対する $\mathscr{L}_{\mathrm{I}i}$ の Fréchet 微分は

$$\begin{aligned}&\mathscr{L}'_{\mathrm{I}i}(\phi,u,v_i,w_i,z_i)[\varphi_2,\hat{u},\hat{v}_i,\hat{w}_i,\hat{z}_i]\\&\quad=\mathscr{L}_{\mathrm{I}i\phi}(\phi,u,v_i,w_i,z_i)[\varphi_2]+\mathscr{L}_{\mathrm{I}iu}(\phi,u,v_i,w_i,z_i)[\hat{u}]\\&\qquad+\mathscr{L}_{\mathrm{I}iv_i}(\phi,u,v_i,w_i,z_i)[\hat{v}_i]+\mathscr{L}_{\mathrm{I}iw_i}(\phi,u,v_i,w_i,z_i)[\hat{w}_i]\\&\qquad+\mathscr{L}_{\mathrm{I}iz_i}(\phi,u,v_i,w_i,z_i)[\hat{z}_i]\end{aligned} \tag{7.5.29}$$

となる．式 (7.5.29) の右辺第 4 項は，u が状態決定問題の解ならばゼロとなる．また，式 (7.5.29) の右辺第 5 項は，v_i が随伴問題の解のときゼロとなる．

また，式 (7.5.29) の右辺第 2 項が，任意の $\hat{u}\in U$ に対して

$$\mathscr{L}_{\mathrm{I}iu}(\phi,u,v_i,w_i,z_i)[\hat{u}]=0 \tag{7.5.30}$$

となる条件は，w_i を求めるための $\langle g_i,\varphi_1\rangle$ に対する随伴問題を与える．さらに，式 (7.5.29) の右辺第 3 項が，任意の $\hat{v}_i\in U$ に対して

$$\mathscr{L}_{\mathrm{I}iv_i}(\phi,u,v_i,w_i,z_i)[\hat{v}_i]=0 \tag{7.5.31}$$

となる条件は，z_i を求めるための $\langle g_i, \varphi_1 \rangle$ に対する随伴問題を与える．

そこで，u, v_i, $w_i(\varphi_1)$ および $z_i(\varphi_1)$ はそれぞれ問題 7.2.1，問題 7.5.3, 式 (7.5.30) および式 (7.5.31) の弱解とする．このときの $f_i(\phi, u)$ を $\tilde{f}_i(\phi)$ とかくことにすれば，

$$\begin{aligned}\mathscr{L}_{\mathrm{I}i\phi}(\phi, \varphi_1, u, v_i, w_i(\varphi_1), z_i(\varphi_1))[\varphi_2] &= \tilde{f}_i''(\phi)[\varphi_1, \varphi_2] \\ &= g_{\mathrm{H}i}(\phi, \varphi_1)[\varphi_2] \end{aligned} \tag{7.5.32}$$

となる．本書では，この $g_{\mathrm{H}i}(\phi, \varphi_1)[\varphi_2]$ を Hesse 勾配 とよぶことにする．この具体的な結果も第 8 章と第 9 章で示される．

7.6　評価関数の降下方向

7.5 節で，設計変数の変動に対する評価関数 $\tilde{f}_0, \cdots, \tilde{f}_m$ の 1 階と 2 階の Fréchet 微分が求められることがわかった．そこで，第 3 章で示された最適化問題の解法を抽象化することを考えよう．

7.6.1　抽象的勾配法

まずは，勾配法を抽象化しよう．これ以降，第 3 章の表記に合わせて，$\tilde{f}_i(\phi)$ を $f_i(\phi)$ とかくことにしよう．ここでは，$f_i(\phi)$ の Fréchet 微分 $\langle g_i, \varphi \rangle$ が計算可能であると仮定して，$f_i(\phi)$ の最小点を求めることを考えよう．

3.3 節でみてきた有限次元ベクトル空間上の勾配法 (問題 3.3.1) では，正定値実対称行列 $\boldsymbol{A}$ を用いた双 1 次形式 $a_X(\cdot, \cdot) = (\cdot) \cdot (\boldsymbol{A}(\cdot))$ は，$X = \mathbb{R}^d$ とおいたとき，強圧的 (定義 5.2.1)，有界かつ対称な作用素 $X \times X \to \mathbb{R}$ であった．これらの性質に注目すれば，次のような抽象的勾配法が考えられる．

問題 7.6.1 (抽象的勾配法) $X \Supset \mathcal{D}$ を実 Hilbert 空間とする．$a_X : X \times X \to \mathbb{R}$ を X 上の強圧的かつ有界な双 1 次形式とする．すなわち，任意の $\varphi, \psi \in X$ に対して，

$$a_X(\varphi, \varphi) \geq \alpha \|\varphi\|_X^2, \quad |a_X(\varphi, \psi)| \leq \beta \|\varphi\|_X \|\psi\|_X \tag{7.6.1}$$

