数理解析研究所講究録
第2037巻 2017年 5-16

形状最適化問題における評価関数の2階微分と H^1 Newton 法

Second derivative of cost function and H^1 Newton method in shape optimization problem

名古屋大学・情報科学研究科　畔上 秀幸
Hideyuki Azegami
Graduate School of Information Science, Nagoya University

概要

本論文では，偏微分方程式の境界値問題が定義された領域を設計対象にした領域変動型形状最適化問題における評価関数の2階微分の評価方法を示し，それを用いた Newton 法に基づく解法 (H^1 Newton 法) を提案する．最初に，有限次元空間上で制約付きの最適化問題に対する勾配法と Newton 法について復習する．それらを基にして形状最適化問題に対する勾配法と Newton 法を考える．形状最適化問題に対する勾配法 (H^1 勾配法) は，評価関数の領域変動に対する Fréchet 微分 (形状微分) と H^1 級関数空間上の強圧的な双1次形式を用いて定義されていた．H^1 Newton 法では，それらに2階 Fréchet 微分 (形状 Hesse 形式) を追加して構成される．

1 はじめに

偏微分方程式の境界値問題が定義された領域の形状を最適化する問題は形状最適化問題とよばれる．そのなかでも，初期領域からの Lagrange 描像による領域変動を設計変数においた問題は領域変動型形状最適化問題とよばれる．本論文において形状最適化問題とは，領域変動型を指すことにする．

このような形状最適化問題において，評価関数は設計変数と境界値問題の解で構成された汎関数によって定義される．評価関数や境界値問題の解の領域変動に対する Fréchet 微分は形状微分とよばれる．これまで，評価関数の形状微分は，多くの場合，境界積分型の公式を用いることによって，境界積分として求められてきた (たとえば，[1])．このような形状微分を用いた勾配法に基づく解法は，H^1 勾配法としてすでに開発されている (たとえば，[2] において，関数の形状偏微分公式による形状微分を用いた H^1 勾配法)．このような形状微分を用いて，2階の形状微分 (形状 Hesse 形式) を求める研究もおこなわれている (たとえば，[3] p. 501 Chap. 9 Sec. 6)．しかしながら，評価式は複雑となり，境界や境界値問題の解に対して厳しい正則性が必要となる．

一方，評価関数の形状微分は領域積分型でも求められることがわかっている (たとえば，[2] において，関数の形状微分公式による形状微分)．この形状微分を用いれば，2階の形

状微分 (形状 Hesse 形式) を求めても，境界や境界値問題の解に対して厳しい正則性は必要とならない．

そこで，本論文では，Poisson 問題の解を用いて一般的な評価関数を定義して，その 2 階形状微分が得られるまでの過程を示す．さらに，それを用れば H^1 級関数空間上の Newton 法 (H^1 Newton 法) が構成されることを示す．最初に，有限次元空間上で制約付きの最適化問題に対する勾配法と Newton 法を用いた解法について復習してから，本題に入ることにする．

2　勾配法と Newton 法

最初に，制約なしの問題に対して勾配法と Newton 法について復習する．以下では d を自然数とする．

問題 1 (制約なし最適化問題) $X = \mathbb{R}^d$，$f : X \to \mathbb{R}$ に対して，

$$\min_{\boldsymbol{x}\in X} f(\boldsymbol{x})$$

を満たす $\boldsymbol{x}$ を求めよ．

評価関数 f の試行点 $\boldsymbol{x}_k$ 周りの Taylor 展開

$$f(\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{y}) = f(\boldsymbol{x}_k) + \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k) \cdot \boldsymbol{y} + o(\|\boldsymbol{y}\|_X) \tag{1}$$

において，勾配 $\boldsymbol{g} \in X'$ (X の双対空間，ここでは $X' = \mathbb{R}^d$) が計算されたとき，勾配法は，正定値対称行列 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{d\times d}$：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}, \quad \exists\alpha > 0 : \ \boldsymbol{y} \cdot (\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}) \geq \alpha \|\boldsymbol{y}\|_{\mathbb{R}^d}^2 \ \ \forall \boldsymbol{y} \in X \tag{2}$$

を用いて，

$$\boldsymbol{y}_g \cdot (\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}) = -\boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{y} \quad \forall \boldsymbol{y} \in X \tag{3}$$

を満たすように探索ベクトル $\boldsymbol{y}_g \in X$ を求める方法として定義される．

実際，(3) を (1) に代入すれば，

$$f(\boldsymbol{x}_k + \epsilon \boldsymbol{y}_g) - f(\boldsymbol{x}_k) = -\epsilon \boldsymbol{y}_g \cdot (\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_g) + o(\epsilon) \leq -\epsilon\alpha \|\boldsymbol{y}_g\|_X^2 + o(\epsilon)$$

が成り立つ．ただし，α は (2) と同一である．そこで，$\|\boldsymbol{y}_g\|_X$ が十分小さければ，$\boldsymbol{y}_g$ による変動は f を減少させることがわかる．

さらに，勾配 $\boldsymbol{g}$ の試行点 $\boldsymbol{x}_k$ 周りの Taylor 展開

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{y}_g) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k) + \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_k)\boldsymbol{y}_g + \boldsymbol{o}\left(\|\boldsymbol{y}_g\|_X\right)$$

を満たす勾配 $\boldsymbol{g}$ と Hesse 行列 $\boldsymbol{H}$ が計算されたとき，Newton 法は，

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{y}_g) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_k) + \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_k)\boldsymbol{y}_g = \boldsymbol{0}_{X'}$$

とおいた関係より，探索ベクトル $\boldsymbol{y}_g \in X$ を求める方法である．すなわち，Newton 法は

$$\boldsymbol{y}_g \cdot (\boldsymbol{H}\boldsymbol{y}) = -\boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{y} \quad \forall \boldsymbol{y} \in X \tag{4}$$

を満たすように探索ベクトル $\boldsymbol{y}_g \in X$ を求める方法である．

3 等式制約つき問題における評価関数の勾配と Hesse 行列

形状最適化問題は，偏微分方程式の境界値問題を等式制約にもつ最適化問題である．ここでは，それと同じ構造をもつ有限次元空間上の最適設計問題を取り上げて，等式制約つきの最適化問題における評価関数の勾配と Hesse 行列の求め方について復習する．ここでは，$\boldsymbol{\phi} \in X = \mathbb{R}^d$ を設計変数として，$\boldsymbol{u} \in U = \mathbb{R}^n$ $(n \in \mathbb{N},\, d > n)$ を状態変数 ($\boldsymbol{\phi}$ が与えられたとき，等式制約によって一意に決定する変数) として，次の問題を考える．

