УДК 519.85

А.И. Косолап

Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ НЕВЫПУКЛОЙ КВАДРАТИЧНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Розглядається загальна задача квадратичної оптимізації, яка відноситься до класу NP-складних. Для її розв'язку використовується метод напіввизначеної релаксації. Для розв'язку задачі напіввизначеного програмування пропонуеться узагальнений симплекс-метод.

Рассматривается общая задача квадратичной оптимизации, которая принадлежит классу NP-сложных. Для ее решения используется метод полуопределенной релаксации. Для решения задачи полуопределенного программирования предлагается обобщенный симплекс-метод.

We consider the general problem of quadratic optimization which belongs to NP-hard class. For its solution we use the method of a semidefinite relaxation. For the solution of the problem of semidefinite programming we offer the generalised simplex-method.

Ключевые слова: невыпуклая квадратичная оптимизация, полуопределенная релаксация, прямо-двойственный метод внутрешней точки, квадратичная релаксация, симплекс-метод.

Введение. Многие задачи из области экономики, финансов, оптимизации проектов, планирования, компьютерной графики, управления сложными системами преобразуются к задачам квадратичной оптимизации в конечномерном пространстве, когда целевая функция и ограничения содержат общие квадратичные функции. Такие задачи содержат множество локальных минимумов и относятся к классу NP-сложных. Допустимое множество этих задач может быть несвязным и даже дискретным.

Кроме множества приложений, интерес к этим задачам стимулируется унифицированной структурой входных данных при разработке соответствующего программного обеспечения. Входными данными задачи являются симметрические матрицы и векторы.

На сегодняшний день эффективно разрешимой является только задача минимизации общей квадратичной функции при одном выпуклом квадратичном ограничении [1]. Для задачи с двумя квадратичными ограничениями эффективные алгоритмы разработаны только для некоторых частных случаев [2].

Одним из общих подходов при решении этого класса задач является полуопределенная релаксация [3–4]. В этом случае квадратичная функция x^TAx представляется в виде Axx^T или $A{\cdot}X$, где X – положительно полуопределенная матрица ранга единица. Такое преобразование позволяет преобразовать общую квадратичную задачу к линейной задаче полуопределенной оптимизации, в которой неизвестной является полуопределенная матрица. Задача полуопределенной оптимизации является эффективно разрешимой. Однако без требования, чтобы ранг искомой матрицы был равен единице, полуопределенная релаксация является приближенным преобразованием. Множество всех полуопределенных матриц образует выпуклый конус, крайними лучами (образующими) которого являются полуопределенные матрицы ранга единицы. Число таких матриц ранга единица бесконечно, поэтому конус полуопределенных матриц не является многогранным. Однако не каждый граничный луч является крайним. Поэтому, если решение преобразованной задачи полуопределенной оптимизации достигается в крайнем луче конуса полуопределенных матриц, то полуопределенная релаксация будет точной. Решение линейной задачи полуопределенной оптимизации не является простым, так как условие положительной определенности матрицы не может быть задано в явном виде. Положительная определенность матрицы равносильна положительности ее минимального собственного значения.

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, которые не представляют практической значимости [5]. Существуют и другие подходы, использующие двойственность [6] или декомпозицию [7]. Однако и в этих случаях гарантируется получение только приближенных оценок. Поэтому проблема эффективного решения общих квадратичных задач до настоящего времени остается открытой.

Постановка задачи и алгоритм ее решения. Рассмотрим общую задачу квадратичной оптимизации

$$\min\{f_0(x)|f_i(x) \le 0,\ i = 1,\ldots, m,\ x \in E^n\}, \quad (1)$$

где все функции $f_i(x) = x^TA_ix + b_i^T + c_i$ – квадратичные, b_i, x – векторы n-мерного евклидового пространства, c_i – константы, а все матрицы A_i – симметричны. Использование полуопределенной релаксации задачи (1) преобразует ее к линейной задаче полуопределенной оптимизации