を満たす $\alpha, \beta > 0$ が存在するとする．$f_i \in C^1(X; \mathbb{R})$ (定義 4.5.4) に対して，極小点ではない $\phi_k \in \mathcal{D}^\circ$ における f_i の Fréchet 微分を $g_i(\phi_k) \in X'$ とする．このとき，任意の $\varphi \in X$ に対して

$$a_X(\varphi_{gi}, \varphi) = -\langle g_i(\phi_k), \varphi \rangle \tag{7.6.2}$$

を満たす $\varphi_{gi} \in X$ を求めよ．　□

問題 7.6.1 では，a_X の対称性 $a_X(\varphi, \psi) = a_X(\psi, \varphi)$ は仮定されていなかった．あとの定理 7.6.2 で対称性を使わずに望みの結果が得られるからである．実際，実 Hilbert 空間上の強圧的かつ有界な双 1 次形式の中に，非対称なものを考えることができる．たとえば，$X = H_0^1(\Omega; \mathbb{R})$ 上で定義された任意の $u, v \in X$ に対して

$$a(u, v) = \int_\Omega \left(\boldsymbol{\nabla} u \cdot \boldsymbol{\nabla} v + \frac{\partial u}{\partial x_1} v \right) \mathrm{d}x$$

は，非対称であるが強圧的かつ有界な双 1 次形式である[1]．しかし，数値解法を考える場合には a_X の対称性を仮定することが望ましい．具体的な与え方については，第 8 章と第 9 章で問題に応じて示すことにする．

問題 7.6.1 について次の結果を得る．

定理 7.6.2 (抽象的勾配法) 問題 7.6.1 の解 φ_{gi} は X において一意に存在し，

$$\|\varphi_{gi}\|_X \le \frac{1}{\alpha} \|g_i(\phi_k)\|_{X'} \tag{7.6.3}$$

が成り立つ．ただし，α は式 (7.6.1) で用いられた正の定数である．さらに，φ_{gi} は ϕ における f_i の降下方向である． □

証明　Lax-Milgram の定理より，一意存在と式 (7.6.3) はいえる．さらに，φ_{gi} は式 (7.6.2) を満たすので，正の定数 $\bar{\epsilon}$ に対して，

$$\begin{aligned} f_i(\phi + \bar{\epsilon}\varphi_{gi}) - f_i(\phi) &= \bar{\epsilon} \langle g_i, \varphi_{gi} \rangle + o(|\bar{\epsilon}|) = -\bar{\epsilon} a_X(\varphi_{gi}, \varphi_{gi}) + o(|\bar{\epsilon}|) \\ &\le -\bar{\epsilon}\alpha \|\varphi_{gi}\|_X^2 + o(|\bar{\epsilon}|) \end{aligned}$$

が成り立つ． □

抽象的勾配法のなかでも，X に H^1 級の関数空間をえらんだ場合を H^1 勾配法とよぶことにする．

定理 7.6.2 は抽象的勾配法 (問題 7.6.1) の解 φ_{gi} は X の中にあることを示している．しかし，φ_{gi} が $\mathcal{D}$ に入る保証はない．そこで，次のことに注意する必要がある．

注意 7.6.3 (抽象的勾配法の解) 抽象的勾配法 (問題 7.6.1) の解 φ_{gi} を抽象的最適設計問題 (問題 7.3.1) の解法の中で利用するためには，φ_{gi} が $\mathcal{D}$ の要素に入るような問題設定をしなければならない．そのために，次のことに注意する必要がある．

(1) 抽象的勾配法 (問題 7.6.1) の解 φ_{gi} が $\mathcal{D}$ に入るように，g_i が適切な正則性をもつ関数の集合に入るようにしなければならない．そのために，状態決定問題 (問題 7.2.1) 解 u が適切な関数の集合 $\mathcal{S}$ に入るように，既知項 $l(\phi)$ や境界の正則性が適切に設定されていなければならない．さらに，随伴問題 (問題 7.5.3) の解 v_i が適切な関数の集合 $\mathcal{S}$ に入るように，$f_{iu}(\phi, u)$ が適切に設定されていなければならない．それらの詳細は第 8 章と第 9 章で示される．

[1] この a は，同次 Poisson 問題に移流項が付加された問題の弱形式に現れる [菊地文雄, 私信]

(2) それができない場合 ($\mathcal{D}$ において特別な制約条件が課されている場合など) には，φ_{gi} を求める過程において，あるいは求めたあと，追加の処理を加えることで，$\mathcal{D}$ において要求された制約条件が満たされるようにする必要がある．

