УДК 519.85

Верхние и нижние оценки решений в общих задачах квадратичной оптимизации

А. И. Косолап, А. С. Перетятько
Украинский государственный химико-технологический университет, Украина

Рассматривается общая задача квадратичной минимизации с квадратичными ограничениями, для ее решений найдены верхние и нижние оценки значений минимизируемой функции. Для нахождения нижней оценки используется полуопределенная оптимизация. Найденная точка минимума используется для получения верхней оценки методом внутренней точки. Численные эксперименты показали, что полученная таким образом верхняя оценка решения исходной задачи часто является точной.

Ключевые слова: *квадратичные функции, глобальный минимум, полуопределенная релаксация, полуопределенная оптимизация, полуопределенный симплекс-метод, метод внутренней точки.*

Розглядається загальна задача квадратичної мінімізації з квадратичними обмеженнями, для її розв'язків знайдені верхні і нижні оцінки значень мінімізуємої функції. Для знаходження нижньої оцінки використовується напіввизначена оптимізація. Знайдена точка мінімуму використовується для отримання верхньої оцінки методом внутрішньої точки. Чисельні експерименти показали, що отримана таким чином верхня оцінка розв'язку початкової задачі часто є точною.

Ключові слова: *квадратичні функції, глобальний мінімум, напіввизначена релаксація, напіввизначена оптимізація, напіввизначенний симплекс-метод, метод внутрішньої точки.*

We consider the general problem of quadratic minimization with quadratic constraints. We are searching for the upper and lower bounds for the values of the minimization function. Semidefinete optimization is used for finding the lower bound. This minimum point is used to obtain an upper bound by interior point method. Numerical experiments show that obtained upper bound is the exact solution of the original problem.

Key words: *quadratic functions, global minimum, semidefinite relaxation, semidefinite optimization, semidefinite simplex-method, interior point method.*

1. Общая постановка задачи и её актуальность

Многие задачи из области экономики, финансов, оптимизации сложных проектов, планирования, компьютерной графики, управления сложными системами преобразуются к задачам квадратичной оптимизации в конечномерном пространстве, когда целевая функция и ограничения заданы общими квадратичными функциями [1]. Часто сложные задачи комбинаторной оптимизации с булевыми переменными преобразуют к квадратичным задачам [2]. Такие задачи могут содержать множество локальных минимумов и относятся к классу NP-сложных. Допустимое множество в этих задачах может быть несвязным и дискретным, что значительно усложняет поиск оптимального решения.

В настоящее время эффективно разрешимой является только задача минимизации общей квадратичной функции при одном выпуклом квадратичном ограничении [3]. Для задачи с двумя квадратичными ограничениями эффективные алгоритмы разработаны только для некоторых частных случаев [4].

Одним из общих подходов при решении общих задач квадратичной оптимизации является полуопределенная релаксация [5–6]. В этом случае квадратичная функция $x^T Ax$ представляется в виде Axx^T или $A \bullet X$, где A – симметричная матрица, а X – положительно полуопределенная матрица ранга единица. Такое преобразование позволяет свести общую квадратичную задачу к линейной задаче полуопределенной оптимизации (SDP), в которой неизвестной является полуопределенная матрица ранга единица. Задача полуопределенной оптимизации является эффективно разрешимой [7]. Однако без требования, чтобы ранг искомой матрицы был равен единице, полуопределенная релаксация является приближенным преобразованием. Для решения задач полуопределенной оптимизации предложен прямо-двойственный метод внутренней точки [7], однако поиск более эффективных алгоритмов продолжается. В данной работе используется полуопределенный симплекс-метод для решения задач полуопределенной оптимизации [8].

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. Достаточно рассмотреть аппроксимацию единичного шара $\{ x \mid \| x \|^2 = 1 \}$ многогранником. Если вершинами многогранника взять точки пересечения осей координат и биссектрис ортантов $x = at,\ a = (\pm 1,...,\pm 1)$ с границей шара, то получим многогранник с $(2^n + 2n)$ вершинами и $n2^n$ гранями. Такой многогранник будет достаточно грубой аппроксимацией шара, но эта аппроксимация численно нереализуема. Поэтому большинство схем методов ветвей и границ не представляют практической значимости [9]. Существуют и иные подходы, использующие двойственность [10] или декомпозицию [11]. 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

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

где все функции $f_i(x) = x^T A_i x + b_i^T x - c_i$ – 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 для преобразования задачи (1) к виду

$$\min\left\{ \overline{A}_0 \bullet X \mid \overline{A}_i \bullet X \preceq 0,\ i = 1,...,m,\ X \succeq 0 \right\}, \tag{2}$$

