УДК 519.85

ПОЛУОПРЕДЕЛЕННЫЙ СИМПЛЕКС-МЕТОД ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ КВАДРАТИЧНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

А. И. Косолап
Доктор физико-математических наук, профессор
Кафедра специализированных компьютерных систем
Украинский государственный химико-технологический университет
пр. Гагарина, 8, г. Днепропетровск, Украина, 49001
E-mail: anivkos@ua.fm

Розглядається загальна задача квадратичної мінімізації з квадратичними обмеженнями. За допомогою напіввизначеної релаксації вона перетворюється до задачі лінійної напіввизначеної оптимізації, розв'язок якої дозволяє знайти нижню оцінку розв'язку квадратичної задачі. Знайдений розв'язок використовується в якості початкової точки в прямо-двоїстому методі внутрішньої точки для розв'язання квадратичної задачі. Чисельні експерименти показали ефективність запропонованого методу

Ключові слова: квадратичні функції, напіввизначена релаксація, напіввизначенний симплекс-метод, метод внутрішньої точки

Рассматривается общая задача квадратичной минимизации с квадратичными ограничениями. При помощи полуопределенной релаксации она преобразуется к задаче линейной полуопределенной оптимизации, решение которой позволяет найти нижнюю оценку решения квадратичной задачи. Найденное решение используется в качестве начальной точки в прямо-двойственном методе внутренней точки для решения квадратичной задачи. Численные эксперименты показали эффективность предложенного метода

Ключевые слова: квадратичные функции, полуопределенная релаксация, полуопределенный симплекс-метод, метод внутренней точки

1. Введение

Математическими моделями задач из области экономики, финансов, оптимизации сложных проектов, планирования, компьютерной графики, управления сложными системами, являются задачи квадратичной оптимизации в конечномерном пространстве, когда целевая функция и ограничения заданы общими квадратичными функциями [1]. Часто сложные задачи комбинаторной оптимизации с булевыми и целочисленными переменными преобразуют к квадратичным задачам [2]. Такие задачи могут содержать множество локальных минимумов и относятся к классу NP -сложных.

Одним из общих подходов при решении задач квадратичной оптимизации является полуопределенная релаксация [3].

Она позволяет преобразовать квадратичную функцию x^TAx к виду $A\bullet xx^T$ или $A\bullet X$, где A – симметричная матрица, X – положительно полуопределенная матрица ранга единица, а $A\bullet X$ – скалярное произведение матриц. Полуопределенная релаксация позволяет свести общую квадратичную задачу к линейной задаче полуопределенной оптимизации (SDP), в которой неизвестной является полуопределенная матрица ранга единица. Для решения задач полуопределенной оптимизации предложен прямо-двойственный метод внутренней точки [3]. В этом методе решается прямая и двойственная задача полуопределенной оптимизации, что приводит к необходимости решения задачи большой размерности. В данной работе предлагается полуопределенный симплекс-метод для решения задач полуопределенной оптимизации, который решает только прямую задачу [2].

Другие общие подходы к решению общей задачи квадратичной оптимизации используют схемы методов ветвей и границ, которые предусматривают построение дерева подзадач посредством разбиения допустимой области на множество подобластей и сравнение решений на каждой из этих подобластей. Процесс разбиения подобласти завершается, если на ней найдена точка глобального минимума. Очевидно, что такой подход может быть эффективен только для задач малой размерности, либо когда удается локализовать точку глобального минимума. Разбиение всей допустимой области на подобласти для пространств больших размерностей неэффективно. Поэтому большинство схем методов ветвей и границ не представляют практической значимости [4].

Существуют и иные подходы, использующие двойственность [5] или декомпозицию [6]. Но и в этих случаях гарантируется получение только приближенных оценок.

Поэтому проблема эффективного решения общих квадратичных задач до настоящего времени остается открытой.