□

7.6.2　抽象的 Newton 法

次に，Newton 法を抽象化しよう．ここでは，$f_i(\phi)$ の Fréchet 微分 $\langle g_i(\phi_k), \varphi\rangle$ と 2 階 Fréchet 微分 $h_i(\phi_k)[\varphi_1, \varphi_2]$ が計算可能であると仮定して，$f_i(\phi)$ の最小点を求めることを考えよう．

3.5 節でみてきたように，Newton 法 (問題 3.5.1) では，勾配法で使われた双 1 次形式 $a_X(\cdot, \cdot) = (\cdot) \cdot (\boldsymbol{A}(\cdot))$ が Hesse 行列 $\boldsymbol{H}$ を用いた $h(\boldsymbol{x}_k)[\cdot, \cdot] = (\cdot) \cdot (\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_k)(\cdot))$ におきかえられた．実 Hilbert 空間 X 上では，次のような抽象的 Newton 法が考えられる．

問題 7.6.4 (抽象的 Newton 法) $X \supseteq \mathcal{D}$ を実 Hilbert 空間とする．$f_i \in C^2(X; \mathbb{R})$ (定義 4.5.4) に対して，極小点ではない $\phi_k \in \mathcal{D}^\circ$ における f_i の Fréchet 微分の勾配および Hesse 形式をそれぞれ $g_i(\phi_k) \in X'$ および $h_i(\phi_k) \in \mathcal{L}^2(X \times X; \mathbb{R})$ とする．また，$a_X : X \times X \to \mathbb{R}$ を $h_i(\phi_k)$ の X 上における強圧性と有界性を補うため双 1 次形式とする．このとき，任意の $\varphi \in X$ に対して

$$h_i(\phi_k)[\varphi_{gi}, \varphi] + a_X(\varphi_{gi}, \varphi) = -\langle g_i(\phi_k), \varphi\rangle \tag{7.6.4}$$

を満たす $\varphi_{gi} \in X$ を求めよ． □

抽象的 Newton 法のなかでも，X に H^1 級の関数空間をえらんだ場合を H^1 Newton 法とよぶことにする．問題 7.6.4 について，定理 3.5.2 と同様，ϕ_k が極小点に十分近いとき，抽象的 Newton 法で生成される点列は極小点に 2 次収束することが期待される．また，抽象的勾配法の解に対する注意 7.6.3 はここでも有効である．

さらに，$f_i(\phi)$ の 2 階 Fréchet 微分が Hesse 勾配によって与えられる場合の抽象的 Newton 法では，問題 7.6.4 が次の問題に置き換えられる．

問題 7.6.5 (Hesse 勾配を用いた抽象的 Newton 法) 問題 7.6.4 の仮定のもとで，極小点ではない $\phi_k \in \mathcal{D}^\circ$ における f_i の Fréchet 微分の勾配，探索ベクトルおよび Hesse 勾配をそれぞれ $g_i(\phi_k) \in X'$, $\bar{\varphi}_{gi} \in X$ および $g_{\mathrm{H}i}(\phi_k, \bar{\varphi}_{gi}) \in X'$ とする．また，$a_X : X \times X \to \mathbb{R}$ を X 上の強圧的かつ有界な双 1 次形式とする．このとき，任意の $\varphi \in X$ に対して

$$a_X(\varphi_{gi}, \varphi) = -\langle (g_i(\phi_k) + g_{\mathrm{H}i}(\phi_k, \bar{\varphi}_{gi})), \varphi\rangle \tag{7.6.5}$$

を満たす $\varphi_{gi} \in X$ を求めよ．□

問題 7.6.5 の解 φ_{gi} は，$\bar{\varphi}_{gi} = \varphi_{gi}$ のとき，抽象的 Newton 法の解と一致する．

7.7　抽象的最適設計問題の解法

抽象的勾配法と抽象的 Newton 法が定義されたので，これより抽象的最適設計問題 (問題 7.3.1) に対する解法を考えていこう．

7.7.1　制約つき問題に対する勾配法

まず，3.7 節で示された内容にならって，制約つき問題に対する勾配法について考えてみよう．ここでは，評価関数 $f_0, \cdots, f_m$ の Fréchet 微分の勾配 $g_0, \cdots, g_m \in X'$ は，7.5 節で示された方法で計算可能であると仮定する．

ここで，問題 7.3.1 に対する KKT 条件を示しておこう．ここで示される内容は，第 1 章の問題 1.1.4 に対する KKT 条件を与える式 (1.1.51) から式 (1.1.54) を拡張したものになっている．問題 1.1.4 では $X = \mathbb{R}^2$ および $U = \mathbb{R}^2$ であった．それに対して，問題 7.3.1 では X と U は実 Hilbert 空間であると仮定された．設計変数の任意変動に対する評価関数の Fréchet 微分は X の双対空間 X' に入る．その関係に注意すれば，次の結果を得る．