問題 2 (等式制約つき最適化問題) $f : X \times U \to \mathbb{R}$ および $\boldsymbol{h} = (h_1, \cdots, h_n)^{\mathrm{T}} : X \times U \to U'$ に対して，

$$\min_{(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u}) \in X \times U} \{ f(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}) \mid \boldsymbol{h}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}) = \boldsymbol{0}_{U'} \}$$

を満たす $(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u})$ を求めよ．

$\boldsymbol{\phi} \in X$ の変動を $\boldsymbol{\varphi} \in X$ とかくことにして，任意の $\boldsymbol{\varphi} \in X$ に対する評価関数 f の微分を Lagrange 乗数法で求めてみる．問題 2 に対する Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = f(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}) + \mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = f(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}) + \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{h}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u})$$

とおく．$\boldsymbol{v} \in U$ は等式制約に対する Lagrange 乗数である．$(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ の任意変動 $(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{u}', \boldsymbol{v}') \in X \times U \times U$ に対して，$\mathscr{L}$ の微分は

$$\begin{aligned} &\mathscr{L}'(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{u}', \boldsymbol{v}'] \\ &\quad = \mathscr{L}_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{\varphi}] + f_{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u})[\boldsymbol{u}'] + \mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}'] + \mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{v}'] \end{aligned} \tag{5}$$

とかける．(17) の右辺第 4 項は，等式制約の変分表現になっており，$\boldsymbol{u}$ が等式制約を満たしていれば 0 となる．(17) の右辺第 2 項と第 3 項は，$\boldsymbol{v}$ が

$$f_{\boldsymbol{u}} + \mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{0}_{U'} \tag{6}$$

を満たすように決定されれば 0 となる．このような $\boldsymbol{u}$ と $\boldsymbol{v}$ を用いるとき，設計変数の変動に対する評価関数 $f(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}(\boldsymbol{\phi})) = \tilde{f}(\boldsymbol{\phi})$ の微分は

$$\tilde{f}'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}] = \mathscr{L}_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{\varphi}] = \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{\varphi} \tag{7}$$

によって得られる．ここで，$\boldsymbol{g} \in X'$ は勾配を表す．

Hesse 行列は次のように得られる．$(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u})$ の任意変動 $(\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{u}'_1) \in X \times U$ と $(\boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{u}'_2) \in X \times U$ に対して，

$$\begin{aligned} &\mathscr{L}''(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[(\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{u}'_1), (\boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{u}'_2)] \\ &\quad = (\mathscr{L}_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{\varphi}_1] + \mathscr{L}_{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}'_1])_{\boldsymbol{\phi}}[\boldsymbol{\varphi}_2] \\ &\qquad + (\mathscr{L}_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{\varphi}_1] + \mathscr{L}_{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}'_1])_{\boldsymbol{u}}[\boldsymbol{u}'_2] \\ &\quad = \mathscr{L}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2] + \mathscr{L}_{\boldsymbol{u}\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{\varphi}_2] \\ &\qquad + \mathscr{L}_{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{u}'_2] + \mathscr{L}_{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2] \end{aligned} \tag{8}$$

となる．ここで，$i \in \{1,2\}$ に対して，φ_i と $\boldsymbol{u}'_i$ は，等式制約により，次のように関連付けられる．すなわち，任意変動 $(\varphi_i, \boldsymbol{u}'_i) \in X \times U$ に対して，

$$\begin{aligned}\mathscr{L}'_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\varphi_i,\boldsymbol{u}'_i] &= \mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\varphi_i] + \mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}'_i] \\ &= \mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\varphi_i] + \mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u}'_i,\boldsymbol{v}) = 0 \end{aligned} \tag{9}$$

が成り立つ．これより，

$$\boldsymbol{u}'_i = \boldsymbol{p}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\varphi_i] \tag{10}$$

が得られる．そこで，(10) を (8) に代入したとき，

$$h(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\varphi_1,\varphi_2] = \mathscr{L}''(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[(\varphi_1,\boldsymbol{p}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\varphi_1]),(\varphi_2,\boldsymbol{p}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\varphi_2])] \tag{11}$$

が任意の $(\varphi_1,\varphi_2) \in X^2$ に対する有界双線形関数 $\mathcal{L}^2(X \times X;\mathbb{R})$ $(= \mathcal{L}(X;\mathcal{L}(X;\mathbb{R})), \mathcal{L}$ は有界線形作用素を表す) となったとき，h を設計変数の変動に対する評価関数 $f(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\phi})) = \tilde{f}(\boldsymbol{\phi})$ の 2 階微分 ($\tilde{f}''(\boldsymbol{\phi})[\varphi_1,\varphi_2]$ とかく) あるいは Hesse 形式とよぶことにする．

3.1 簡単な問題を用いた検証

簡単な最適設計問題を用いて，(11) の h の正当性を確認する．ここでは，図 1 のような 2 つの断面積をもつ 1 次元線形弾性体に対する次の問題を考える．2 つの断面積 $\boldsymbol{a} = (a_1,a_2)^{\mathrm{T}} \in X = \mathbb{R}^2$ を設計変数，2 つの変位 $\boldsymbol{u} = (u_1,u_2)^{\mathrm{T}} \in U = \mathbb{R}^2$ を状態変数とする．$\boldsymbol{a}$ が与えられたとき，等式制約 (状態決定問題) を次のように定義する．

問題 3 (段つき 1 次元線形弾性問題) 図 1 の 1 次元線形弾性体に対して，$l \in \mathbb{R}$ $(l > 0)$, $e_{\mathrm{Y}} \in \mathbb{R}$ $(e_{\mathrm{Y}} > 0)$, $\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^2$ および $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^2$ が与えられたとき，

$$\boldsymbol{K}(\boldsymbol{a})\boldsymbol{u} = \frac{e_{\mathrm{Y}}}{l}\begin{pmatrix} a_1+a_2 & -a_2 \\ -a_2 & a_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{p} \tag{12}$$

