

2 次計画問題の例題生成法

システム計画研究所 八巻直一 (Naokazu Yamaki)
東京理科大学・理学部 高橋 悟 (Satoru Takahashi)
東京理科大学・工学部 矢部 博 (Hiroshi Yabe)

1 はじめに

2 次計画法の解法は、とくに近年盛んに研究がすすめられている。しかし、解法を検証するための適当な例題が少ないのが現状であろう。とくに、問題の規模や性質、および最適解がわかっている例題が欲しいところである。[1]

本稿では、最適解や問題の性質を指定して、それに適合する 2 次計画 (QP) 問題を生成することを考える。ここでは、簡単な手法によって問題が生成できることを示し、その結果得られた例題を提示する。併せて、それらに対して数値実験を実施して、解法の性能の検証を試みる。

本稿で生成する QP 問題は、以下の形式である。(QP)

$$\begin{aligned} & \text{minimize } \frac{1}{2}x^T Qx + p^T x \text{ with respect to } x \\ & \text{subject to } A^T x \leq b, \end{aligned}$$

ただし、 $x \in R^n, A \in R^{m \times n}, b \in R^m$.

この問題に対する Karush-Kuhn-Tucker (K-K-T) 条件は、

$$\begin{aligned} Qx + p + A\lambda &= 0, \\ A^T x &\leq b, \quad \lambda \geq 0, \quad \lambda^T (A^T x - b) = 0 \end{aligned}$$

となる。[2]

以下では、問題 (QP) を狭義凸に限定して、問題の大きさ n, m 、行列 Q の固有値、最適解 x 、ラグランジュ乗数 λ および行列 A のランクを与えて、上の K-K-T 条件に基づいて、 Q, A, b, p を生成する手法を提案する。まず、2 節で行列 Q の生成方法を、3 節で A, b, p の生成方法を提案する。4 節では、QP の解法として、Goldfarb and Idnani 法を概説する。最後に 5 節で、生成された例題を示す。

2 行列 Q の生成

ここでは、2種類の Q の生成方法を提案する。まず一つ目は、指定された固有値をもつような行列 Q を生成する方法であり、これを逆ヤコビ法と呼ぶ。2つ目は指定されたバンド幅をもつような行列 Q を生成する方法であり、これを逆コレスキー法と呼ぶ。

2.1 逆ヤコビ法

手順は以下のとおりである。

Step 0. Q の次元 n , すべての固有値 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, 最大反復回数 $KMAX$, 回転角 θ を与える。

Step 1. $Q = \text{diag}(q_1, \dots, q_n)$ とおく。

Step 2. For $k=1$ to $KMAX$ do

{ Q の非対角要素の番号 (i, j) をランダムに選ぶ. ;

$Q \leftarrow P(i, j : \theta) Q P(i, j : \theta)^T$;}

ここで,

$$P(i, j : \theta) = \begin{pmatrix} \text{I} & & & 0 \\ & p_{ii} & & p_{ij} \\ & & \text{I} & \\ & p_{ji} & & p_{jj} \\ 0 & & & & \text{I} \end{pmatrix}$$

$$p_{ii} = \cos \theta$$

$$p_{ij} = \sin \theta$$

$$p_{ji} = -\sin \theta$$

$$p_{jj} = \cos \theta$$

である。

上の手順で、 θ として、たとえば、

$$\theta = \tan^{-1} \left(\frac{3}{4} \right)$$

ととれば、 $\cos \theta = 0.8, \sin \theta = 0.6$ となる。また、固有値の与え方として、最大固有値 $q_{\max}$ と最小固有値 $q_{\min}$ だけを指定し、その他の固有値は適当な間隔で並べてもよい。

2.2 逆コレスキー法

手順は以下のとおりである。

Step 0. Q の次元 n , バンド幅 $width$, および, 平均が 0 の正規乱数の分散 σ^2 を与える.

Step 1. バンド幅内の上三角部分に $N(0, \sigma^2)$ に従う乱数を埋め, 他の部分を 0 とおいた行列を Q とおく. さらに,

$$Q \leftarrow Q + \text{diag}(\alpha\sigma, \dots, \alpha\sigma)$$

とする.

