ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ
Октябрь—декабрь 2005. Серия 1. Том 12, № 4, 81–91

УДК 519.714

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СПЕЦИАЛЬНЫХ ЗАДАЧ НЕВЫПУКЛОГО КВАДРАТИЧНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ*)

О. В. Хамисов

Описана редукция задач невыпуклого квадратичного программирования к задачам линейного частично-целочисленного программирования. Приводятся верхние оценки для максимального числа стационарных решений в задаче минимизации невыпуклой квадратичной функции на выпуклом многограннике. Эффективность предлагаемого подхода протестирована на численных примерах, содержащих от 5 до 200 переменных.

Введение

В статье рассматриваются две задачи невыпуклого квадратичного программирования: минимизация невыпуклой квадратичной функции на выпуклом многограннике и минимизация линейной функции на выпуклом многограннике при одном дополнительном ограничении-неравенстве, задаваемом невыпуклой квадратичной функцией.

Подобные задачи встречаются при моделировании сложных технических систем [3, 6] в экономико-математическом моделировании [5], при нахождении равновесных решений в рыночных моделях функционирования электроэнергетических систем [1], а также во многих других прикладных задачах. Кроме того, данные задачи играют важную роль в качестве вспомогательных при решении более общих задач глобальной оптимизации [10]. Необходимо также отметить, что обе задачи являются NP-трудными [13].

Для решения рассматриваемых задач существуют различные методы глобальной оптимизации [5, 10, 11]. Как правило, они требуют проведения предварительного, не всегда тривиального анализа данных задачи, например, нахождения достаточно хорошей оценки минимального собственного числа симметрической матрицы для представления целевой

*) Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 03–01–00518).

квадратичной функции в виде разности двух выпуклых квадратичных функций. Наиболее эффективными методами глобальной оптимизации являются методы ветвей и границ. Поэтому для разработки хорошего решателя на основе этих методов требуются существенные дополнительные усилия и с математической, и с программистской точек зрения.

В данной статье задача нахождения глобального минимума квадратичной функции на многограннике сводится к задаче линейного частично-целочисленного программирования. Связано это с тем, что современное программное обеспечение для решения задач целочисленной оптимизации разработано существенно лучше и распространено гораздо шире, чем программное обеспечение для решения задач глобальной оптимизации.

Статья состоит из двух параграфов. В первом параграфе описана редукция задачи минимизации невыпуклой квадратичной функции на выпуклом многограннике к задаче линейного целочисленного программирования. Приводятся результаты численных экспериментов. Второй параграф посвящен решению задачи линейного программирования с дополнительным квадратичным ограничением-неравенством.

§ 1. Редукция задачи минимизации невыпуклой квадратичной функции на выпуклом многограннике к задаче линейного целочисленного программирования

В данном параграфе рассматривается следующая задача

$$q(x) \to \min, \tag{1}$$

где

$$x \in X \subset \mathbb{R}^n, \tag{2}$$

$q(x) = x^TQx + x^Tc$, симметрическая квадратная матрица Q порядка n имеет хотя бы одно отрицательное собственное число, $c \in \mathbb{R}^n$, множество X — выпуклый многогранник, определяемый системой неравенств

$$X = \{x \in R^n \mid Ax \leqslant b\}, \tag{3}$$

A — матрица размера $m \times n$ и $b \in \mathbb{R}^m$. При сделанных предположениях задача (1)–(3) всегда имеет решение.

Запишем необходимые условия оптимальности:

$$\nabla q(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a^i = 0, \tag{4}$$

$$\lambda_i \left(x^T a^i - b_i\right) = 0, \quad 1 \leqslant i \leqslant m, \tag{5}$$

$$Ax \leqslant b, \tag{6}$$

$$\lambda_i \geqslant 0, \quad 1 \leqslant i \leqslant m, \tag{7}$$

где

$$\nabla q(x) = 2Qx + c, \tag{8}$$

a^i — строки матрицы A, b_i — элементы вектора b, $1 \leqslant i \leqslant m$.