を満たす $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^2$ を求めよ．

最適設計問題を次のように定義する．

問題 4 (平均コンプライアンス最小化問題) 2 つの外力 $\boldsymbol{p} = (p_1,p_2)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^2$ に対して，

$$\min_{(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u}) \in X \times U} \{ f(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{u} \mid \text{問題 } 3 \}$$

を満たす $(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u})$ を求めよ．

まず，代入法で h を求めてみる．$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{K}^{-1}(\boldsymbol{a})\boldsymbol{p}$ を $f(\boldsymbol{u})$ に代入すれば，

$$\tilde{f}(\boldsymbol{a}) = f(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{a})) = \boldsymbol{p} \cdot \left(\boldsymbol{K}^{-1}(\boldsymbol{a})\boldsymbol{p}\right) = \frac{l}{e_{\mathrm{Y}}}\left(\frac{(p_1+p_2)^2}{a_1} + \frac{p_2^2}{a_2}\right)$$

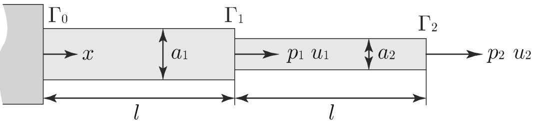

図 1: 2 つの断面積をもつ 1 次元線形弾性体

を得る．$\boldsymbol{a}$ の任意変動を $\boldsymbol{b} \in X$ とすれば，$\tilde{f}$ を $\boldsymbol{a}$ で偏微分することによって，

$$\tilde{f}'(\boldsymbol{a})[\boldsymbol{b}] = \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial \tilde{f}}{\partial a_1} & \dfrac{\partial \tilde{f}}{\partial a_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \frac{l}{e_{\mathrm{Y}}} \begin{pmatrix} -\dfrac{(p_1+p_2)^2}{a_1^2} & -\dfrac{p_2^2}{a_2^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{13}$$

を得る．さらに，それをもう一度 $\boldsymbol{a}$ で偏微分すれば，

$$\begin{aligned} &\tilde{f}''(\boldsymbol{a})[\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2] = h(\boldsymbol{a})[\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2] = \boldsymbol{b}_1\cdot(\boldsymbol{H}\boldsymbol{b}_2) \\ &\quad = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial a_1 \partial a_1} & \dfrac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial a_1 \partial a_2} \\ \dfrac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial a_2 \partial a_1} & \dfrac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial a_2 \partial a_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \frac{l}{e_{\mathrm{Y}}} \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{2(p_1+p_2)^2}{a_1^3} & 0 \\ 0 & \dfrac{2p_2^2}{a_2^3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{14}$$

となる．$a_1, a_2 > 0$ のとき，$\boldsymbol{H}$ は正定値となる．

次に，(11) を求めた方法で h を求めてみる．問題 4 に対する Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = f(\boldsymbol{u}) + \mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}\cdot(-\boldsymbol{K}(\boldsymbol{a})\boldsymbol{u} + \boldsymbol{p})$$

とおく．$\boldsymbol{v} \in U$ は Lagrange 乗数である．$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})$ の任意変動 $(\boldsymbol{b},\boldsymbol{u}',\boldsymbol{v}') \in X \times U \times U$ に対して，$\mathscr{L}$ の微分は

$$\begin{aligned} &\mathscr{L}'(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\boldsymbol{b},\boldsymbol{u}',\boldsymbol{v}'] \\ &\quad = -\left\{\boldsymbol{v}\cdot\begin{pmatrix} \dfrac{\partial \boldsymbol{K}(\boldsymbol{a})}{\partial a_1}\boldsymbol{u} & \dfrac{\partial \boldsymbol{K}(\boldsymbol{a})}{\partial a_2}\boldsymbol{u} \end{pmatrix}\right\}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{u}' - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{K}(\boldsymbol{a})\boldsymbol{u}' + \boldsymbol{v}'\cdot(-\boldsymbol{K}(\boldsymbol{a})\boldsymbol{u} + \boldsymbol{p}) \end{aligned} \tag{15}$$

となる．(15) の右辺第 4 項は，$\boldsymbol{u}$ が等式制約を満たしていれば 0 となる．(15) の右辺第 2 項と第 3 項は，$\boldsymbol{v}$ が

$$\boldsymbol{K}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{a})\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p} \tag{16}$$

を満たすように決定されれば 0 となる．$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{K}^{\mathrm{T}}$ より，(16) は等式制約と一致して，自己随伴関係 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}$ が得られる．このような $\boldsymbol{u}$ と $\boldsymbol{v}$ を用いるとき，設計変数の変動に対する評価関数 $f(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u}(\boldsymbol{a})) = \tilde{f}(\boldsymbol{a})$ の微分は

$$\tilde{f}'(\boldsymbol{a})[\boldsymbol{b}] = \mathscr{L}_{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\boldsymbol{b}] = -\left\{\boldsymbol{v}\cdot\begin{pmatrix} \dfrac{\partial \boldsymbol{K}(\boldsymbol{a})}{\partial a_1}\boldsymbol{u} & \dfrac{\partial \boldsymbol{K}(\boldsymbol{a})}{\partial a_2}\boldsymbol{u} \end{pmatrix}\right\}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{b} \tag{17}$$

となる．(17) の計算によって得られた $\boldsymbol{g}$ は，等式制約を用いれば，代入法による (13) と一致することが確かめられる．

Hesse 行列は次のように得られる．$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u})$ の任意変動 $(\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{u}_1')\in X\times U$ および $(\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{u}_2')\in X\times U$ に対して

$$\begin{aligned}
\mathscr{L}''(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[(\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{u}_1'),(\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{u}_2')] &= (\mathscr{L}_{0\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\boldsymbol{b}_1]+\mathscr{L}_{0\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}_1'])_{\boldsymbol{a}}[\boldsymbol{b}_2]\\
&\quad+(\mathscr{L}_{0\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\boldsymbol{b}_1]+\mathscr{L}_{0\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\boldsymbol{u}_1'])_{\boldsymbol{u}}[\boldsymbol{u}_2']\\
&=\begin{pmatrix}\boldsymbol{b}_2\\ \boldsymbol{u}_2'\end{pmatrix}\cdot\left(\begin{pmatrix}\mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}} & \mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{a}\boldsymbol{u}}\\ \mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{u}\boldsymbol{a}} & \mathscr{L}_{\mathrm{S}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{b}_1\\ \boldsymbol{u}_1'\end{pmatrix}\right)\\
&=\begin{pmatrix}\boldsymbol{b}_2\\ \boldsymbol{u}_2'\end{pmatrix}\cdot\left(\begin{pmatrix}\boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^{2\times2}} & \begin{pmatrix}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_{a_1}\\ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_{a_2}\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}\boldsymbol{K}_{a_1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} & \boldsymbol{K}_{a_2}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}\end{pmatrix} & \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^{2\times2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{b}_1\\ \boldsymbol{u}_1'\end{pmatrix}\right)
\end{aligned}\tag{18}$$