$$\min\{Q_0 \cdot X | Q_i \cdot X \le 0,\ i = 1,\ldots,m,\ X \ge 0\},$$

где X – положительно полуопределенная матрица

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

$(X \cdot Y = \sum\sum x_{ij}y_{ij})$, а

$$Q_0 = \begin{pmatrix} 0 & b_0^T / 2 \\ b_0 / 2 & A_0 \end{pmatrix},$$

$$Q_i = \begin{pmatrix} c_i & b_i^T / 2 \\ b_i / 2 & A_i \end{pmatrix}.$$

Для ее решения используют эффективный прямо-двойственный метод внутренней точки [8]. Он используется, когда решение прямой задачи (2) и соответствующей двойственной задачи совпадают. Однако это будут не всегда. Разрыв двойственности может быть даже в случае, когда прямая и двойственная задачи будут иметь решения. Рассмотрим использование симплекс-метода для решения задачи полуопределенной оптимизации. Запишем задачу полуопределенного программирования в каноническом виде

$$\min\{C \cdot X | A_i \cdot X = b_i,\ i = 1,\ldots,\ m,\ X \ge 0\}. \tag{3}$$

Известно, что любая положительно определенная матрица X ранга k может быть представлена в виде линейной комбинации матриц ранга 1

$$X = \sum_{j=1}^{k} \alpha_j x^j (x^j)^T, \alpha \ge 0. \tag{4}$$

Подстановка выражения (4) в (3) приводит к задаче линейного программирования

$$\min\{\sum_{j=1}^{k} \alpha_j C \cdot X_i \mid \sum_{j=1}^{k} \alpha_j A_i \cdot X_j = b_i, i = 1,\ldots,m, \alpha \ge 0\}. \tag{5}$$

Первоначально в качестве векторов x^j достаточно взять векторы с компонентами 0, +1, – 1. Обозначим через B базисную матрицу оптимального решения задачи (5). Будем искать новый вектор x^s для которого текущее базисное решение не является оптимальным. Если такого вектора не существует, то будем искать большее число векторов для которых сумма (4) не будет оптимальным решением. Если таких векторов не существует, то текущее базисное решение является оптимальным для задачи (4). Новый столбец матрицы ограничений будет иметь вид

$$B^{-1}A_iX_s,$$

а строка целевой функции

$$C \cdot X_s - \sum_{j=1}^{k} C \cdot X_{B(j)} B^{-1} A_j X_s, \tag{6}$$

где $B(j)$ – множество индексов базисных переменных. Условие (6) перепишем в виде

$$(C - \sum_{j=1}^{m} C \cdot X_{B(j)} B^{-1} A_j) X_s,$$

или

$$Q \cdot X_s = (x^s)^T Q x^s,$$

где

$$Q = C - \sum_{j=1}^{m} C \cdot X_{B(j)} B^{-1} A_j.$$

Если матрица Q – положительно определенная (непосредственной проверкой убеждаемся, что матрица Q – симметрическая), то $Q \cdot X_s > 0$ и текущее базисное решение оптимально для задачи (3) (не существует матрицы X_s для которой значение целевой функции задачи (5) можно уменьшить).

Для проверки положительной определенности симметрической матрицы Q достаточно решить задачу

$$\min\{x^TQx | \|x\|^2 = 1\}. \tag{7}$$

Если в точке минимума $x^TQx > 0$, то матрица Q – положительно определенная. Воспользуемся метод квадратичной релаксации для решения задачи (7). Преобразуем ее к эквивалентной

$$\min\{x_{n+1}|\ x^TQx + q \le x_{n+1},\ ||x||^2 = 1\}, \tag{8}$$

где $q > 0$, такое, что $x^TQx + q > 0$. Преобразуем пространство переменных $z = Px$, где матрица P равна

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ z_1 & z_2 & \dots & z_{n+1} \end{pmatrix}.$$