Step 2. $Q \leftarrow Q^T Q$ とする.

3 x, λ, A, b, p

前節で得られた行列 Q と K-K-T 条件を利用して, 最適解 x , それに対応するラグランジュ乗数 λ , 制約条件の係数行列 A , 制約条件の右辺 b , 目的関数の 1 次式の係数ベクトル p を求める. 手順は以下のとおりである.

Step 1. x, λ の各成分を, ランダムに 0 または 1 とおく.

Step 2. 行列 A を次のようにおく:

$$A = \left[\begin{array}{c|c} m \text{ 次の単位行列} & \text{ランダムに } 0, 1 \text{ を埋める} \\ \hline & \text{上の行の線形結合を入れる} \end{array} \right]$$

このとき, $\text{rank } A = m$ となる.

Step 3. $(\lambda)_i = 0$ のとき, $(A^T x - b)_i < 0$,

$(\lambda)_i = 1$ のとき, $(A^T x - b)_i = 0$

となるように $(b)_i$ を作る. ただし, $(*)_i$ はベクトルの第 i 成分を表わす.

Step 4. $p = -(Qx + A\lambda)$ より, ベクトル p を求める.

4 Goldfarb and Idnani 法

本節では, 数値実験で用いた QP 解法として, Goldfarb and Idnani(GI) 法を簡単に紹介する. 詳しくは, 文献 [3],[4] を参照されたい.

GI 法の初期点は, 主空間では, 無制約最小点 $x = -Q^{-1}p$, 双対空間では, 原点 $\lambda = 0$ (双対問題の実行可能点) がそれぞれ選ばれる. そして, 満たされていない QP 主問題の制約条件を順次考慮しながら, 有限の手続きで QP 問題の K-K-T 条件を満足する点を見つけるか, あるいは QP 主問題に実行可能解が存在しないことを判定して終了する. その際に, 双対空間では実行可能領域内を移動していくのに対して, 主空間では実行可能領域の外側から, 目的関数値を増加させながら, 最終的に主問題の実行可能解(この場合には, 最適解になる)に到達する.

以下では、添え字集合 $K = \{1, 2, \dots, m\}$ の適当な部分集合 L に対して、次の部分問題を考える。

(sub QP(L) 問題)

制約条件 $a_i^T x - b_i \leq 0, i \in L$ のもとで、QP 主問題の目的関数を最小にせよ。ただし、 a_i は行列 A の第 i 列ベクトルである。

sub QP(L) 問題の解を x_L とし、制約条件の番号の集合

$$W_L = \{i \in L \mid i \text{ 番目の制約条件に対するラグランジュ乗数が正} \}$$

を定義する。このとき、 W_L に属する制約条件の法線ベクトルが互いに線形独立ならば、 (x_L, W_L) を sub QP(L) 問題の S(solution)-pair と呼ぶ。

以上の準備のもとで、GI 法のプロトタイプは次のように記述される。

(GI 法のプロトタイプ)

Step 0. QP 主問題の無制約最小点 $x_0 = -Q^{-1}p$ を主空間の初期点に選ぶ。このとき、 (x_0, ϕ) は sub QP(ϕ) 問題の S-pair になり、双対空間の原点はそれに対応する双対変数である。また、 $k = 0, W_0 = \phi$ とおく。

Step 1. x_k が QP 問題の実行可能解ならば Step 2 へいく。

Step 1.1 $K \setminus W_k$ の中から、満たされていない制約条件の番号 $\rho \in K$ を選ぶ。

Step 1.2 もし、sub QP($W_k \cup \{\rho\}$) が実行不可能（実行可能領域が空）ならば、もとの QP 問題が実行不可能であると判定して、停止する。

Step 1.3 さもなければ、 $\overline{W}_k \subseteq W_k, f(x_{k+1}) > f(x_k)$ となるような、新しい S-pair $(x_{k+1}, \overline{W}_k \cup \{\rho\})$ を見つけて、 $W_{k+1} = \overline{W}_k \cup \{\rho\}, k = k + 1$ とおいて Step 1 へいく。