Из (8) следует, что

$$x^T \nabla q(x) = 2x^T Qx + c^T x = 2q(x) - c^T x. \tag{9}$$

Тогда из (4), (5) и (9) получаем

$$x^T \nabla q(x) + \sum \lambda_i (x^T a^i) = 2q(x) - c^T x + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i b_i = 0.$$

Следовательно, для решений системы (4)–(7) справедливо равенство

$$q(x) = \frac{1}{2}(c^T x - b^T \lambda). \tag{10}$$

Введём дополнительные (слабые) переменные

$$s_i = b_i - x^T a^i, \quad 1 \leqslant i \leqslant m.$$

Задача квадратичного программирования (1)–(3) эквивалентна следующей задаче:

$$\frac{1}{2}\left(c^T x - b^T \lambda\right) \to \min_{(x,\lambda)}, \tag{11}$$

$$2Qx + c + \lambda^T A = 0, \tag{12}$$

$$\lambda_i s_i = 0, \qquad 1 \leqslant i \leqslant m, \tag{13}$$

$$Ax + s = b, \tag{14}$$

$$\lambda_i \geqslant 0, \qquad 1 \leqslant i \leqslant m, \tag{15}$$

$$s_i \geqslant 0, \qquad 1 \leqslant i \leqslant m. \tag{16}$$

Задача (11)–(16) является задачей минимизации линейной функции при линейных ограничениях (12), (14)–(16) и билинейных ограничениях (13) в пространстве переменных (x, λ).

Предположим, что множество X удовлетворяет условию Слейтера, т. е. существует $\overline{x} \in \operatorname{int}(X)$. Тогда (см. [8])

$$\lambda_j \leqslant \max_{1 \leqslant i \leqslant m} \left(\frac{q_0(\overline{x}) - \gamma}{(b_i - \overline{x}^T a^i)} \right), \quad 1 \leqslant j \leqslant m,$$

где γ — любая нижняя оценка минимального значения $q(x)$ на X. Очевидно, что переменные s_i также ограничены. Таким образом, можно считать, что существует константа $N > 0$ такая, что

$$\lambda_i < N, \;\; s_i < N, \;\; 1 \leqslant i \leqslant m. \tag{17}$$

Смысл ограничений дополняющей нежёсткости состоит в том, что переменные λ_i и s_i не могут быть одновременно отличными от нуля. Вводя вспомогательные целочисленные переменные z_i, $1 \leqslant i \leqslant m$, и учитывая неравенства (17), ограничения (13) можно переписать в следующем эквивалентном виде (см. [2]):

$$\lambda_i - N \cdot z_i \leqslant 0, \quad s_i - N(1 - z_i) \leqslant 0, \quad 1 \leqslant i \leqslant m. \tag{18}$$

Заменяя в задаче (11)–(16) ограничения (13) на ограничения (18), получим задачу линейного частично-целочисленного программирования (11)–(12), (18), (14)–(16). Предположим, что матрица Q имеет k отрицательных собственных значений. В [9] показано, что в этом случае в точке оптимума должны быть активными не менее k ограничений. Следовательно, не более $n - k$ переменных z_i должны обращаться в 0. Поэтому переменные z_i должны удовлетворять следующему ограничению $\sum\limits_{i=1}^{m} z_i \geqslant n - k$. Таким образом, получается следующая задача линейного частично-целочисленного программирования:

$$\frac{1}{2}\left(c^T x - b^T \lambda\right) \to \min_{(x,\lambda)}, \tag{20}$$

$$2Qx + c + \lambda^T A = 0, \tag{21}$$

$$\lambda_i - N z_i \leqslant 0, \quad s_i - N(1 - z_i) \leqslant 0, \quad 1 \leqslant i \leqslant m, \tag{22}$$

$$Ax + s = b, \tag{23}$$

$$\lambda_i \geqslant 0, \quad 1 \leqslant i \leqslant m, \tag{24}$$

$$s_i \geqslant 0, \quad 1 \leqslant i \leqslant n, \tag{25}$$

$$\sum_{i=1}^{m} z_i \geqslant n-k. \tag{26}$$

Число целочисленных переменных в задаче (20)–(26) равно числу ограничений в исходной задаче (1)–(3). Если (x^*, λ^*, z^*) — оптимальное решение задачи (20)–(26), то x^* — оптимальное решение задачи (1)–(3) и λ^* — соответствующий вектор двойственных переменных. Если допустимое множество в задаче (20)–(26) не пусто, то любая допустимая точка задачи (20)–(26) соответствует стационарной точке задачи (1)–(3).

Для решения задачи (20)–(26) можно использовать любой метод линейного частично-целочисленного программирования.