問題 7.3.1 に対する Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}(\phi, \boldsymbol{\lambda}) = f_0(\phi) + \sum_{i \in \{1, \cdots, m\}} \lambda_i f_i(\phi) \tag{7.7.1}$$

とおく．ここで，$\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \cdots, \lambda_m)^\top \in \mathbb{R}^m$ は $f_1(\phi) \leq 0, \cdots, f_m(\phi) \leq 0$ に対する Lagrange 乗数である．

このとき，問題 7.3.1 に対する KKT 条件は，

$$g_0(\phi) + \sum_{i \in \{1, \cdots, m\}} \lambda_i g_i(\phi) = 0_{X'}, \tag{7.7.2}$$

$$f_i(\phi) \leq 0 \quad \text{for } i \in \{1, \cdots, m\}, \tag{7.7.3}$$

$$\lambda_i f_i(\phi) = 0 \quad \text{for } i \in \{1, \cdots, m\}, \tag{7.7.4}$$

$$\lambda_i \geq 0 \quad \text{for } i \in \{1, \cdots, m\}. \tag{7.7.5}$$

で与えられる．

この条件をもとにして，3.7 節で示された制約つき問題に対する勾配法に沿って，抽象的最適設計問題 (問題 7.3.1) の解法について考えよう．$k \in \{0, 1, 2, \cdots\}$ に対し

て，試行点 ϕ_k は式 (7.3.1) で定義された許容集合 S の要素であると仮定する．この ϕ_k に対して有効な制約に対する添え字の集合を

$$I_{\mathrm{A}}(\phi_k) = \{i \in \{1, \cdots, m\} \mid f_i(\phi_k) \geq 0\} = \left\{i_1, \cdots, i_{|I_{\mathrm{A}}|}\right\} \tag{7.7.6}$$

とかくことにする．混乱がないときは $I_{\mathrm{A}}(\phi_k)$ を I_{A} とかく．また，探索ベクトルの大きさ (ステップサイズ) は正の定数 c_a の大きさで調整することにする．このとき，ϕ_k の近傍で評価関数に対する不等式制約を満たす探索ベクトル $\varphi_g \in X$ を求める問題は次のように構成される．

問題 7.7.1 (制約つき問題に対する勾配法) 問題 7.3.1 の不等式制約を満たす試行点 $\phi_k \in \mathcal{D}^\circ$ において，$f_0(\phi_k)$, $f_{i_1}(\phi_k) = 0$, $\cdots$, $f_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}(\phi_k) = 0$ および $g_0(\phi_k)$, $g_{i_1}(\phi_k)$, $\cdots$, $g_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}(\phi_k) \in X'$ が与えられたとする．$a_X : X \times X \to \mathbb{R}$ を X 上の強圧的かつ有界な双 1 次形式とする．また，c_a を正の定数とする．このとき，

$$q(\varphi_g) = \min_{\varphi \in X} \left\{ q(\varphi) = \frac{c_a}{2} a_X(\varphi, \varphi) + \langle g_0(\phi_k), \varphi \rangle \;\middle|\; f_i(\phi_k) + \langle g_i(\phi_k), \varphi \rangle \leq 0 \text{ for } i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k) \right\}$$

を満たす $\phi_{k+1} = \phi_k + \varphi_g$ を求めよ．□

問題 3.7.1 と同様に，問題 7.7.1 は凸最適化問題である．そこで，KKT 条件を満たす φ_g は，問題 7.7.1 の最小点となる．このことに注目して問題 7.3.1 の解法を考えよう．以下の方法は 3.7 節で示された方法を抽象化したものである．

問題 7.7.1 の Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}_{\mathrm{Q}}(\varphi_g, \boldsymbol{\lambda}) = q(\varphi_g) + \sum_{i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k)} \lambda_i \left(f_i(\phi_k) + \langle g_i(\phi_k), \varphi_g \rangle \right)$$

とおく．ここで，$\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \cdots, \lambda_m)^\top \in \mathbb{R}^m$ は不等式制約条件に対する Lagrange 乗数である．問題 7.7.1 の最小点 φ_g における KKT 条件は，任意の $\psi \in X$ に対して

$$c_a a_X(\varphi_g, \psi) + \langle g_0(\phi_k), \psi \rangle + \sum_{i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k)} \lambda_i \langle g_i(\phi_k), \psi \rangle = 0, \tag{7.7.7}$$

$$f_i(\phi_k) + \langle g_i(\phi_k), \varphi_g \rangle \leq 0 \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k) \tag{7.7.8}$$

$$\lambda_{k+1\,i} \left(f_i(\phi_k) + \langle g_i(\phi_k), \psi \rangle \right) = 0 \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k), \tag{7.7.9}$$

$$\lambda_{k+1\,i} \geq 0 \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k) \tag{7.7.10}$$

