日本オペレーションズ・リサーチ学会
2021年 秋季研究発表会

トポロジー最適化問題に対する加速射影勾配法

05001441　東京大学　*西岡暁　　NISHIOKA Akatsuki
01111470　東京大学　 寒野善博　KANNO Yoshihiro

1.　はじめに

トポロジー最適化は構造物の最適な設計形状を求める数理的手法である．トポロジー最適化問題は，本来は無限次元（関数空間上）の最適化問題として定式化されるが，有限要素法によって離散化することで有限次元の最適化問題として近似的に解くことが可能である．離散化された問題は大規模な制約付き非凸最適化問題となる．本研究では，これに対して加速射影勾配法（加速近接勾配法）[1] とよばれる最適化アルゴリズムを適用し，数値実験によって既存手法より高速に収束することを示す．

2.　トポロジー最適化問題

トポロジー最適化は，1988 年に Bendsøe & Kikuchi [2] によって提案され，現在では建築・機械・流体・航空宇宙工学や医療などの幅広い分野に応用が拡大している [3]．

以下では，代表的な問題であるコンプライアンス最小化問題を例にとってトポロジー最適化問題の性質を説明する．コンプライアンス最小化問題は，図 1 に示されるように，与えられた荷重 $\boldsymbol{p}$ に対して最も剛性が高い（最も変形が小さい）形状を求める問題である．トポロジー最適化という名称は，図 1 に示されるように初期形状（図 1 上）と位相同型でない，つまり穴の数などが異なる解（図 1 下）が得られるということを意味する．

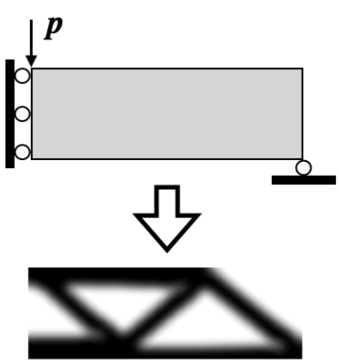

図 1: コンプライアンス最小化問題

コンプライアンス最小化問題は次のように表される [4]：

$$
\begin{aligned}
\underset{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n}{\text{Minimize}} \quad & \boldsymbol{p}^{\mathrm{T}} K(H\boldsymbol{x})^{-1}\boldsymbol{p} \\
\text{subject to} \quad & \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - V_0 = 0, \\
& \boldsymbol{0} \le \boldsymbol{x} \le \boldsymbol{1}.
\end{aligned} \tag{1}
$$

ここで，$\boldsymbol{x}$ は密度ベクトルとよばれる変数，$\boldsymbol{p}$ は荷重ベクトルとよばれる定ベクトル，$K(\boldsymbol{x})$ は剛性行列，H はフィルタリングとよばれる操作に対応する定行列，V_0 は体積の上限値を表す正定数である．

トポロジー最適化問題は次のような特徴をもつ．

1. 変数が非常に多い（大規模）．
2. 目的関数が非凸であり，制約が付く．
3. 目的関数値と勾配の計算コストが大きい．

1 より内点法などのアルゴリズムは 1 反復の計算コストが膨大になり実用的ではない．そこで本研究では，機械学習などの分野で近年盛んに研究されている 1 次法（目的関数の 1 階微分のみを用いた手法）を用いる．また，トポロジー最適化問題は式 (1) のように制約が単純な形で表されることが多い．この場合，射影勾配法などの 1 次法を用いることができる．3 は目的関数値および勾配を計算するために有限要素解析（大規模な 1 次方程式の求解）が必要になることが原因である．式 (1) では，剛性行列 $K(\boldsymbol{x})$ の逆行列の部分が有限要素解析に対応する．ただし実際のアルゴリズムでは，逆行列を計算せず，1 次方程式を解きその解を用いて目的関数値および勾配を計算する．このような性質から各反復で何回も目的関数値および勾配を計算するような手法（例えば直線探索など）は計算コストの観点から実用的でない．

上記の性質により，トポロジー最適化問題に対する最適化アルゴリズムの設計は難しく，研究も少ない．既存手法としては，最適性基準法 [2] とよばれる収束性が保証されないヒューリスティックな