2. Постановка задачи и методы ее решения

Рассмотрим общую задачу квадратичной оптимизации

$$\min\{f_0(x) \mid f_i(x)\le 0,\ i=1,\dots,m,\ x\in E^n\},\qquad (1)$$

где все функции $f_i(x)=x^TA_ix+b_i^Tx-c_i$ – квадратичные, b_i, x – векторы n-мерного евклидового пространства, c_i – константы, а все матрицы A_i – симметричные. Будем предполагать, что решение задачи (1) существует и x^* – ее точка глобального минимума на допустимом множестве.

Если задача (1) имеет множество точек глобального минимума, то достаточно найти одну из них.

Используем полуопределенную релаксацию [7] для преобразования задачи (1) к виду

$$\min\left\{ \bar{A}_0 \bullet X \mid \bar{A}_i \bullet X \preceq 0,\ i=1,\dots,m,\ X\succeq 0\right\},\qquad (2)$$

где

$$X=\begin{pmatrix}1\\x\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\x\end{pmatrix}^T=\begin{pmatrix}1 & x^T\\ x & xx^T\end{pmatrix},$$

$$x^TA_ix+b_i^Tx-c_i=\begin{pmatrix}-c_i & \frac{b_i^T}{2}\\ \frac{b_i}{2} & A_i\end{pmatrix}\bullet\begin{pmatrix}1 & x^T\\ x & xx^T\end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix}-c_i & \frac{b_i^T}{2}\\ \frac{b_i}{2} & A_i\end{pmatrix}\bullet X=\bar{A}_i\bullet X,\ i=0,1,\dots,m,$$

а

$$A\bullet X=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_{ij}$$

определяет скалярное произведение матриц. Преобразованная задача (2) будет эквивалентной задаче (1), если решением X^* задачи (2) будет полуопределенная матрица ранга единица. Однако это условие невозможно задать аналитически. Поэтому задачу (2) решают без этого условия и находят нижнюю оценку решения задачи (1).

Лучшим методом для решения задачи (2) считается метод внутренний точки [3].

Однако он позволяет находить решение задачи (2) с большей погрешностью, чем новый полуопределенный симплекс-метод, в котором используется представление полуопределенной матрицы в виде линейной комбинации матриц ранга единица $X=\sum_j\alpha_jX_j$, где $\alpha\ge 0$.

Это позволяет преобразовать задачу (2) к виду

$$\min\{C\bullet\sum_j\alpha_jX_j \mid A_i\bullet\sum_j\alpha_jX_j=b_i,\ \ i=1,\dots,m,\ \ \alpha\ge 0\}$$

или

$$\min\{\sum_j\alpha_jC\bullet X_j \mid \sum_j\alpha_jA_i\bullet X_j=b_i, i=1,\dots,m,\alpha\ge 0\}.\qquad (3)$$

Для решения задачи (3) необходимо выбрать начальный набор матриц ранга единица $X_j=x_jx_j^T$, которые определяются линейно независимыми векторами x_j. Решение задачи (3) α^* определяет полуопределенную матрицу $X=\sum_j\alpha_j^*X_j$. Это решение будет оптимальным для задачи (2), если не существует матрицы ранга единица X_k такой, что матрица $X=\sum_j\alpha_jX_j+\alpha_kX_k$ позволит получить меньшее значение целевой функции задачи (2). Добавим матрицу X_k в задачу (3) и проверим оценку в преобразованной строке целевой функции. Если эта оценка неотрицательна, то найденное решение является оптимальным, в противном случае необходимо найти матрицу X_k, которая даст соответствующую минимальную отрицательную оценку в целевой функции. Эта оценка равна $Q\bullet X_k=x_k^TQx_k$, где

$$Q=C-\sum_jC\bullet x_ix_i^T\sum_{j=1}^{m}b_{ij}^{-1}A_j,$$

а b_{ij}^{-1} – элементы базисной матрицы B^{-1} симплекс-метода в задаче (2).