が成り立つことである．これらを満たす $(\varphi_g, \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) \in X \times \mathbb{R}^{|I_{\mathrm{A}}|}$ は，次のようにして求められる．

φ_{g0}, φ_{i_1}, $\cdots$, $\varphi_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}$ を抽象的勾配法 (問題 7.6.1) の解とする．ただし，式 (7.6.2) を任意の $\psi \in X$ に対して

$$c_a a_X(\varphi_{gi}, \psi) = -\langle g_i, \psi \rangle \tag{7.7.11}$$

に変更する．このとき，

$$\varphi_g = \varphi_g(\lambda_{k+1\,i}) = \varphi_{g0} + \sum_{i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k)} \lambda_{k+1\,i}\, \varphi_{gi} \tag{7.7.12}$$

は，式 (7.7.7) を満たす．一方，式 (7.7.8) は，

$$\begin{pmatrix} \langle g_{i_1}, \varphi_{g i_1} \rangle & \cdots & \left\langle g_{i_1}, \varphi_{g i_{|I_{\mathrm{A}}|}} \right\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left\langle g_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}, \varphi_{g i_1} \right\rangle & \cdots & \left\langle g_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}, \varphi_{g i_{|I_{\mathrm{A}}|}} \right\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{k+1\, i_1} \\ \vdots \\ \lambda_{k+1\, i_{|I_{\mathrm{A}}|}} \end{pmatrix}$$
$$= -\begin{pmatrix} f_{i_1} + \langle g_{i_1}, \varphi_{g0} \rangle \\ \vdots \\ f_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}} + \left\langle g_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}, \varphi_{g0} \right\rangle \end{pmatrix}$$

となる．この式を

$$\left(\langle g_i, \varphi_{gj} \rangle \right)_{(i,j) \in I_{\mathrm{A}}^2} (\lambda_{k+1\,j})_{j \in I_{\mathrm{A}}} = -\left(f_i + \langle g_i, \varphi_{g0} \rangle \right)_{i \in I_{\mathrm{A}}} \tag{7.7.13}$$

とかく．$g_1, \cdots, g_m$ が 1 次独立ならば，式 (7.7.13) は $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ について可解となる．また，有効な制約関数 f_{i_1}, $\cdots$, $f_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}$ の値がすべて 0 であれば，φ_{g0}, $\varphi_{g i_1}$, $\cdots$, $\varphi_{g i_{|I_{\mathrm{A}}|}}$ のすべてに任意の実数をかけても成り立つことから，ステップサイズ $\|\varphi_g\|_X$ が適切に設定されていなくても，$\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ を求めることができることになる．

ここまでの定義を用いれば，3.7.1 項に示された簡単なアルゴリズム 3.7.2 を適用することができる．その際，次のように変更されるものとする．

(1) 設計変数 $\boldsymbol{x}$ とその変動 $\boldsymbol{y}$ をそれぞれ ϕ と φ におきかえる．

(2) 式 (3.7.10) を式 (7.7.11) におきかえる．

(3) 式 (3.7.11) を式 (7.7.12) におきかえる．

(4) 式 (3.7.12) を式 (7.7.13) におきかえる．

さらに，3.7.2 項に示されたパラメータ調整ありの複雑なアルゴリズム 3.7.6 を考える場合には，さらに次のことを考慮する必要がある．

(i) ステップサイズの初期値 ϵ_g を与えて，$\|\varphi_g\| = \epsilon_g$ となるように c_a を決定する機能

(ii) 設計変数が ϕ_{k+1} に更新されたとき，$i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_{k+1})$ に対して，$|f_i(\phi_{k+1})| \leq \epsilon_i$ と $\lambda_{k+1\,i} > 0$ が満たされるように $\boldsymbol{\lambda}_{k+1} = (\lambda_{k+1\,i})_{i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_{k+1})}$ を修正する機能

(iii) 目的関数 f_0 の収束判定値 ϵ_0 に対して，制約関数 $f_1, \cdots, f_m$ の許容値 $\epsilon_1, \cdots, \epsilon_m$ を適切化する機能

(iv) 大域的収束性が保証されるようにステップサイズ $\|\varphi_g\|$ を調整する機能

上記 (i) は，$\boldsymbol{y}$ を φ におきかえれば 3.7.2 項で示された内容がそのまま成り立つことになる．

上記 (ii) についても同様である．すなわち，Newton-Raphson 法による $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ の更新式 (式 (3.7.21)) を

$$(\delta\lambda_j)_{j \in I_{\mathrm{A}}} = -\left(\langle g_i(\boldsymbol{\lambda}_{k+1\,l}), \varphi_{gj}(\boldsymbol{\lambda}_{k+1\,l})\rangle\right)^{-1}_{(i,j)\in I_{\mathrm{A}}^2} \left(f_i(\boldsymbol{\lambda}_{k+1\,l})\right)_{i \in I_{\mathrm{A}}} \tag{7.7.14}$$