となる．ここで，$i\in\{1,2\}$ に対して，$\boldsymbol{b}_i$ と $\boldsymbol{u}_i'$ は，等式制約により，次のように関連付けられる．すなわち，任意変動 $(\boldsymbol{b}_i,\boldsymbol{u}_i')\in X\times U$ に対して，

$$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}'(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\boldsymbol{b}_i,\boldsymbol{u}_i']=\boldsymbol{v}\cdot\{-(\boldsymbol{K}'(\boldsymbol{a})[\boldsymbol{b}_i])\boldsymbol{u}-\boldsymbol{K}(\boldsymbol{a})(\boldsymbol{u}_i')\}=0 \tag{19}$$

が成り立つ．これより，

$$\boldsymbol{u}_i'=-\boldsymbol{K}^{-1}(\boldsymbol{a})(\boldsymbol{K}'(\boldsymbol{a})[\boldsymbol{b}_i])=\begin{pmatrix}-\dfrac{u_1}{a_1} & 0\\ -\dfrac{u_1}{a_1} & -\dfrac{u_2-u_1}{a_2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_{i1}\\ b_{i2}\end{pmatrix} \tag{20}$$

が得られる．(20) を (18) に代入し，自己随伴関係を用いれば，

$$h(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2]=\mathscr{L}''(\boldsymbol{a},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})[(\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{u}_1'),(\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{u}_2')]=\boldsymbol{b}_1\cdot(\boldsymbol{H}\boldsymbol{b}_2) \tag{21}$$

となる．ここで，$\boldsymbol{H}$ は，等式制約を用いれば，代入法で得られた (14) と一致する．

4 不等式制約つき最適化問題における解法

3 節で考えた問題は，評価関数が一つであった．最適設計問題は，通常，複数の評価関数による不等式制約が課された問題となる．ここではそのような問題の解法について考える．設計変数の変動に対する個々の評価関数の勾配や Hesse 形式は 3 節の方法で得られていると仮定する．これらを使う場合には，状態変数と等式制約を省略することができて，最適設計問題は次の問題に帰着する．

問題 5 (不等式制約つき最適化問題) $X=\mathbb{R}^d$ とする．$f_0,\cdots,f_m\in C^2(X;\mathbb{R})$ に対して，

$$\min_{\boldsymbol{\phi}\in X}\{f_0(\boldsymbol{\phi})\mid f_1(\boldsymbol{\phi})\le 0,\cdots,f_m(\boldsymbol{\phi})\le 0\}$$

を満たす $\boldsymbol{\phi}$ を求めよ．

最初に，勾配法による解法を示す．繰り返し数 $k\in\{0,1,2,\cdots\}$ に対して，$\boldsymbol{\phi}_k$ のときの有効な制約に対する添え字の集合を $I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k)=\{i\in\{1,\cdots,m\}\mid f_i(\boldsymbol{\phi}_k)\ge 0\}=\{i_1,\cdots,i_{|I_{\mathrm{A}}|}\}$ とかくことにする．また，$S=\{\boldsymbol{\phi}\in\mathcal{D}\mid f_1(\boldsymbol{\phi},u)\le 0,\cdots,f_m(\boldsymbol{\phi},u)\le 0\}$ とおく．勾配法による解法では，不等式制約を満たす探索ベクトル $\boldsymbol{\varphi}_g\in X$ を次の問題の解として求めていく．

問題 6 (不等式制約つき問題に対する勾配法) 試行点 $\boldsymbol{\phi}_k \in S$ において $f_0(\boldsymbol{\phi}_k), f_{i_1}(\boldsymbol{\phi}_k) = 0, \cdots, f_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}(\boldsymbol{\phi}_k) = 0, \boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{\phi}_k), \boldsymbol{g}_{i_1}(\boldsymbol{\phi}_k), \cdots, \boldsymbol{g}_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}(\boldsymbol{\phi}_k)$ を既知とする．また，$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{d\times d}$ を正定値実対称行列，c_a を正の定数とする．このとき，

$$q(\boldsymbol{\varphi}_g) = \min_{\boldsymbol{\varphi}\in X}\left\{ q(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varphi}\cdot(c_a\boldsymbol{A}\boldsymbol{\varphi}) + \boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{\phi}_k)\cdot\boldsymbol{\varphi} + f_0(\boldsymbol{\phi}_k) \;\middle|\; f_i(\boldsymbol{\phi}_k) + \boldsymbol{g}_i(\boldsymbol{\phi}_k)\cdot\boldsymbol{\varphi} \le 0 \text{ for } i \in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k) \right\}$$

を満たす $\boldsymbol{\phi}_{k+1} = \boldsymbol{\phi}_k + \boldsymbol{\varphi}_g$ を求めよ．

問題 6 の最小点 $\boldsymbol{\varphi}_g$ における KKT 条件は，

$$c_a\boldsymbol{A}\boldsymbol{\varphi}_g + \boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{\phi}_k) + \sum_{i\in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k)} \lambda_{i\,k+1}\boldsymbol{g}_i(\boldsymbol{\phi}_k) = \boldsymbol{0}_{X'}, \tag{22}$$

$$f_i(\boldsymbol{\phi}_k) + \boldsymbol{g}_i(\boldsymbol{\phi}_k)\cdot\boldsymbol{\varphi}_g \le 0 \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k), \tag{23}$$

$$\lambda_{i\,k+1}\left(f_i(\boldsymbol{\phi}_k) + \boldsymbol{g}_i(\boldsymbol{\phi}_k)\cdot\boldsymbol{\varphi}_g\right) = 0 \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k), \tag{24}$$

$$\lambda_{i\,k+1} \ge 0 \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k) \tag{25}$$