Вектор x_k найдем, решая простую задачу квадратичной оптимизации

$$\min\{x^TQx \mid \|x\|^2=1\}.\qquad (4)$$

Очевидно, что решение задачи (4) совпадает с решением задачи

$$\min\{x^TQx+r(\|x\|^2-1) \mid \|x\|^2=1\}.$$

Выберем $r>0$ таким, чтобы матрица $Q^*=Q+rI$ была положительно определенной. Для этого достаточно, чтобы

$$q_{ii}^*>\sum_{i\ne j}|q_{ij}^*|, \forall i,$$

где q_{ij}^* – элементы матрицы Q^*. Таким образом, решение задачи (4) сводится к поиску собственного вектора матрицы Q^*, соответствующему ее минимальному собственному значению. Это равносильно решению задачи

$$\min\{x^TQ^*x \mid \|x\|^2=1\}$$

или задачи

$$\max\{\|x\|^2 \mid x^TQ^*x=1\}.\qquad (5)$$

При надлежащем выборе начального значения x^0, k-е приближение решения задачи (5) может быть найдено в явном виде (используя метод множителей Лагранжа для последовательности задач $\max\{(x^k)^Tx \mid x^TQ^*x=1\},\ k=0,1,\dots$)

$$x^k=\frac{(Q^*)^{-k}x^0}{\sqrt{x^0(Q^*)^{-(2k-1)}x^0}}.$$

В работе использован метод сопряженных направлений для решения задачи (5).

Положим $z^{k+1}=x^{k+1}-\alpha x^k$, где параметр α выберем из условия сопряженности векторов x^k и z^{k+1}

$$(x^k)^T Q^* z^{k+1} = (x^k)^T Q^* (x^{k+1} - \alpha x^k) =$$
$$= (x^k)^T Q^* x^{k+1} - \alpha (x^k)^T Q^* x^k = 0,$$

откуда

$$\alpha = \frac{(x^k)^T Q^* x^{k+1}}{(x^k)^T Q^* x^k}.$$

Полагаем $z^{k+1} = x^{k+1}$, и процесс поиска решения задачи (5) продолжается. Искомое решение будет достигнуто, если выполнится условие $|x^{k+1} - x^k| \le \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ – заданная точность вычислений. Пусть x^* – решение задачи (5), тогда матрица Q – положительно полуопределенная при условии $x^{*T} Q x^* \ge 0$. В этом случае задача (2) решена, в противном случае поиск решения задачи (2) симплекс-методом будет продолжено.

Сходимость полуопределенного симплекс-метода является следствием следующего утверждения.

Теорема 1. *Если существует решение задачи (2) с меньшим значением целевой функции, чем в точке* $\sum_j \alpha_j^* X_j$ *(*α^* *- решение задачи (3)), то тогда существует матрица* X_k *ранга единица, что для решения расширенной задачи (3) справедливо неравенство* $C \bullet \left(\sum_j \alpha_j X_j + \alpha_k X_k\right) < C \bullet \sum_j \alpha_j^* X_j$.

Доказательство. Пусть X^* – решение задачи (2), тогда

$$X^* = \sum_i X_i^*,$$

где X_i^* – матрицы ранга единица. Добавим к ограничениям задачи (3) новые столбцы, содержащие матрицы X_i^*

$$\alpha_1 A_1 \bullet X_1 + \ldots + \alpha_m A_1 \bullet X_m + \ldots + \alpha_k A_1 \bullet X_1^* + \ldots + \alpha_r A_1 \bullet X_r^* = b_1,$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$
$$\alpha_1 A_m \bullet X_1 + \ldots + \alpha_m A_m \bullet X_m + \ldots + \alpha_k A_m \bullet X_1^* + \ldots + \alpha_r A_m \bullet X_r^* = b_m.$$

Решение задачи (3) при этих ограничениях определит матрицу X^*, так как это решение допустимо и оптимально.

Таким образом, значение целевой функции будет уменьшено. Это возможно только тогда, когда, по крайней мере, одна оценка в преобразованной строке целевой функции, соответствующая добавленным столбцам будет отрицательной ($\exists i, Q \bullet X_i^* < 0$), так как, в противном случае, текущее решение задачи (3) будет оптимальным.