Задача (8) преобразуется к виду

$$\min\{||z||^2|\ z^TQz + q \le ||z||^2,\ ||z||^2 = 1\}.$$

Следующее преобразование позволяет преобразовать матрицу Q к положительно определенной

$$\min\{||z||^2|\ z^TQ^*z + q \le d,\ r||z||^2 = d,\ ||z||^2 = 1\}. \tag{9}$$

где $r > 0$ такое, что матрица $Q^* = Q + (r - 1)I$ – положительно определенная (матрица с преобладающей главной диагональю). Теперь достаточно решить задачу

$$\min\{x^TQ^*x|||x||^2 = 1\}. \tag{10}$$

Решения задачи (9) будет найдено из решения последней задачи умножением на положительную константу, которая не будет влиять на положительную определенность матрицы Q. При хорошем начальном приближении, решение задачи (10) может быть получено в явном виде. Решим последовательность задач

$$\max\{e^ix|x^TQ^*x = 1\},\ i = 1,\dots,n + 1,$$

где e^i – единичные вектора. Решения этих задач равны

$$x = \frac{(Q^*)^{-1}e^i}{\sqrt{(e^i)^T\,(Q^*)^{-1}e^i}}.$$

Определим индекс решения с максимальным по норме значением и выберем это решение в качестве начального приближения. Затем, решим последовательность задач

$$\max\{(x^s)^Tx|x^TQ^*x = 1\}.$$

После k итераций будет найдено приближенное решение задачи (10)

$$x^k = \frac{(Q^*)^{-k}e^s}{\sqrt{q_{ss}^{-(2k-1)}}}.$$

Теперь для проверки положительной определенности матрицы Q достаточно вычислить выражение $(x^k)^TQx^k$, если оно больше нуля, то матрица Q – положительно определенная, в противном случае включение матрицы $X_s = x^k(x^k)^T$ приведет на следующей итерации симплекс-метода к уменьшению целевой функции.

Покажем, что симплекс-метод для задачи полуопределенного программирования будет сходиться к решению за конечное число итераций. Рассмотрим текущий и оптимальный базис. Эти базисы определяют некоторое многогранное множество. Каждый базис также определяет многогранное множество. Множество граней, образованное текущим базисом и одной из вершин оптимального базиса будет разделяющей гранью этих двух базисов. Так как допустимое множество задачи (3) выпуклое и связное, то по крайней мере одна разделяющая грань пересечет это множество в точке с меньшим значением целевой функции. Таким образом, будет получен новый базис с меньшим значением целевой функции. Продолжая этот процесс, мы за конечное число итераций перейдем к оптимальному базису.

Так как оптимальный базис является линейной комбинацией матриц ранга единица, то это решение может быть недопустимым для задачи квадратичной оптимизации. Для получения допустимого базисного решения, на каждой итерации симплекс-метода необходимо решать следу-ющую задачу

$$\min\{x^TQx|x^TA_ix = b_i,\ i = 1,\dots,m,\ ||x||^2 = 1\}.$$

Использование метода квадратичной релаксации приводит к сложной задаче поиска максимума квадрата нормы вектора на пересечении эллипсоидов с общим центром [9]. Если для некоторого промежуточного базиса только одно значение $\alpha_i > 0$ (базис существенно вырожденный), то этот базис будет допустимым для задачи квадратичной оптимизации и будет верхней границей решения.

Поиск начального базисного решения зависит от начального выбора матриц X_j. Их линейная комбинация может не содержать допустимых точек задачи (3). Тогда в базис необходимо ввести произвольную матрицу X_j, для которой новая линейная комбинация будет содержать допустимые точки задачи (3). Для исключения этой матрицы из базиса, достаточно заменить целевую функцию задачи (5) на $E\cdot X_j$, где элементы матрицы E равны e_{ij} =1, если соответствующие элементы матрицы X_i положительны и $e_{ij} = -1$, в противном случае. Очевидно, что если допустимое базисное решение задачи (5) существует, то $E\cdot X_j = 0$ и будет найден допустимый базис этой задачи, после чего возвращаемся к исходной целевой функции. Это есть реализация метода искусственного базиса для задачи (5).

Пример 1. Рассмотрим задачу квадратичной оптимизации

Найти

$$\min\|x\|^2$$

при ограничениях:

$$8x_1^2 - x_2^2 - 2x_1x_2 - 80x_1 + 12x_2 + 100 \le 0,$$

$$8x_1^2 - x_2^2 + 24x_2 + 48 \le 0.$$

Ее допустимая область представлена на рис. 1. Задача имеет два локальных минимума.

Метод полуопределенной релаксации позволяет получить решение x^0 = (0.879, – 2.169), которое близко к оптимальному x^* = (1.029, – 2.159).