におきかえることで，アルゴリズム 3.7.6 をそのまま使えることになる．

また，上記 (iii) についても，式 (3.7.25) が満たされるように ϵ_i をかきかえる処理はすでにアルゴリズム 3.7.6 の中に組み込まれている．

さらに，上記 (iv) については，次のようなおきかえによりアルゴリズム 3.7.6 をそのまま使えることになる．抽象的最適設計問題 (問題 7.3.1) に対する Lagrange 関数は式 (7.7.1) の $\mathscr{L}(\phi, \boldsymbol{\lambda})$ で与えられる．このとき，Armijo の規準は，$\xi \in (0, 1)$ に対して

$$\begin{aligned}&\mathscr{L}(\phi_k + \varphi_g, \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) - \mathscr{L}(\phi_k, \boldsymbol{\lambda}_k) \\ &\quad \leq \xi \left\langle g_0(\phi_k) + \sum_{i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k)} \lambda_{ki} g_i(\phi_k), \varphi_g \right\rangle\end{aligned} \tag{7.7.15}$$

となる． Wolfe の規準は，μ $(0 < \xi < \mu < 1)$ に対して

$$\begin{aligned}&\mu \left\langle g_0(\phi_k) + \sum_{i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k)} \lambda_{ki} g_i(\phi_k), \varphi_g \right\rangle \\ &\quad \leq \left\langle g_0(\phi_k + \varphi_g) + \sum_{i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_{k+1})} \lambda_{k+1\,i} g_i(\phi_k + \varphi_g), \varphi_g \right\rangle\end{aligned} \tag{7.7.16}$$

で与えられる．

これらのおきかえを用いれば，抽象的最適設計問題 (問題 7.3.1) に対してアルゴリズム 3.7.6 を適用することができる．その際，上記 (1) から (4) に加えて，次のように変更されるものとする．

(5) Armijo の規準式 (3.7.26) を式 (7.7.15) におきかえる．

(6) Wolfe の規準式 (3.7.27) を式 (7.7.16) におきかえる．

(7) Newton-Raphson 法による $\boldsymbol{\lambda}$ の更新式 (式 (3.7.21)) を式 (7.7.14) におきかえる．

このアルゴリズムがうまく機能するためには，注意 7.6.3 で指摘されたことが満たされている必要がある．それらが満たされない場合には，数値不安定現象などが現れる可能性がある．このような現象を防ぐためには，設計変数が更新された後に適切な処理を追加して，新しい設計変数が常に許容集合 $\mathcal{D}$ に入るようにする工夫が必要となる．

7.7.2　制約つき問題に対する Newton 法

評価関数の 2 階 Fréchet 微分が得られる場合には，制約つき問題に対する勾配法を制約つき問題に対する Newton 法に変更することができる．ここでは，抽象的 Newton 法 (問題 7.6.4) を用いて，第 3 章の問題 3.8.1 を抽象化しよう．

問題 7.7.2 (制約つき問題に対する Newton 法) 問題 7.3.1 の不等式制約を満たす試行点 $\phi_k \in \mathcal{D}^\circ$ において，Lagrange 乗数 $\boldsymbol{\lambda}_k \in \mathbb{R}^{|I_\mathrm{A}|}$ は式 (7.7.8) から式 (7.7.10) (ただし，$k+1$ を k とみなす) を満たすとする．また，$f_0(\phi_k)$, $f_{i_1}(\phi_k) = 0, \cdots$, $f_{i_{|I_\mathrm{A}|}}(\phi_k) = 0$ および $g_0(\phi_k)$, $g_{i_1}(\phi_k)$, $\cdots$, $g_{i_{|I_\mathrm{A}|}}(\phi_k) \in X'$ と $h_0(\phi_k)$, $h_{i_1}(\phi_k)$, $\cdots$, $h_{i_{|I_\mathrm{A}|}}(\phi_k) \in \mathcal{L}^2(X \times X; \mathbb{R})$ を既知として，

$$h_{\mathscr{L}}(\phi_k) = h_0(\phi_k) + \sum_{i \in I_\mathrm{A}(\phi_k)} \lambda_{ik} h_i(\phi_k) \tag{7.7.17}$$

