数理解析研究所講究録
第 746 巻 1991 年 166-172

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)

$$\text{minimize } \frac{1}{2}x^TQx + p^Tx \text{ with respect to } x$$

$$\text{subject to } A^Tx \leq b,$$

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，

$$Qx + p + A\lambda = \mathbf{0},$$

$$A^Tx \leq b, \quad \lambda \geq \mathbf{0}, \quad \lambda^T(A^Tx - b) = 0$$

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$\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, 最大反復回数 `KMAX`，回転角$\theta$を与える．

Step 1. $Q = diag(q_1, \ldots, q_n)$ 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，

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

$$\begin{aligned} p_{ii} &= \cos\theta \\ p_{ij} &= \sin\theta \\ p_{ji} &= -\sin\theta \\ p_{jj} &= \cos\theta \end{aligned}$$

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,

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

とする.

Step 2. $Q \leftarrow Q^TQ$ 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:

$$A = \left[\begin{array}{c|c} m\text{ 次の単位行列} & \text{ランダムに } 0,1 \text{ を埋める} \\ \hline \multicolumn{2}{c}{\text{上の行の線形結合を入れる}} \end{array}\right]$$

このとき, $\mathrm{rank}\, A = m$ となる.

Step 3. $(\lambda)_i = 0$ のとき, $(A^Tx-b)_i < 0$,
$(\lambda)_i = 1$ のとき, $(A^Tx-b)_i = 0$
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 $K=\{1,2,\ldots,m\}$ 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 $a_i^T x - b_i \le 0, i \in L$ 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

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

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 $K \backslash W_k$ 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，$n = 10$, $m = 4$, 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うりである.

```
===== 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，$n = 10$, $m = 4$, rank $A = 3$, Q のバンド幅$= 4$, 最適解

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

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うりである．

```
===== 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－ＡＳＮＯＰ利用の手引，東京大学大型計算機センター (1988).