В общем случае нахождение одной стационарной точки состоит в решении соответствующей системы линейных уравнений вида

$$2Qx + c + \lambda^T A = 0 \tag{27}$$

$$x^T a^i - b_i = 0, \quad i \in I_a, \tag{28}$$

$$\lambda_i = 0, \quad i \notin I_a, \tag{29}$$

где I_a — множество номеров активных ограничений. Нетрудно видеть, что для нахождения глобального минимума в задаче (1)–(3) методом перебора всех критических точек необходимо решить 2^m систем линейных алгебраических уравнений вида (27)–(29) (см. также [15]).

С другой стороны,

$$2^m = \sum_{i=0}^{m} \binom{m}{i}. \tag{30}$$

Число $\binom{m}{i}$ есть максимально возможное в общем случае число стационарных точек, в которых имеется i активных ограничений. Следовательно, последним слагаемым при подсчёте числа стационарных точек в сумме вида (30) должно быть число $\binom{m}{n}$. Если k — число отрицательных собственных значений Q, то, как упоминалось выше, число активных ограничений $i \geqslant k$ и, следовательно, первым слагаемым в сумме вида (30) должно быть число $\binom{m}{k}$. Таким образом, относительно максимального числа стационарных точек в задаче (1)–(3) справедливо следующее утверждение.

Утверждение 1. *Число стационарных точек в задаче* (1)–(3) *не превышает числа* $S(n,m,k) = \sum\limits_{i=k}^{m} \binom{m}{i}$.

Из утверждения 1 следует, что для нахождения глобального минимума в задаче (1)–(3) достаточно решить $S(n,m,k)$ систем линейных алгебраических уравнений вида (27)–(29).

Следствие 1. *Число допустимых точек в задаче* (20)–(26) *не превосходит* $S(n,m,k)$.

В таблице 1 приведены значения $S(n,m,k)$ для различных n, m и k. Число $S(n,m,k)$ дает очень завышенную оценку числа стационарных точек. Как видно из таблицы 1 переборный метод, основанный на просмотре всех стационарных точек и последующем выборе глобального минимума, допустим для задач, в которых число переменных не превышает 10.

Таблица 1

n	m	k	$S(n,m,k)$
3	5	1	25
3	5	2	20
3	5	3	10
5	15	1	4943
5	15	3	4823
5	15	5	3003
7	20	1	137979
7	20	4	136629
7	20	7	77520
10	30	1	53009101
10	30	5	52977171
10	30	10	30045015
15	40	1	84585398827
15	40	7	84580800349
15	40	15	40225345056
20	60	1	7776048412324713
20	60	10	7776030628305231
20	60	20	4191844505805495

Таблица 2

n	m	T
5	25	0,609
10	40	0,485
20	70	0,562
30	100	1,945
40	145	4,461
50	200	18,31
60	240	25,862
70	250	52,680
80	270	58,600
90	300	113,961
100	320	139,984
110	340	177,671
120	370	287,312
150	500	1533,712
200	630	1659,429

Были проведены также тестовые расчеты для определения численной эффективности предлагаемой в этом параграфе редукции. Тестовые задачи вида (1)–(3) генерировались случайным образом по известному решению алгоритмом, предложенным в [12]. Тестирование проводилось на компьютере Athlon/1400MgH/512Mb в системе алгебраического моделирования GAMS [4]. Для решения задачи (20)–(26) использовался решатель OSL [7]. Результаты тестирования приведены в таблице 2 с использованием следующих обозначений: n — число переменных, m —

число ограничений задачи (1)–(3), T — время в секундах, затраченное на решение соответствующей задачи (20)–(26). Матрицы в сгенерированных тестовых задачах были плотно заполнены. Особенность решателя OSL состоит в том, что в качестве оптимального решения он выдает целочисленное решение с заданной относительной погрешностью. При решении тестовых задач относительная погрешность была равна 0,01. Константа N в (22) была равна $7 \cdot 10^9$. При решении «плотно заполненных» задач большой размерности значение целевой функции и функций-ограничений становятся очень большими, что влияет на выбор константы N. Произвольно увеличивать N нельзя, поскольку в этом случае приходится одновременно уменьшать относительную погрешность, иначе будет получено хоть и целочисленное, но не оптимальное решение. При решении задач размерности не более 100 не возникало проблем с согласованием значений относительной погрешности и N.

В некоторых случаях можно ускорить решение задачи (20)–(26). Например, если предварительно найдено хорошее локальное решение задачи (1)–(3), то, сопоставив ему допустимое частично-целочисленное решение задачи (20)–(26), можно исключить из решения последней задачи этап, связанный с нахождением допустимого решения. Поскольку число целочисленных переменных равно числу ограничений задачи, наибольшую эффективность данный подход будет иметь для задач с небольшим числом ограничений, например, для задачи минимизации квадратичной функции на симплексе.