となる．ここで，$\boldsymbol{\varphi}_{g0}, \boldsymbol{\varphi}_{gi_1}, \cdots, \boldsymbol{\varphi}_{gi_{|I_{\mathrm{A}}|}}$ を $i \in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k)$ ごとに勾配法を適用したときの解とする．すなわち，

$$\boldsymbol{\varphi}_{gi} = -\left(c_a\boldsymbol{A}\right)^{-1}\boldsymbol{g}_i \quad \text{for } i \in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k) \tag{26}$$

のように求める．また，$\boldsymbol{\lambda}_{k+1} \in \mathbb{R}^{|I_{\mathrm{A}}|}$ を未知の Lagrange 乗数とする．このとき，

$$\boldsymbol{\varphi}_g = \boldsymbol{\varphi}_g(\boldsymbol{\lambda}_{k+1}) = \boldsymbol{\varphi}_{g0} + \sum_{i\in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k)} \lambda_{i\,k+1}\,\boldsymbol{\varphi}_{gi} \tag{27}$$

は (22) を満たす．さらに，(23) は，不等号を等号におきかえたとき，

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{g}_{i_1}\cdot\boldsymbol{\varphi}_{gi_1} & \cdots & \boldsymbol{g}_{i_1}\cdot\boldsymbol{\varphi}_{gi_{|I_{\mathrm{A}}|}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{g}_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}\cdot\boldsymbol{\varphi}_{gi_1} & \cdots & \boldsymbol{g}_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}\cdot\boldsymbol{\varphi}_{gi_{|I_{\mathrm{A}}|}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{i_1\,k+1} \\ \vdots \\ \lambda_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}\,k+1} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} f_{i_1} + \boldsymbol{g}_{i_1}\cdot\boldsymbol{\varphi}_{g0} \\ \vdots \\ f_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}} + \boldsymbol{g}_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}\cdot\boldsymbol{\varphi}_{g0} \end{pmatrix} \tag{28}$$

となる．$\boldsymbol{g}_{i_1}, \cdots, \boldsymbol{g}_{i_{|I_{\mathrm{A}}|}}$ が 1 次独立ならば，$\boldsymbol{\lambda}_{k+1}$ は (28) により一意に決定される．ここで，$\lambda_{i\,k+1} < 0$ となる i を除いた制約に対する添え字の集合を $I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k)$ とおきなおし，(28) を再度解くことにする．このようにして得られた $(\boldsymbol{y}_g, \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) \in X \times \mathbb{R}^{|I_{\mathrm{A}}|}$ は，(22) から (25) を満たすことになる．

これらの関係を用いれば，図 2 のようなアルゴリズムが考えられる．ステップ (4) の勾配法には (27) を用いる．ステップ (5) では (28) を用いる．ステップ (6) の設計変数の更新には (26) が使われる．

Newton 法を使う場合には，次の問題を考える．

問題 7 (不等式制約つき問題に対する Newton 法) 試行点 $\boldsymbol{\phi}_k \in X$ において，$\boldsymbol{\lambda}_k \in \mathbb{R}^{|I_{\mathrm{A}}|}$ は KKT 条件を満たすとする．また，

$$\boldsymbol{H}_{\mathscr{L}}(\boldsymbol{\phi}_k) = \boldsymbol{H}_0(\boldsymbol{\phi}_k) + \sum_{i\in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{\phi}_k)} \lambda_{ik}\boldsymbol{H}_i(\boldsymbol{\phi}_k) \tag{29}$$

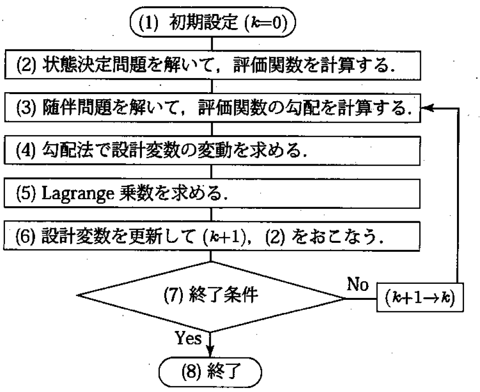

図 2: 不等式制約つき問題に対する勾配法のアルゴリズム

とおく．このとき，

$$q(\boldsymbol{\varphi}_g) = \min_{\boldsymbol{\varphi} \in X} \left\{ q(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varphi} \cdot (\boldsymbol{H}_{\mathscr{L}}(\boldsymbol{\phi}_k)\boldsymbol{\varphi}) + \boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{\phi}_k) \cdot \boldsymbol{\varphi} + f_0(\boldsymbol{\phi}_k) \;\middle|\; f_i(\boldsymbol{\phi}_k) + \boldsymbol{g}_i(\boldsymbol{\phi}_k) \cdot \boldsymbol{\varphi} \leq 0 \text{ for } i \in I_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{x}_k) \right\}$$

を満たす $\boldsymbol{\phi}_{k+1} = \boldsymbol{\phi}_k + \boldsymbol{\varphi}_g$ を求めよ．

問題 6 と問題 7 をくらべれば，$\boldsymbol{A}$ が $\boldsymbol{H}_{\mathscr{L}}$ におきかえられているだけである．そこで，Newton 法による解法は図 3 のようになる．ステップ (3) において Lagrange 乗数を求めているのは，(29) において λ_{i0} が必要となるためである．ステップ (5) の Newton 法では

$$\boldsymbol{\varphi}_{gi} = -\boldsymbol{H}_{\mathscr{L}}^{-1}\boldsymbol{g}_i \tag{30}$$