где

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

$$x^T A_i x + b_i^T x - c_i = \begin{pmatrix} -c_i & \dfrac{b_i^T}{2} \\ \dfrac{b_i}{2} & A_i \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 1 & x^T \\ x & xx^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -c_i & \dfrac{b_i^T}{2} \\ \dfrac{b_i}{2} & A_i \end{pmatrix} \bullet X = \overline{A}_i \bullet X,\ i = 0,1,...,m,$$

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 X – полуопределенная матрица ранга единица. Однако условие, что матрица должна быть ранга единица, невозможно задать аналитически. Поэтому задачу (2) решают без этого условия. Тогда в общем случае решение задачи (2) будет нижней оценкой решения задачи (1). Решение задачи (2) X^* определит точное решение задачи (1) в том случае, если X^* – полуопределенная матрица ранга единица.

Методам решения задачи (2) посвящено много исследований [5–7]. Лучшим методом для решения задач (2) считается метод внутренний точки [7]. Однако он позволяет находить решение задачи (2) с большей погрешностью, чем новый полуопределенный симплекс-метод, который использует локальную аппроксимацию полуопределенного конуса матриц суммой матриц ранга единица. Кроме того, метод внутренней точки решает задачу (2) с ограничениями, заданными в виде равенств. Для того, чтобы использовать метод внутренней точки, необходимо преобразовать ограничения-неравенства в равенства посредством ввода свободных переменных, и, таким образом, размерность решаемой задачи будет увеличена на число новых переменных.

В отличии от обычного симплекс-метода, в полуопределенном необходимо решать последовательность задач линейного программирования. На каждой итерации определяется новый столбец матрицы ограничений из решения простой задачи квадратичной оптимизации

$$\min\{\, x^T Q x \mid \| x \|^2 = 1 \,\}, \tag{3}$$

где

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

b_{ij}^{-1} – элементы базисной матрицы B^{-1} симплекс-метода. Хорошо известно, что задача (3) эффективно разрешима [3]. Очевидно, что решение задачи (3) совпадает с решением задачи

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

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

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

где q_{ij}^* – элементы матрицы Q^*. Таким образом, решение задачи (3) сводится к поиску собственного вектора матрицы Q^*, соответствующему ее минимальному собственному значению. Это равносильно решению задачи

$$\min\{\, x^T Q^* x \;\mid \| x \|^2 = 1 \,\}$$

или задачи

$$\max\{\, \| x \|^2 \mid\; x^T Q^* x = 1 \,\}. \quad (4)$$

При надлежащем выборе начального значения x^0, k-е приближение решения задачи (4) может быть найдено в явном виде (используя метод множителей Лагранжа для последовательности задач $\max\{\, (x^k)^T x \mid x^T Q^* x = 1 \,\}$, $k = 0,1,\ldots$)

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

Пусть x^* – решение задачи (4), тогда матрица Q – положительно полуопределенная при условии $x^{*T} Q x^* \geq 0$. В этом случае задача (2) решена, в противном случае поиск решения задачи (2) симплекс-методом будет продолжено. Далее, найденное решение задачи (2) используем в качестве начальной точки для решения задачи (1) прямо-двойственным методом внутренней точки [12–13]. Преобразуем ограничения задачи (1) к равенствам

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

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

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

Метод Ньютона для этой нелинейной системы уравнений будет иметь вид

$$\begin{bmatrix}G(x,y) & A^T(x) & 0\\ A(x) & 0 & Z\\ A(x) & -I & Y\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Delta x\\ \Delta y\\ \Delta z\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\nabla f_0(x)-A^T(x)y\\ -f(x)-z\\ \mu e-ZYe\end{bmatrix}, \qquad (5)$$

где $G(x,y)$ – гессиан функции Лагранжа, $A(x)=\nabla f(x)$, $Y=diag(y_1,...,y_m)$, $Z=diag(z_1,...,z_m)$, $f(x)=(f_1(x),...,f_m(x))$, I – единичная матрица, а $e=(1,...,1)$. Решение линейной системы (5) используем для перехода в следующую точку

$$\begin{aligned}x^{k+1}&=x^k+\alpha_k\Delta x^k\\ y^{k+1}&=y^k+\alpha_k\Delta y^k\\ z^{k+1}&=z^k+\alpha_k\Delta z^k\end{aligned}$$

Параметр α выбирается так, чтобы $z^{k+1}\geq 0$. Показано, что данный метод сходится к точке локального минимума за полиномиальное время [12].

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

Для рассмотренного полуопределенного симплекс-метода разработано программное обеспечение и проведены численные эксперименты.

Рассмотрим некоторые тестовые задачи, приведенные в [14] и [15]. Для решения были выбраны общие квадратичные задачи, для которых находилась нижняя оценка решения задачи (1) полуопределенным симплекс-методом, а затем проводился поиск верхней оценки. Результаты численных экспериментов приведены в Табл.1 и Табл.2, где примерно в 90% задач полученная верхняя оценка является точным решением исходной задачи. В задачах *fp*_2_1, *g*_15 (см. [14–15]) найдено только приближенное решение.

