

O metodă bazată pe funcții de complementaritate pentru optimizarea pătratică

Vasile MORARU¹, Sergiu ZAPOROJAN¹, Dumitru STOIAN²,
¹Universitatea Tehnică a Moldovei, ²Universitatea de Stat „Alecru Russo” din Bălți
moraru@mail.utm.md, zaporojan_s@yahoo.com, dmitrii.stoian@gmail.com

Abstract — În lucrarea de față problema de programare pătratică strict convexă cu restricții inegalități liniare, utilizând o abordare a multiplicatorilor Lagrange, se reduce la rezolvarea unei probleme cu constrângeri simple. În urma unor transformări convenabile cu funcții neliniare de complementaritate ultima problemă se reduce la rezolvarea unui sistem de ecuații netede cu ajutorul metodei Newton, asigurând o viteză pătratică de convergență locală.

Cuvinte cheie — programare pătratică, problema duală, multiplicatorii Lagrange, metoda Newton, funcții neliniare de complementaritate.

I. INTRODUCERE

În lucrarea de față se consideră problema de programare pătratică cu restricții liniare:

$$\left. \begin{aligned} f(x) = \frac{1}{2} x^T H x + g^T x \rightarrow \min \\ \text{referitor la : } Ax \geq b, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

unde vectorul $x \in \mathfrak{R}^n$ este variabil iar matricea $H \in \mathfrak{R}^{n \times n}$, vectorul $g \in \mathfrak{R}^n$, matricea $A \in \mathfrak{R}^{m \times n}$ și vectorul $b \in \mathfrak{R}^m$ sunt mărimi cunoscute. Simbolul “ T ” arată operația de transpunere. Vom presupune că $\text{rang}(A) = m$ iar H este o matrice simetrică și pozitiv definită:

$$x^T H x > 0, \forall x \in \mathfrak{R}^n, x \neq 0.$$

Problema minimizării funcțiilor pătratice convexe supuse constrângerilor liniare apare frecvent în multe aplicații reale din inginerie, fizică, economie, inteligență artificială, analiză structurală, VLSI design, suportul mașinilor vectoriale, administrarea portofoliilor, teoria grafurilor ș.a. Multe tehnici de optimizare neliniară se bazează pe rezolvarea subproblemelor de programare pătratică de tipul (1). O bibliografie completă referitoare la problemele generale de programare pătratică poate fi găsită în [1], lucrare care conține peste 1000 (o mie) de referințe!

Una din cele mai răspândite tehnici de rezolvare a problemelor de optimizare sunt metodele primal-duale bazate pe utilizarea condițiilor de optimalitate Karush-Kuhn-Tucker [2-5].

Investigația noastră este motivată de faptul că, în cazul funcțiilor pătratice strict convexe, problema (1) poate fi transformată, folosind dualitatea Lagrange, într-o problemă de programare pătratică cu constrângeri simple. La rândul său această problemă se reduce la rezolvarea unui sistem de ecuații netede, utilizând tehnica propusă în lucrările [6,8], bazată pe funcțiile de complementaritate. O funcție $\varphi: \mathfrak{R} \times \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R}$ se numește funcție de complementaritate dacă mulțimea soluțiilor ecuației $\varphi(a,b) = 0$ coincide cu mulțimea soluțiilor sistemului: $ab = 0, a \geq 0, b \geq 0$ [7].

Vom arăta că putem reduce rezolvarea problemei considerate (1) la rezolvarea unui sistem de ecuații neliniare convenabil alcătuit doar din m ecuații cu m necunoscute. Acest lucru ne conferă un mare avantaj în cazul rezolvării problemelor de programare matematică în dimensiuni mari.

Este bine cunoscut din literatura de specialitate că rezolvarea problemei de programare pătratică (1) referitor la variabilele primale $x_i, i = 1, 2, \dots, n$ este echivalentă cu rezolvarea problemei duale (2) referitor la variabilele duale $\lambda_i, i = 1, 2, \dots, m$:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} \lambda^T B \lambda - d^T \lambda \rightarrow \min \\ \text{referitor la : } \lambda \geq 0, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

unde

$$\begin{aligned} B &= A H^{-1} A^T \in \mathfrak{R}^{m \times m}, \\ d &= A H^{-1} g + b \in \mathfrak{R}^m. \end{aligned}$$

Menționăm că în presupunerile de mai sus matricea $A H^{-1} A^T$ este o matrice pozitiv definită.