§ 2. Задача линейного программирования с одним дополнительным квадратичным ограничением-неравенством

С задачей квадратичного программирования, рассмотренной в предыдущем параграфе, тесно связана следующая задача:

$$c^T x \to \min, \tag{31}$$

$$x \in X = \{x \mid Ax \leqslant b\}, \tag{32}$$

$$q(x) \leqslant 0, \tag{33}$$

где $c \in \mathbb{R}^n$. В данном параграфе предлагается метод нахождения глобального минимума в задаче (31)–(33). Идея метода состоит в редукции данной задачи к последовательности задач вида (1)–(3). В [14] показано, что задачи (1)–(3) и (31)–(33) в определенном смысле являются двойственными. Пусть x^* — оптимальное решение задачи (31)–(33). Тогда множество

$$D = \{x \mid x \in X; q(x) \leqslant 0, c^T x \leqslant c^T x^* - \varepsilon\},$$

где $\varepsilon > 0$, пусто. Следовательно, глобальное минимальное значение целевой функции в задаче

$$\begin{aligned}
&q(x) \to \min,\\
&c^T x \leqslant c^T x^* - \varepsilon,\\
&x \in X
\end{aligned}$$

должно быть положительным. Эта задача является задачей квадратичной оптимизации вида (1)–(3), т. е. задачей минимизации квадратичной функции на многограннике. Таким образом, знак минимального значения целевой функции задачи вида (1)–(3) может быть использован в качестве критерия глобальной ε-оптимальности для задачи (31)–(33). Взаимосвязь между оптимальными ($\varepsilon = 0$) решениями задач (1)–(3) и (31)–(33) детально анализируется в [14]. Двойственность между этими задачами понимается в том смысле, что целевая функция в одной задаче является ограничением в другой и наоборот.

Пусть теперь $\overline{x}$ — произвольная допустимая точка задачи (31)–(33). Из точки $\overline{x}$ перейдем в точку $\hat{x}$, применяя какой-либо метод локального спуска. Затем решим задачу

$$\begin{aligned}
&q(x) \to \min,\\
&c^T x \leqslant c^T \hat{x} - \varepsilon,\\
&x \in X.
\end{aligned}$$

Пусть $\tilde{x}$ — оптимальное решение. Если $q(\tilde{x}) > 0$, то $\tilde{x}$ является ε-оптимальным решением задачи (31)–(33). В противном случае снова из точки $\tilde{x}$ перейдем в следующую стационарную точку при помощи какого-либо метода локального спуска. Формальное описание метода решения задачи (31)–(33) выглядит следующим образом.

Шаг 0. Решить задачу линейного программирования (31)–(32). Пусть v — соответствующее оптимальное решение. Если $q(v) \leqslant 0$, то стоп; v есть оптимальное решение задачи (31)–(33).

Шаг 1. Установить $k = 0$ и задать $\varepsilon > 0$. Решить задачу квадратичного программирования

$$q(x) \to \min,$$
$$x \in X.$$

Пусть $\overline{x}^0$ — соответствующее оптимальное решение. Если $q(\overline{x}^0) > 0$, то стоп; допустимое множество задачи (31)–(33) пусто.

Шаг 2. Стартуя из точки $\overline{x}^k$, любым методом локального спуска находится стационарное решение x^k задачи (31)–(33).

Шаг 3. Решить задачу квадратичного программирования

$$q(x) \to \min,$$

$$c^T x \leqslant c^T x^k - \varepsilon,$$

$$x \in X.$$

Пусть $\overline{x}^{k+1}$ — оптимальное решение. Если $q(\overline{x}^{k+1}) > 0$, то стоп; x^k является ε-оптимальным решением задачи (31)–(33).

Шаг 4. Установить $k = k + 1$ и перейти на шаг 2.

Так как X — компактное множество и $\varepsilon > 0$, то приведенный выше метод либо установит несовместность задачи, либо найдет ε-оптимальное решение за конечное число итераций. Продемонстрируем работу метода на следующем примере.