が使われる．ステップ (5) では (28) を用いる．ステップ (6) の設計変数の更新には (26) が使われる．

5 領域変動型形状最適化問題

形状最適化問題は次のように構成される．Ω_0 を $d \in \{2,3\}$ 次元の有界な初期領域とする．領域変動の変位 $\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D} = W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d;\mathbb{R}^d)$ を設計変数とおく．変動後の領域を $\Omega(\boldsymbol{\phi})$ とかくことにする．その境界 $\partial\Omega(\boldsymbol{\phi})$ は Dirichlet 境界 $\Gamma_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi})$ と Neumann 境界 $\Gamma_{\mathrm{N}}(\boldsymbol{\phi})$ で構成されるとする．$\Gamma_p(\boldsymbol{\phi}) \subset \Gamma_{\mathrm{N}}(\boldsymbol{\phi})$ は非同次 Neumann 境界とする．$\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D}$ に対して，状態決定問題 (Poisson 問題) を次のように定義する．以下では，$\boldsymbol{\nu}$ は法線を表し，$\partial_\nu = \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\nabla}$ とかく．

問題 8 (領域変動型 Poisson 問題) $\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D}$ に対して，$b(\boldsymbol{\phi}) : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$，$p_{\mathrm{N}}(\boldsymbol{\phi}) : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$，$u_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi}) : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ が適切に与えられたとき，

$$-\Delta u = b(\boldsymbol{\phi}) \quad \text{in } \Omega(\boldsymbol{\phi}), \quad \partial_\nu u = p_{\mathrm{N}}(\boldsymbol{\phi}) \quad \text{on } \Gamma_p(\boldsymbol{\phi}), \quad \partial_\nu u = 0 \quad \text{on } \Gamma_{\mathrm{N}}(\boldsymbol{\phi}) \setminus \bar{\Gamma}_p(\boldsymbol{\phi})$$

を満たす $u - u_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi}) \in U$ を求めよ．ただし，$U(\boldsymbol{\phi}) = \left\{ u \in H^1(\mathbb{R}^d;\mathbb{R}) \;\middle|\; u = 0 \text{ on } \Gamma_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi}) \right\}$ とする．

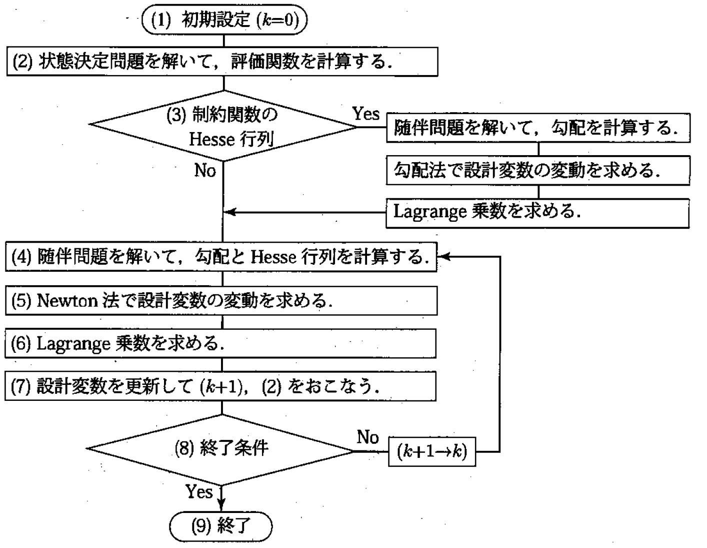

図 3: 不等式制約つき最適化問題に対する Newton 法のアルゴリズム

評価関数を $i \in \{0, 1, \cdots, m\}$ に対して，

$$f_i(\boldsymbol{\phi}, u) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \zeta_i(\boldsymbol{\phi}, u, \boldsymbol{\nabla} u)\,\mathrm{d}x + \int_{\Gamma_{\eta i}(\boldsymbol{\phi})} \eta_{\mathrm{N}i}(\boldsymbol{\phi}, u)\,\mathrm{d}\gamma - \int_{\Gamma_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi})} v_{\mathrm{D}i}(\boldsymbol{\phi})\,\partial_\nu u\,\mathrm{d}\gamma - c_i \quad (31)$$

とおく．ただし，ζ_i と $\eta_{\mathrm{N}i}$ は与えられた関数，c_i は定数とする．

これらの評価関数を用いて，領域変動型の形状最適化問題を次のように定義する．

問題 9 (領域変動型形状最適化問題) f_i を (31) とする．このとき，

$$\min_{(\boldsymbol{\phi}, u - u_{\mathrm{D}}) \in \mathcal{D} \times U} \left\{ f_0(\boldsymbol{\phi}, u) \mid f_1(\boldsymbol{\phi}, u) \le 0, \cdots, f_m(\boldsymbol{\phi}, u) \le 0,\ \text{問題 } 8 \right\}$$

を満たす $\Omega(\boldsymbol{\phi})$ を求めよ．

6 評価関数の形状微分と形状 Hesse 形式

3 節で示した Lagrange 乗数法を用いた手順に沿って，f_i の形状微分と形状 Hesse 形式を求める過程を示す．最初に，形状微分を求める．f_i に対する Lagrange 関数を

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

とおく．ただし，$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}$ は問題 8 の Lagrange 関数で

$$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{\phi}, u, v_i) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} (-\boldsymbol{\nabla} u \cdot \boldsymbol{\nabla} v_i + b v_i)\,\mathrm{d}x + \int_{\Gamma_p(\boldsymbol{\phi})} p_{\mathrm{N}} v_i\,\mathrm{d}\gamma + \int_{\Gamma_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi})} \{(u - u_{\mathrm{D}})\,\partial_\nu v_i + v_i \partial_\nu u\}\,\mathrm{d}\gamma$$

とおく．v_i は Lagrange 乗数 (随伴変数) として導入された．文献 [2] の命題 4.4 と命題 4.7 より $\mathscr{L}_i$ の微分 $\mathscr{L}_i'$ を求め，u の任意変動に対する $\mathscr{L}_i$ の停留条件より，v_i を決定するための次の問題を得る．

問題 10 (f_i に対する随伴問題) $\phi \in \mathcal{D}$ に対して問題 8 の解 u が与えられたとき，

$$
\begin{aligned}
-\Delta v_i &= \zeta_{iu}(\boldsymbol{\phi}, u, \boldsymbol{\nabla} u) - \boldsymbol{\nabla}\cdot\zeta_{i\boldsymbol{\nabla} u}(\boldsymbol{\phi}, u, \boldsymbol{\nabla} u) \quad \text{in } \Omega(\boldsymbol{\phi}),\\
\partial_\nu v_i &= \eta_{\mathrm{N}iu}(\boldsymbol{\phi}, u) + \zeta_{i\boldsymbol{\nabla} u}(\boldsymbol{\phi}, u, \boldsymbol{\nabla} u)\cdot\boldsymbol{\nu} \quad \text{on } \Gamma_{\eta i}(\boldsymbol{\phi}),\\
\partial_\nu v_i &= \zeta_{i\boldsymbol{\nabla} u}(\boldsymbol{\phi}, u, \boldsymbol{\nabla} u)\cdot\boldsymbol{\nu} \quad \text{on } \Gamma_{\mathrm{N}}(\boldsymbol{\phi})\setminus\bar{\Gamma}_{\eta i}(\boldsymbol{\phi})
\end{aligned}
$$