手法や method of moving asymptotes (MMA) [5] とよばれる逐次凸近似アルゴリズムが挙げられる．これらの手法は目的関数の 1 階微分のみを用いるため 1 反復の計算コストが比較的少ないが，収束は遅い．そこで，本研究では，加速射影勾配法をトポロジー最適化問題に適用し，数値実験により既存手法より速く収束することを示す．

3. 提案手法

本稿では Ghadimi & Lan が提案した加速射影勾配法 [1] をトポロジー最適化問題に適用する．この手法は，目的関数が非凸の場合でも停留点への収束が保証される．

目的関数を f，実行可能領域を S とおく．提案手法では，$\boldsymbol{x}^0 = \boldsymbol{y}^0$ を初期値として，以下の一連の更新式を用いて $\boldsymbol{x}^k$ $(k = 1, 2, \ldots)$ を更新していく：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{z}^{k+1} &= \left(1 - \frac{2}{k+2}\right)\boldsymbol{x}^k + \frac{2}{k+2}\boldsymbol{y}^k, \\
\boldsymbol{y}^{k+1} &= \Pi_S\left(\boldsymbol{y}^k - \frac{(k+1)}{4L}\nabla f(\boldsymbol{z}^{k+1})\right), \\
\boldsymbol{x}^{k+1} &= \Pi_S\left(\boldsymbol{z}^{k+1} - \frac{1}{2L}\nabla f(\boldsymbol{z}^{k+1})\right).
\end{aligned}
$$

ただし，$\boldsymbol{y}^k$ および $\boldsymbol{z}^k$ は $\boldsymbol{x}^k$ を求めるための補助変数，Π_S は S への射影，L は目的関数の勾配のリプシッツ定数である．提案手法はベクトルの加算とスカラー倍および射影のみから構成されているため計算コストは低く，実装も容易である．

提案手法では，多くの加速勾配法と同じようにステップサイズを決める際に目的関数の勾配のリプシッツ定数 L が必要となる．しかし，L の値を具体的に求めることは非常に難しいため，何らかの方法で推定する必要がある．L が不明の場合に用いられる手法として，バックトラッキングが挙げられる．バックトラッキングでは k ステップでの L の推定値 L_k を十分小さい値からスタートして，適当な条件が満たされるまで L_k を徐々に大きくしていく．しかしこの手法では，そのような条件を確認するのに目的関数値の評価，すなわち有限要素解析を繰り返すため，計算コストが大きくなってしまう．そこで，本稿ではヒューリスティックな解決策として

$$
L_k = \frac{\|\nabla f(\boldsymbol{x}^k) - \nabla f(\boldsymbol{x}^{k-1})\|}{\|\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{x}^{k-1}\|}
$$

とおいて各反復ごとにステップサイズを決定する手法を提案する．ただし，L_0 は十分大きい値とする．このとき，L_k は実際の L 以下になるためアルゴリズムの収束性は保証されない．しかしながら，数値実験では数値不安定性は見られず，高速な収束が得られる．

4. おわりに

本研究では加速射影勾配法をトポロジー最適化問題に適用した．提案手法は停留点への収束性が保証される．また，数値実験により既存手法より高速に収束することを示す．数値実験の詳細は当日述べる．

今後の課題として，より広いクラスのトポロジー最適化問題に対する高速な 1 次法の開発およびトポロジー最適化問題に適したステップサイズ決定法の研究があげられる．

参考文献

[1] S. Ghadimi and G. Lan. Accelerated gradient methods for nonconvex nonlinear and stochastic programming, *Mathematical Programming*, vol. 156 (2016), pp. 59–99.

[2] M. P. Bendsøe and N. Kikuchi. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 71 (1988), pp. 891–909.

[3] M. P. Bendsøe and O. Sigmund. *Topology Optimization: Theory, Methods and Applications*, Springer-Verlag, Berlin, 2004.

[4] E. Andreassen, A. Clausen, M. Schevenels, B. S. Lazarov and O. Sigmund. Efficient topology optimization in MATLAB using 88 lines of code, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, vol. 43 (2011), pp. 1–16.

[5] K. Svanberg. The method of moving asymptotes—A new method for structural optimization, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 24 (1987), pp. 359–373.