とおく．また，$a_X : X \times X \to \mathbb{R}$ を $h_{\mathscr{L}}(\phi_k)$ の X 上における強圧性と有界性を補うため双 1 次形式とする．このとき，

$$\begin{aligned} q(\varphi_g) = \min_{\varphi \in X} \Big\{ & q(\varphi) = \frac{1}{2}\left(h_{\mathscr{L}}(\phi_k)[\varphi, \varphi] + a_X(\varphi, \varphi)\right) + \langle g_0(\phi_k), \varphi \rangle \\ & + f_0(\phi_k) \ \Big|\ f_i(\phi_k) + \langle g_i(\phi_k), \varphi \rangle \le 0 \text{ for } i \in I_\mathrm{A}(\phi_k) \Big\} \end{aligned}$$

を満たす $\phi_{k+1} = \phi_k + \varphi_g$ を求めよ． □

問題 7.7.2 は，2 次最適化問題に分類される．$h_{\mathscr{L}}(\phi_k)[\varphi, \varphi] + a_X(\varphi, \varphi)$ が X 上で強圧的かつ有界な双 1 次形式のときは，問題 7.7.2 は凸最適化問題となる．一般にはそうとは限らない．しかし，次に示される KKT 条件を満たす φ_g は，問題 7.7.2

に対する最小点の候補となる．このことに注目して，3.8 節で示された内容にならって，問題 7.7.2 の解法を考えよう．

問題 7.7.2 の最小点 φ_g における KKT 条件が成り立つと仮定する．すなわち，任意の $\psi \in X$ に対して

$$\begin{aligned} h_{\mathscr{L}}\left(\phi_k\right)[\varphi, \psi] + a_X\left(\varphi, \psi\right) + \left\langle g_0\left(\phi_k\right), \psi\right\rangle & \\ + \sum_{i \in I_{\mathrm{A}}\left(\phi_k\right)} \lambda_{k+1\,i} \left\langle g_i\left(\phi_k\right), \psi\right\rangle = 0, & \end{aligned} \tag{7.7.18}$$

$$f_i\left(\phi_{k+1}\right) = f_i\left(\phi_k\right) + \left\langle g_i\left(\phi_k\right), \varphi_g\right\rangle \leq 0 \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}\left(\phi_k\right), \tag{7.7.19}$$

$$\lambda_{k+1\,i}\left(f_i\left(\phi_k\right) + \left\langle g_i\left(\phi_k\right), \varphi_g\right\rangle\right) = 0 \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}\left(\phi_k\right), \tag{7.7.20}$$

$$\lambda_{k+1\,i} \geq 0 \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}\left(\phi_k\right) \tag{7.7.21}$$

が成り立つ．これらを満たす $(\varphi_g, \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) \in X \times \mathbb{R}^{|I_{\mathrm{A}}|}$ は，次のようにして求められる．

制約つき問題に対する勾配法 (7.7.1 項) では $\varphi_{g0}, \varphi_{i_1}, \cdots, \varphi_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}$ を抽象的勾配法の解とした．ここでは，それらを抽象的 Newton 法の解におきかえる．ただし，問題 7.6.4 を次のようにかきかえる．「問題 7.7.2 の既知関数が与えられたとき，任意の $\varphi \in X$ に対して

$$h_{\mathscr{L}}\left(\phi_k\right)\left[\varphi_{gi}, \varphi\right] + a_X\left(\varphi_{gi}, \varphi\right) = -\left\langle g_i\left(\phi_k\right), \varphi\right\rangle \tag{7.7.22}$$

を満たす $\varphi_{gi} \in X$ を求めよ.」

このとき，式 (7.7.12) で定義された φ_g は，式 (7.7.18) を満たす．一方，式 (7.7.19) は，式 (7.7.13) となる．そこで，式 (7.7.13) より $\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ を求めれば，式 (7.7.19) が成り立ち，問題 7.7.2 の最小点 φ_g における KKT 条件は満たされることになる．ただし，式 (7.7.20) と式 (7.7.21) は，有効制約法により，アルゴリズムの中で $I_{\mathrm{A}}\left(\phi_{k+1}\right)$ を適切にえらぶことによって満たされる．

ここまでの定義を用いれば，3.8.1 項に示された簡単なアルゴリズム 3.8.4 を適用することができる．その際，次のように変更されるものとする．

(1) 設計変数 $\boldsymbol{x}$ とその変動 $\boldsymbol{y}$ をそれぞれ ϕ と φ におきかえる．

(2) 式 (3.8.9) を式 (7.7.22) におきかえる．

(3) 式 (3.7.11) を式 (7.7.12) におきかえる．

(4) 式 (3.7.12) を式 (7.7.13) におきかえる．

さらに，Hesse 勾配を用いる場合には次のように変更される．式 (7.7.17) と式 (7.7.22) はそれぞれ

$$g_{\mathrm{H}\mathscr{L}}\left(\phi_k, \bar{\varphi}_g\right) = g_{\mathrm{H}0}\left(\phi_k, \bar{\varphi}_g\right) + \sum_{i \in I_{\mathrm{A}}(\phi_k)} \lambda_{ik} g_{\mathrm{H}i}\left(\phi_k, \bar{\varphi}_g\right) \tag{7.7.23}$$

$$a_X\left(\varphi_{gi}, \varphi\right) = -\left\langle \left(g_i\left(\phi_k\right) + g_{\mathrm{H}\mathscr{L}}\left(\phi_k, \bar{\varphi}_g\right)\right), \varphi \right\rangle \tag{7.7.24}$$