を満たす $v_i - v_{\mathrm{D}i} \in U$ を求めよ．

これらの解を用いて，$f_i(u(\boldsymbol{\phi})) = \tilde{f}_i(\boldsymbol{\phi})$ の形状微分は，任意の $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{D}$ に対して

$$
\begin{aligned}
f_i'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}] &= \mathscr{L}_{i\boldsymbol{\phi}'}(\boldsymbol{\phi}, u, v_i)[\boldsymbol{\varphi}] = \langle \boldsymbol{g}_i, \boldsymbol{\varphi}\rangle\\
&= \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \left(\boldsymbol{G}_{\Omega i}\cdot\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}^{\mathrm{T}}\right) + g_{\Omega i}\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\varphi}\right)\mathrm{d}x + \int_{\Gamma_p(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{g}_{pi}\cdot\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}\gamma\\
&\quad + \int_{\partial\Gamma_p(\boldsymbol{\phi})\cup\Theta_p(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{g}_{\partial pi}\cdot\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}\varsigma + \int_{\Gamma_{\eta i}(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{g}_{\eta i}\cdot\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}\gamma + \int_{\partial\Gamma_{\eta i}(\boldsymbol{\phi})\cup\Theta_{\eta i}(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{g}_{\partial\eta i}\cdot\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}\varsigma
\end{aligned}
\tag{32}
$$

のように得られる．ここで，次のように定義する．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{G}_{\Omega i} &= \boldsymbol{\nabla} u(\boldsymbol{\nabla} v_i)^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\nabla} v_i(\boldsymbol{\nabla} u)^{\mathrm{T}} - \zeta_{i\boldsymbol{\nabla} u}(\boldsymbol{\nabla} u)^{\mathrm{T}},\\
g_{\Omega i} &= \zeta_i - \boldsymbol{\nabla} u\cdot\boldsymbol{\nabla} v_i + b v_i,\\
\boldsymbol{g}_{pi} &= \kappa p_{\mathrm{N}} v_i\boldsymbol{\nu} - \sum_{j\in\{1,\cdots,d-1\}} \left\{\boldsymbol{\tau}_j\cdot\boldsymbol{\nabla}(p_{\mathrm{N}} v_i)\right\}\boldsymbol{\tau}_j, \quad \boldsymbol{g}_{\partial pi} = p_{\mathrm{N}} v_i\boldsymbol{\tau},\\
\boldsymbol{g}_{\eta i} &= \kappa\eta_{\mathrm{N}i}\boldsymbol{\nu} - \sum_{j\in\{1,\cdots,d-1\}} (\boldsymbol{\tau}_j\cdot\boldsymbol{\nabla}\eta_{\mathrm{N}i})\boldsymbol{\tau}_j, \quad \boldsymbol{g}_{\partial\eta i} = \eta_{\mathrm{N}i}\boldsymbol{\tau}.
\end{aligned}
$$

ただし，$\Theta_{(\cdot)}(\boldsymbol{\phi})$ は，$d = 2$ のとき $\Gamma_{(\cdot)}(\boldsymbol{\phi})$ 上の角点の集合を表し，$d = 3$ のとき，頂点と辺上の点の集合を表す．また，$\boldsymbol{\tau}_1, \cdots, \boldsymbol{\tau}_{d-1}$ および $\boldsymbol{\tau}$ は接線を表し，$\kappa = \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nu}$ とする．

f_i の 2 階形状微分は次のように得られる．$b = 0$ と ζ_i は $\boldsymbol{\nabla} u$ のみの関数を仮定する．このとき，$(\boldsymbol{\phi}, u)$ の任意変動 $(\boldsymbol{\varphi}_1, u_1'), (\boldsymbol{\varphi}_2, u_2') \in X \times U$ に対して，$\mathscr{L}_i$ の 2 階微分は

$$
\begin{aligned}
&\mathscr{L}_i''(\boldsymbol{\phi}, u, v_i)[(\boldsymbol{\varphi}_1, u_1'), (\boldsymbol{\varphi}_2, u_2')] = \mathscr{L}_{i\boldsymbol{\phi}'\boldsymbol{\phi}'}(\boldsymbol{\phi}, u, v_i)[\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2]\\
&\quad + \mathscr{L}_{i\boldsymbol{\phi}'u}(\boldsymbol{\phi}, u, v_i)[\boldsymbol{\varphi}_1, u_2'] + \mathscr{L}_{i\boldsymbol{\phi}'u}(\boldsymbol{\phi}, u, v_i)[\boldsymbol{\varphi}_2, u_1'] + \mathscr{L}_{iuu}(\boldsymbol{\phi}, u, v_i)[u_1', u_2']
\end{aligned}
\tag{33}
$$

のようにかける．一方，u_1' と u_2' が問題 8 の等式制約を満たす変動であると仮定すれば，$\mathscr{L}_{\mathrm{S}} = 0$ を $(\boldsymbol{\phi}, u)$ で微分した式より，$i \in \{1, 2\}$ に対して，

$$
\boldsymbol{\nabla} u_i' = \left\{\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}_i^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}_i^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\varphi}_i\right\}\boldsymbol{\nabla} u \tag{34}
$$