Таблица 1. Результаты численных экспериментов над задачами из [14]

Название задачи в [14]	Размерность задачи	Полученная нижняя оценка	Полученная верхняя оценка	Оптимальное решение
fp_2_1	6*7	-18,86	-16,5	-17
fp_2_2	7*9	-213	-213	-213
fp_2_4	7*12	-23,71	-11	-11
fp_3_3	7*13	-438	-310	-310
fp_3_4	3*6	-5	-4	-4
e_1	3*4	-3	-3	-3
f_a	3*5	-5,98	-1,083	-1,083
f_b	2*3	-8,5	-8,5	-8,5
f_c	5*11	-13	-13	-13
f_f	2*6	-2,827	-2,828	-2,828
s_1	3*5	0	0,74	0,74
s_1b	3*5	0	0,74	0,74
s_1c	3*5	0,69	0,74	0,74
s_1d	3*5	0,4	0,74	0,74
s_2	3*4	-1,5	-0,5	-0,5
s_2b	3*4	-1,5	-0,5	-0,5
s_2c	3*4	-0,54	-0,5	-0,5
s_2d	3*4	-0,9375	-0,5	-0,5
s_3	3*5	-35,98	-16,739	-16,739

Таблица 2. Результаты численных экспериментов над задачами из [15]

Название задачи в [15]	Размерность задачи	Полученная нижняя оценка	Полученная верхняя оценка	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	-	961,715
g18	10*23	-0,866	-0,866	-0,866

4. Выводы и направления дальнейших исследований

Предложены новые методы для нахождения верхних и нижних оценок решений в общих задачах квадратичной оптимизации. Проведенные численные эксперименты для известных тестовых задач показали, что в большинстве этих задач верхняя оценка глобального минимума была точной. Для уточнения оценок может быть использована техника отсечений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Vandenberghe L. Semidefinite programming /L. Vandenberghe, S. Boyd // SIAM Review. – 1996. – vol. 38. – P. 49–95.
2. Helmberg C. Semidefinite Programming for Combinatorial Optimization / C. Helmberg. – Berlin, 2000. – 150 p.

3. Fortin C. Computing the local minimizers of a large and sparse trust region subproblem / C. Fortin. – Montreal: McGill University, 2004. – 149 p.
4. Beck A. Strong duality in nonconvex quadratic optimization with two quadratic constraints / A. Beck, Y.C. Eldar // SIAM J. Optim. – 2006. – № 17(3), – P. 844–860.
5. Lasserre J. Global optimization with polynomials and the problem of moments / J. Lasserre // SIAM J.Optim. – 2001ю – Vol. 11, № 3. – P. 796–817.
6. Ding Y. On Efficient Semidefinite Relaxations for Quadratically Constrained Quadratic Programming / Y. Ding. – Waterloo, Ontario, Canada. – 2007. – 68 p.
7. Todd M. J. Semidefinite optimization / M. J. Todd //Acta Numerica. – 2001. – № 10. – P. 515–560.
8. Косолап А.И. Методы глобальной оптимизации / А.И. Косолап. – Днепропетровск: Наука и образование, 2013. – 318 с.
9. Horst R. Global Optimization: Deterministic Approaches, 3rd ed./ R. Horst, H. Tuy. – Springer-Verlag, Berlin, 1996. – 726 p.
10. Шор Н.З. Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация / Н.З. Шор, С.И. Стеценко. – К.: Наукова думка, 1989.– 205с.
11. Floudas C.A. Quadratic optimization / C.A. Floudas, V. Visweswaran. – Princeton University, Princeton, 1995. – 53 p.
12. Nocedal J. Numerical optimization / J. Nocedal, S.J. Wright. – Springer, 2006. – 685 p.
13. Nesterov Y. Interior point polynomial algorithms in convex programming / Y. Nesterov, A.S. Nemirovskii // SIAM Studies in Applied Mathematics. – 1994. – Vol. 13. – SIAM, Philadelphia,USA. – 405 p.
14. Epperly T.G.W. Global optimization test problem with solution / T.G.W. Epperly, R.E. Swaney. – 1995. – 34 p. Available at http://citeseer.nj.nec.com /147308.html.
15. Aguirre A.H. COPSO: Constrained Optimization via PSO algorithm. Appendix A: Benchmark functions / A.H. Aguirre, A.E.M. Zavala, E.V. Diharce, S.B. Rionda. – 2007. – P.21–28.

Надійшла у першій редакції 10.10.2013, в останній - XX.XX.2013.