Пример. Найти глобальный минимум в задаче

$$3x_1 - x_2 \to \min, \tag{34}$$

$$-1 \leqslant x_1 \leqslant 3, \tag{35}$$

$$-2 \leqslant x_2 \leqslant 2, \tag{36}$$

$$1 - x_1 x_2 \leqslant 0. \tag{37}$$

Шаг 0. Оптимальное решение $v = (-1, 2)$ задачи линейного программирования (34)–(36) не является допустимым. Поэтому переходим на шаг 1.

Шаг 1. Минимизируем функцию $q(x_1, x_2) = 1 - x_1 x_2$ при ограничениях (35)–(36). Оптимальное решение $\overline{x}^0 = (3, 2)$. Положить $k = 0$ и $\varepsilon = 10^{-6}$.

Шаг 2. *Итерация* 1. Осуществляя локальный спуск из точки $\overline{x}^0$ в задаче (34)–(37), получим точку $x^0 = (0{,}5; 2)$.

Шаг 3. *Итерация* 1. Решая задачу квадратичного программирования

$$q(x_1, x_2) \to \min$$

при ограничениях (35)–(36) и

$$3x_1 - x_2 \leqslant 3x_1^0 - x_2^0 - \varepsilon = -0,5 - \varepsilon,$$

находим точку $\overline{x}^1 = (-1, -1)$. Так как $q(\overline{x}_1^1, \overline{x}_2^1) = 0$, то переходим на шаг 4.

Шаг 4. *Итерация* 1. Установить $k = 1$ и перейти на шаг 2 итерации 2.

Шаг 2. *Итерация* 2. Соответствующая точка $x^1 = (-1, -1)$.

Шаг 3. *Итерация* 2. Оптимальное значение целевой функции в соответствующей задаче квадратичного программирования положительно. Следовательно, $x^1 = (-1, -1)$ есть ε-оптимальное решение задачи (34)–(37).

Эффективность предлагаемого метода решения задачи (31)–(33) определяется эффективностью решения задачи квадратичного программирования, решаемой на шаге 3. Следовательно, основываясь на результатах предыдущего параграфа, можно предполагать, что данный метод позволяет эффективно решать задачи (31)–(33), в которых число переменных не превышает 100.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Гамм А. З., Таирова Е. В., Хамисов О. В.** Поиск равновесных точек в моделях рыночных механизмов ЭЭС // Известия РАН. Энергетика. 2000. № 6. С. 57–63.
2. **Корбут А. А., Финкельштейн Ю. Ю.** Дискретное программирование. М.: Наука, 1969.
3. **Шор Н. З., Стеценко С. И.** Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация. Киев: Наукова думка, 1989.
4. **Brook A., Kendrick D., Meeraus A.** GAMS. Release 2.25. A user's guide. GAMS Development Corporation, 1996.
5. **Floudas C. A., Visweswaran V.** Quadratic optimization // Handbook of global optimization. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1995. P. 217–263.
6. **Floudas C. A., Pardalos P. M.** A collection of test problems for constrained global optimization algorithms. Berlin: Springer-Verlag, 1990. (Lecture Notes in Computer Science; V. 455).
7. GAMS. The solver manuals. OSL. GAMS Development Corporation, 1996.
8. **Hirriart-Urruty J.–B., Lemareshal C.** Convex analysis and minimization algorithms I. Berlin: Springer-Verlag, 1993.
9. **Horst R., Pardalos P. M., Thoai N. V.** Introduction to global optimization. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1995.
10. **Horst R., Tuy H.** Global optimization. Deterministic approaches. Berlin: Springer, 1996.
11. **Konno H., Thach P. T., Tuy H.** Optimization on low rank nonconvex structures. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1996.

12. **Pardalos P. M., Rosen J. B.** Constrained global optimization: algorithms and applications. Berlin: Springer-Verlag, 1987. (Lecture Notes in Computer Science; V. 268).

13. **Pardalos P. M., Vavasis S.** Quadratic programming with one negative eigenvalue is NP-hard // J. Glob. Optim. 1991. V. 1, N 1. P. 15–22.

14. **Tuy H.** D.C. optimization: Theory, methods and applications // Handbook of global optimization. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1995. P. 149–216.

15. **Vavasis S.** Nonlinear optimization. Complexity issues. Oxford: Oxford University Press, 1991.

Адрес автора:

Институт систем энергетики
им. Л. А. Мелентьева СО РАН,
ул. Лермонтова, 130,
664033 Иркутск,
Россия.
E-mail: khamisov@isem.sei.irk.ru

Статья поступила
24 декабря 2003 г.