Добавление одного из таких столбцов с отрицательной оценкой в матрицу ограничений задачи (3) приведет к убыванию ее целевой функции (см. теорему 4 в [8], с. 101), что доказывает теорему.

Далее, найденное решение задачи (3) используем в качестве начальной точки для решения задачи (1) прямо-двойственным методом внутренней точки [9].

Преобразуем ограничения задачи (1) к равенствам

$$\min\{f_0(x) - \mu \sum_{i=1}^m \ln(z_i) \,|\, f_i(x) + z_i = 0, i = 1, \ldots, m\},$$

тогда функция Лагранжа этой задачи будет иметь вид

$$L(x, y, z) = f_0(x) - \mu \sum_{i=1}^m \ln(z_i) - \sum_{i=1}^m y_i (f_i(x) + z_i),$$

условия минимума которой равны

$$\nabla f_0(x) - \nabla f_i(x)^T y = 0,$$
$$f_i(x) + z_i = 0, i = 1, \ldots, m,$$
$$-\mu Z^{-1} e + y = 0.$$

Метод Ньютона для этой нелинейной системы уравнений будет иметь вид

$$\begin{bmatrix} G(x,y) & A^T(x) & 0 \\ A(x) & 0 & Z \\ A(x) & -I & Y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\nabla f_0(x) - A^T(x) y \\ -f(x) - z \\ \mu e - ZYe \end{bmatrix}, \qquad (6)$$

где $G(x, y)$ – гессиан функции Лагранжа,

$$A(x) = \nabla f(x), \quad Y = \mathrm{diag}(y_1, \ldots, y_m),$$
$$Z = \mathrm{diag}(z_1, \ldots, z_m), \quad f(x) = (f_1(x), \ldots, f_m(x)),$$

I – единичная матрица, а $e = (1, \ldots, 1)$.

Решение линейной системы (6) используем для перехода в следующую точку

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k \Delta x^k,$$
$$y^{k+1} = y^k + \alpha_k \Delta y^k,$$
$$z^{k+1} = z^k + \alpha_k \Delta z^k.$$

Параметр α выбирается так, чтобы $z^{k+1} \ge 0$. Показано, что данный метод сходится к точке локального минимума за полиномиальное время [10].

Как показали численные эксперименты, рассмотренный метод внутренней точки часто позволяет находить точку глобального минимума задачи (1), если в качестве начальной точки выбирается решение задачи (2).

3. Численные эксперименты

Рассмотрим тестовые задачи квадратичной оптимизации, приведенные в [11 – 13]. С помощью полуопределенной релаксации эти задачи преобразовывались к виду (2). Задача (2) решалась полуопределенным симплекс-методом и найденное решение использовалось в качестве начальной точки для решения задачи (1) прямо-двойственным методом внутренней точки. Результаты численных экспериментов приведены в табл. 1 – 3, которые показывают в большинстве случаев нахождение точного решения задачи (1). Только в задачах fp_2_1, g_15 [11 – 12] найдено приближенное решение.

Таблица 1

Результаты решения задач из [11]

Название задачи	Размерность задачи n×m	Задача SDP	Задача QCQP	Оптимальное решение
fp_2_1	6×7	-18,869	-16,5	-17
fp_2_2	7×9	-213	-213	-213
fp_2_4	7×12	-24,3639	-11	-11
fp_3_3	7×13	-315,143	-310	-310
fp_3_4	3×6	-5	-4	-4
f_a	3×5	-5,98	-1,083	-1,083
f_b	2×3	-8,57	-8,5	-8,5
f_c	5×11	-13	-13	-13
f_f	2×6	-2,828	-2,828	-2,828
s_3	3×5	-16,74	-16,739	-16,739

Таблица 2

Результаты решения задач из [12]

Название задачи	Размерность задач n×m	Задача SDP	Задача QCQP	Оптимальное решение
g01	13×22	-15	-15	-15
g04	5×11	-32232,3	-30665,539	-30665,539
g07	10×18	24,3062	24,3062	24,3062
g11	3×4	0,75	0,75	0,75
g15	3×2	943,985	968	961,715
g18	10×23	-0,866	-0,866	-0,866