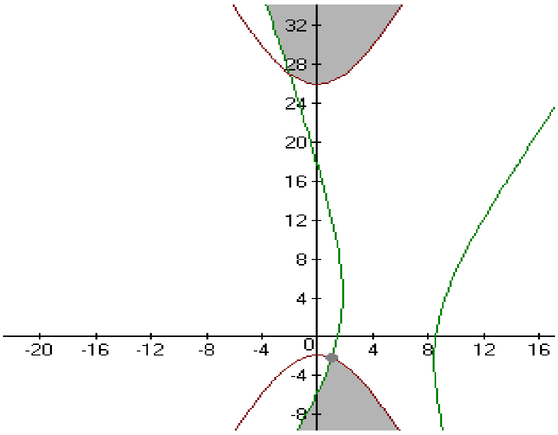

Рис. 1. Два локальных минимума

Пример 2. Найти

$$\min\|x\|^2 \tag{7}$$

при ограничениях:

$$-10x_1^2 + x_2^2 - 8x_1x_2 - 2x_1 + x_2 + 1 \le 0,$$

$$x_1^2 - 10x_2^2 + 10x_1x_2 + x_1 - 2x_2 + 3 \le 0.$$

В этой задаче 4 локальных минимума, см. рис. 2.

Метод полуопределенной релаксации дает решение x^0 = (0.435, 0.363), которое является приближенным для оптимального x^* = (0.2174, 0.5802).

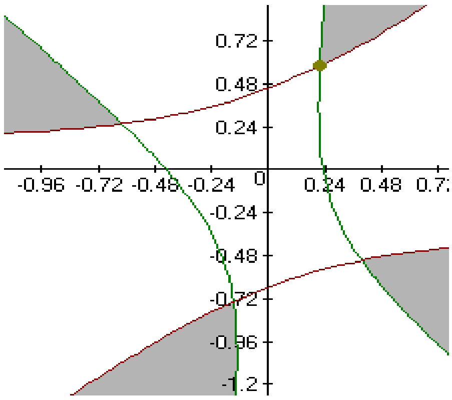

Рис.2. Четыре локальных минимума

Выводы. В работе используется полуопределенная релаксация для решения общей задачи квадратичной оптимизации. Для решения задачи полуопределенного программирования предлагается обобщение симплекс-метода. Доказана его конечная сходимость. Проведены численне эксперименты, свидетельствующие об эффективности выбранного метода решения невыпуклых квадратичных задач.

Библиографические ссылки

1. **Fortin C.** Computing the local minimizers of a large and sparse trust region subproblem / C. Fortin. – Montreal: McGill University, 2004. – 149 p.

2. **Beck A.** Strong duality in nonconvex quadratic optimization with two quadratic constraints / A. Beck, Y. C. Eldar // SIAM J. Optim., 17(3), 2006. – P. 844-860.
3. **Lasserre J.** Global optimization with polynomials and the problem of moments / J. Lasserre // SIAM J.Optim., Vol. 11, N. 3, 2001. – P. 796–817.
4. **Ding Y.** On Efficient Semidefinite Relaxations for Quadratically Constrained Quadratic Programming / Y. Ding. – Waterloo, Ontario, Canada. – 2007. – 68 p.
5. **Horst R.** Global Optimization: Deterministic Approaches, 3rd ed. / R. Horst, H. Tuy. - Springer-Verlag, Berlin, 1996.
6. **Шор Н.З.** Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация / Н. З. Шор, С.И. Стеценко. – К., 1989.– 205с.
7. **Floudas C.A.** Quadratic optimization / C. A. Floudas, V. Visweswaran. – Princeton : Princeton University. – 1995. – 53 p.
8. **Todd M. J.** Semidefinite optimization / M. J. Todd //Acta Numerica, 10, 2001. – P. 515–560.
9. **Nemirovski A.**, Roos C., Terlaky T. On maximization of quadratic form over intersection of ellipsoids with common center / A. Nemirovski, C. Roos, T. Terlaky // Mathematical Programming. – 1999. – Vol. 86. – P. 463 – 473.

Надійшла до редколегії 23.04.10