に置き換えられる．そのうえで，次のように変更される．

(5) 式 (3.8.11) を式 (7.7.24) におきかえる．

このように，制約つき問題に対する勾配法とこれらの Newton 法の違いは抽象的勾配法の $a_X(\cdot,\cdot)$ が $h_i(\phi_k)[\cdot,\cdot] + a_X(\cdot,\cdot)$ におきかえられていたり，$g_i(\phi_k)$ が $g_i(\phi_k) + g_{\mathrm{H}i}(\phi_k, \bar{\varphi}_g)$ におきかえられているだけである．しかし，この方法では，評価関数の 2 階微分が使われていることから，注意 3.5.4 であげられた Newton 法の性質が成り立つことが期待される．しかし，注意 3.8.2 で説明されたように，制約条件は 1 階微分までで近似されていることから，制約関数の非線形性がつよい場合には，ステップサイズに注意する必要がある．

さらに，ステップサイズを調整する機能をはじめ，強圧性を確保する方法などにかんしては，3.8.2 項で説明されたことがここでも有効である．

このような Newton 法が利用できるかは $h_i(\phi_k)[\cdot,\cdot]$ や $g_{\mathrm{H}i}(\phi_k, \bar{\varphi}_g)$ の計算が可能であるかによる．第 8 章と第 9 章でこれらの具体的な計算方法をみていくことにしよう．

7.8　第 7 章のまとめ

第 7 章では，第 8 章と第 9 章で示される偏微分方程式の境界値問題が定義された領域の位相や形状が設計対象にされた最適設計問題に共通するような抽象的な問題を構成して，その解法についてみてきた．要点は以下のようである．

(1) 設計変数と状態変数の線形空間には実 Hilbert 空間が選ばれる (7.1 節)．その理由は，抽象的勾配法は Hilbert 空間上で定義されるためである．

(2) 抽象的変分問題を状態決定問題にして (7.2 節)，設計変数と状態変数 (状態決定問題の解) の汎関数によって評価関数が定義された抽象的最適設計問題が定義された (7.3 節)．

(3) 抽象的最適設計問題に対して，評価関数の微分は，随伴変数法 (7.5.1 項) あるいは Lagrange 乗数法 (7.5.2 項) によって求められる．また，評価関数の 2

階微分は，Lagrange 関数の 2 階微分に，状態決定問題の等式制約が満たされたもとでの状態決定問題の解の微分を代入することによって求められる (7.5.3 項).

(4) 抽象的勾配法は実 Hilbert 空間上で定義される (7.6.1 項)．抽象的勾配法による解の一意存在は Lax-Milgram の定理によって示される．また，その解は評価関数の降下方向を向いている (定理 7.6.2)．さらに，抽象的 Newton 法は，抽象的勾配法の双 1 次形式が評価関数の 2 階微分とその強圧性と有界性を補う双 1 次形式の和におきかえられた方法として定義される (7.6.2 項).

(5) 抽象的最適設計問題の解法は，第 3 章で示された制約つき問題に対する勾配法と制約つき問題に対する Newton 法と同じ枠組みで構成される (7.7.1 項と 7.7.2 項).

この章の最後に，参考になった文献をいくつかを挙げておこう．関数空間上の Lagrange 乗数法に関しては文献 [3] の第 5 章が参考になった．関数空間上の勾配法に関しては文献 [1] と文献 [4] の 4.4 節が参考になった．

参考文献

[1] Cea, J. Numerical methods of shape optimal design. In Haug, E. J. and Cea, J., editors, *Optimization of Distributed Parameter Structures*, Vol. 2, pp. 1049–1088. Sijthoff & Noordhoff, Alphen aan den Rijn, The Netherlands, 1981.

[2] Haslinger, J. and Mäkinen, R. A. E. *Introduction to Shape Optimization: Theory, Approximation, and Computation.* SIAM, Philadelphia, 2003.

[3] Jahn, J. *Introduction to the Theory of Nonlinear Optimization. 2nd Rev. Ed.* Springer, Berlin; New York, 1996.

[4] Pironneau, O. *Optimal Shape Design for Elliptic Systems.* Springer, New York, 1984.