を得る．そこで，(34) を (33) に代入し，さらに，$\boldsymbol{\varphi}_1$ と $\boldsymbol{\varphi}_2$ の可換性を用いることによって，f_i の 2 階形状微分 (形状 Hesse 形式) は

$$
\begin{aligned}
h_i(\boldsymbol{\phi}, u, v_i)[\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2] &= \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \Big[(\boldsymbol{\nabla} u\cdot\boldsymbol{\nabla} v_i)\left\{\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}_2^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}_1^{\mathrm{T}} + (\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\varphi}_2)(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\varphi}_1)\right\}\\
&\quad + \zeta_i\left\{-\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}_2^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}_1^{\mathrm{T}} + (\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\varphi}_2)(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\varphi}_1)\right\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&-\left\{\zeta_{i\nabla u}(\nabla u)^{\mathrm{T}}\right\}\cdot\left\{\nabla\varphi_1^{\mathrm{T}}\nabla\varphi_2^{\mathrm{T}}+\nabla\varphi_2^{\mathrm{T}}\nabla\varphi_1^{\mathrm{T}}\right\}\\
&-\left\{(\zeta_{i\nabla u}-\nabla v_i)(\nabla u)^{\mathrm{T}}\right\}\left\{\nabla\varphi_1^{\mathrm{T}}\left(\nabla\varphi_2^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}+\nabla\varphi_2^{\mathrm{T}}\left(\nabla\varphi_1^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\right\}\\
&+\left\{(\zeta_{i\nabla u}-\nabla v_i)\cdot\left(\nabla\varphi_1^{\mathrm{T}}\nabla u\right)\right\}\nabla\cdot\varphi_2-\left\{\nabla u\cdot\left(\nabla\varphi_2^{\mathrm{T}}\nabla v_i\right)\right\}\nabla\cdot\varphi_1\\
&-\left\{\left(\nabla u(\nabla v_i)^{\mathrm{T}}+\nabla v_i(\nabla u)^{\mathrm{T}}\right)\cdot\nabla\varphi_2^{\mathrm{T}}\right\}\nabla\cdot\varphi_1-\left(\zeta_{i\nabla u(\nabla u)^{\mathrm{T}}}\nabla\varphi_2^{\mathrm{T}}\nabla u\right)\cdot\left(\nabla\varphi_1^{\mathrm{T}}\nabla u\right)\Bigg]\mathrm{d}x
\end{aligned}
$$

のように得られる．

7 H^1 勾配法と H^1 Newton 法

評価関数 f_i の形状勾配 $\boldsymbol{g}_i$ が得られれば，次のような X (H^1 級関数空間) 上の勾配法を考えることができる．

問題 11 (領域変動型 H^1 勾配法) X 上の有界かつ強圧的な双 1 次形式 $a_X : X \times X \to \mathbb{R}$ と $\boldsymbol{g}_i \in X'$ が与えられたとき，

$$a_X(\boldsymbol{\varphi}_{gi}, \boldsymbol{\psi}) = -\langle \boldsymbol{g}_i, \boldsymbol{\psi}\rangle \quad \forall \boldsymbol{\psi} \in X \tag{35}$$

を満たす $\boldsymbol{\varphi}_{gi} \in X$ を求めよ．

a_X には，たとえば，

$$a_X(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi}) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \left\{\left(\nabla\boldsymbol{\varphi}^{\mathrm{T}}\right)\cdot\left(\nabla\boldsymbol{\psi}^{\mathrm{T}}\right) + c_\Omega \boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{\psi}\right\}\mathrm{d}x \tag{36}$$

が使われる．ただし，c_Ω を正定数とする．問題 9 を H^1 勾配法を使って解くアルゴリズムは，図 3 において，ステップ (4) の勾配法を (35) におきかえることによって得られる．

さらに，評価関数 f_i の形状 Hesse 形式 h_i が得られれば，次のような X 上の Newton 法が考えられる．

問題 12 (領域変動型 H^1 Newton 法) $i \in \{0, 1, \cdots, m\}$ に対して，f_i の $\boldsymbol{\phi}_k \in \mathcal{D}$ における形状微分 $\boldsymbol{g}_i \in X'$ と形状 Hesse 形式 $h_i \in \mathcal{L}^2(X \times X; \mathbb{R})$ ($\mathcal{L}$ は線形作用素全体の集合) は与えられているとする．問題 9 に対する Lagrange 関数 $\mathscr{L}$ の Hesse 形式を，任意の $\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2 \in X$ に対して，

$$h_{\mathscr{L}}(\boldsymbol{\phi}_k)[\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2] = h_0(\boldsymbol{\phi}_k)[\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2] + \sum_{i\in\{1,\cdots,m\}} \lambda_{ik} h_i(\boldsymbol{\phi}_k)[\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2]$$

とおく．また，$a_X : X \times X \to \mathbb{R}$ を $h_{\mathscr{L}}(\boldsymbol{\phi}_k)$ の X における強圧性と有界性を補うための双 1 次形式とする．このとき，任意の $\boldsymbol{\psi} \in X$ に対して，

$$h_{\mathscr{L}}(\boldsymbol{\phi}_k)[\boldsymbol{\varphi}_{gi}, \boldsymbol{\psi}] + a_X(\boldsymbol{\varphi}_{gi}, \boldsymbol{\psi}) = -\langle g_i(\boldsymbol{\phi}_k), \boldsymbol{\psi}\rangle \tag{37}$$

をみたす $\boldsymbol{\varphi}_{gi} \in X$ を求めよ．

問題 9 を H^1 Newton 法で解くアルゴリズムは，図 3 において，ステップ (3) の勾配法を (35) におきかえて，ステップ (5) の Newton 法を (37) におきかえることによって得られる．

8 まとめ

本稿では，有限次元ベクトル空間上で定義された等式制約つき最適化問題における評価関数の設計変数の変動に対する微分と Hesse 行列を求める方法を確認し，それらを用いた勾配法と Newton 法による解法までを復習した．その手順に沿って，Poisson 問題を等式制約にもつ形状最適化問題に対して，一般的な評価関数の形状微分形状 Hesse 形式を求めた．さらに，それらを用いた関数空間上の勾配法と Newton 法が考えられることを示した．

参考文献

[1] J. Sokolowski and J. P. Zolésio. *Introduction to Shape Optimization: Shape Sensitivity Analysis.* Springer-Verlag, New York, 1992.

[2] 畔上秀幸. 形状最適化問題の正則化解法. 日本応用数理学会論文誌, Vol. 23, No. 2, pp. 83–138, 6 2014.

[3] M. C. Delfour and J. P. Zolésio. *Shapes and Geometries : Metrics, Analysis, Differential Calculus, and Optimization, 2nd Ed.* Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2011.