Step 2. QP 問題の最適解が得られたので、停止する。

上のアルゴリズムの中には、双対空間での作業があからさまに述べられていないが、実際には、sub QP 問題の実行可能性の判定や、新しい S-pair $(x_{k+1}, \overline{W}_k \cup \{\rho\})$ の構築にかかわっている。

5 数値例

ここでは、上記の 2 つの方法による数値例を、一例ずつ挙げる。それぞれ GI 法によって解いたところ、設定された最適解が得られた。

5.1 逆ヤコビ法による数値例

この例では, $n = 10$, $m = 4$, $\text{rank } A = 3$, Q の最大固有値 = 10, 最小固有値 = 1, 最適解

$$x^* = (0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 1)^T,$$

ラグランジュ乗数

$$\lambda^* = (0, 1, 0, 0)^T$$

と設定した. 生成された例題は以下のとおりである.

===== Q =====

4.386									
-.318	7.794								
-.514	.173	6.514							
-.210	-1.687	-.106	8.410						
-.408	-.962	-.503	-.912	6.125					
-1.109	.087	2.489	-.261	.621	9.595				
3.235	-.424	-.685	-.280	-.544	-1.479	6.274			
.209	.279	.120	.460	.411	.886	.278	6.977		
1.315	-.392	-.174	-.482	-.556	.473	.421	.644	4.516	
.131	.125	-.827	-.934	-.549	-1.129	.175	.832	-.604	6.463

===== P =====

-.721	-7.565	.330	3.015	-5.057	-1.052	-.628	-3.166	-3.964	-6.435
-------	--------	------	-------	--------	--------	-------	--------	--------	--------

===== A =====

1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
1.0	1.0	.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	.0
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

===== B =====

5.0	4.0	4.0	5.0
-----	-----	-----	-----

GI 法の結果は，反復回数は 2 回で，解を得た．尚，最適値は -13.5108905817 である．

5.2 逆コレスキー法による数値例

この例では， $n = 10$ ， $m = 4$ ， $\text{rank } A = 3$ ， Q のバンド幅 = 4，最適解

$$x^* = (1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T,$$

ラグランジュ乗数

$$\lambda^* = (0, 0, 1, 1)^T$$

と設定した．生成された例題は以下のとおりである．

===== Q =====

25.814									
-3.080	20.953								
-7.548	6.530	27.734							
-21.299	1.019	1.266	49.518						
-25.632	8.934	8.068	23.656	48.845					
.000	4.750	-6.663	-10.906	-8.239	30.880				
.000	.000	-3.133	6.046	.887	-12.306	32.156			
.000	.000	.000	15.694	-10.655	-6.488	3.216	76.766		
.000	.000	.000	.000	-6.805	8.952	-.244	.714	21.763	
.000	.000	.000	.000	.000	2.906	-.755	-18.012	-11.191	35.231

===== P =====

-20.266	-5.450	-22.187	19.033	15.564	4.663	1.133	-1.000	-2.000	-2.000
---------	--------	---------	--------	--------	-------	-------	--------	--------	--------

===== A =====

1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
1.0	1.0	1.0	.0	1.0	1.0	1.0	.0	1.0	1.0
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

===== B =====

3.0	3.0	2.0	2.0
-----	-----	-----	-----

GI 法の結果は，反復回数は 3 回で，解を得た．尚，最適値は -23.226447796 である．

参考文献

- [1] R.H.Bartels and N. Mahdavi-amiri : On generating test problems for nonlinear programming algorithms, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.7 (1986), pp.769-798.
- [2] R.Fletcher : *Practical Methods of Optimization* (Second Edition), John Wiley & Sons, Chichester (1987).
- [3] D.Goldfarb and A.Idnani : A numerically stable dual method for solving strictly convex quadratic programs, *Mathematical Programming*, Vol.27 (1983), pp.1-33.
- [4] 高橋悟, 本郷茂, 矢部博, 宮田雅智, 八巻直一 : 非線形最適化問題のためのアプリケーション・システム - A S N O P 利用の手引, 東京大学大型計算機センター (1988).