Таблица 3

Результаты решения задач из [13]

Название задачи	Размерность задачи n	Задача SDP	Задача QCQP	Оптимальное решение
2.1	8	294,988	280	280
2.2	7	107,5393	107	107
2.3	6	159,997	150	150
2.4	7	127,0274	127	127
2.5	8	1189,51	900	900

4. Выводы

Общие квадратичные задачи с помощью полуопределенной релаксации преобразованы к задачам линейной полуопределенной оптимизации. Для задач полуопределенной оптимизации разработан новый полуопределенный симплекс-метод (PSM). Преимущества этого метода перед прямо-двойственным методом внутренней точки (PDIMP) для решения задач SDP следующие: PSM решает только прямую задачу, размерность которой значительно ниже, чем в PDIMP; область задач, решаемых PSM шире (разрыв двойственности не влияет на решение задачи методом PSM); PSM нечувствительный к выбору начальной точки; точность решения задачи PSM значительно выше.

Проведенные численные эксперименты (использующие PSM и прямо-двойственный метод для решения исходной задачи с начальной точкой, полученной PSM) на известных тестовых задачах показали, что в большинстве этих задач находится точка глобального минимума исходной задачи.

Литература

1. Vandenberghe, L. Semidefinite programming [Текст] / L. Vandenberghe, S. Boyd // SIAM Review. – 1996. – vol. 38. – P. 49–95.
2. Косолап, А. И. Методы глобальной оптимизации [Текст] / А. И. Косолап. – Днепропетровск: Наука и образование, 2013. – 318 с.
3. Todd, M. J. Semidefinite optimization [Текст] / M. J. Todd // Acta Numerica. – 2001. – № 10. – P. 515–560.
4. Horst, R. Global Optimization: Deterministic Approaches, 3rd ed. [Текст] / R. Horst, H. Tuy. – Springer-Verlag, Berlin, 1996. – 726 p.
5. Шор, Н. З. Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация [Текст] / Н. З. Шор, С. И. Стеценко. – К.: Наукова думка, 1989.– 205с.
6. Floudas, C. A. Quadratic optimization [Текст] / C. A. Floudas, V. Visweswaran. – Princeton University, Princeton, 1995. – 53 p.
7. Ding, Y. On Efficient Semidefinite Relaxations for Quadratically Constrained Quadratic Programming [Текст] / Y. Ding. – Waterloo, Ontario, Canada. – 2007. – 68 p.
8. Данциг, Дж. Линейное программирование его обобщение и применение [Текст] / Дж. Данциг; пер. с англ. Г. Н. Андрианова, Л. И. Горькова, А. А. Корбута, А. Н. Ляпунова; под ред. Н. Н. Воробьева. – М.: Прогресс, 1966. – 600 с.
9. Nocedal, J. Numerical optimization [Текст] / J. Nocedal, S. J. Wright. – Springer, 2006. – 685 p.
10. Nesterov, Y. Interior point polynomial algorithms in convex programming [Текст] /Y. Nesterov, A. S. Nemirovskii // SIAM Studies in Applied Mathematics. – 1994. – Vol. 13. – SIAM, Philadelphia,USA. – 405 p.
11. Epperly, T. G. W. Global optimization test problem with solution [Электронный ресурс] /T. G. W.Epperly, R. E. Swaney. – 1995. – 34 p. Available at http://citeseer.nj.nec.com / 147308.html.
12. Aguirre, A. H. COPSO: Constrained Optimization via PSO algorithm. Appendix A: Benchmark functions [Электронный ресурс]/ A. H. Aguirre, A. E. M. Zavala, E. V. Diharce, S. B. Rionda. – 2007. – P. 21–28. Available at http://www.cimaf.mx/reports/enlinea/I-07-04.pdf.
13. Martello, S. Knapsack problems: algorithms and computer implementation [Текст] / S. Martello, P. Toth. – Chichester: John Wiley & SONS, 1990. – 296 p.