Fie multiplicatorul Lagrange

$$\lambda^* = (\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_m^*)^T \in \mathfrak{R}^m$$

soluția optimă a problemei duale (2). Atunci soluția optimă a problemei considerate (1) poate fi obținută astfel

$$x^* = H^{-1} (A^T \lambda^* - g)$$

ceea ce este echivalent cu rezolvarea următorului sistem de ecuații liniare față de x :

$$H x = A^T \lambda^* - g.$$

II. STRATEGIA FUNCȚIILOR DE COMPLEMENTARITATE PENTRU REZOLVAREA EFICIENTĂ A PROBLEMEI DUALE

Problema duală (2) este o problemă de programare pătratică cu restricții simple. Vectorul $\lambda^* \in \mathfrak{R}^m$ este o soluție optimă pentru problema (2) dacă și numai dacă există multiplicatorul Lagrange $z^* \in \mathfrak{R}^m$, care verifică relațiile algebrice Karush-Kuhn-Tucker [2]:

$$\left. \begin{aligned} AH^{-1}A^T\lambda^* - AH^{-1}g - b - z^* &= 0, \\ (\lambda^*)^T(AH^{-1}A^T\lambda^* - AH^{-1}g - b) &= 0, \\ \lambda^* \geq 0, z^* &\geq 0. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Rezolvarea sistemului de ecuații (3) poate fi realizată, utilizând funcțiile neliniare de complementaritate [6,8], definite astfel:

$$u(y) = y^2 \max(0, y) = \frac{1}{2}(y^3 + |y|y^2),$$

$$v(y) = -y^2 \min(0, y) = -\frac{1}{2}(y^3 - |y|y^2).$$

Funcțiile $u(y)$ și $v(y)$ definite mai sus satisfac următoarelor proprietăți:

1.

$$u(y) = \begin{cases} = 0, & \forall y \leq 0, \\ > 0, & \forall y > 0, \end{cases}$$

$$v(y) = \begin{cases} < 0, & \forall y < 0, \\ = 0, & \forall y \geq 0. \end{cases}$$

2. Funcțiile $u(y)$ și $v(y)$ sunt de de două ori continuu diferențiabile pentru $\forall y \in \mathfrak{R}$.

3. $u(y) = 0$ și $v(y) = 0$ dacă și numai dacă $\frac{d}{dy}u(y) = 0$,

respectiv $\frac{d}{dy}v(y) = 0$ pentru orice $y \neq 0$.

4.

$$u(y) \times \frac{d}{dy}v(y) = \frac{d}{dy}u(y) \times v(y) = 0$$

pentru orice $y \neq 0$.

Introducem $y = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T$ vectorul variabilelor auxiliare $y_i, i = 1, 2, \dots, m$ și definim operatorii $U(y)$ și $V(y) : \mathfrak{R}^m \rightarrow \mathfrak{R}^m$:

$$U(y) = \begin{pmatrix} u(y_1) \\ u(y_2) \\ \vdots \\ u(y_m) \end{pmatrix}, \quad V(y) = \begin{pmatrix} v(y_1) \\ v(y_2) \\ \vdots \\ v(y_m) \end{pmatrix}$$

Cu ajutorul funcțiilor $u(y_i)$ și $v(y_i)$, bazându-ne pe proprietățile 1-4 prezentate mai sus, sistemul Karush-Kuhn-Tucker (3) poate fi transformat în următorul sistem echivalent de $2m$ ecuații neliniare netede cu $2m$ necunoscute:

$$\left. \begin{aligned} AH^{-1}A^T\lambda - d - U(y) &= 0, \\ \lambda - V(y) &= 0. \end{aligned} \right\}$$

Așa cum $\lambda = V(y)$, obținem următorul sistem din m ecuații tot cu atâtea necunoscute y_1, y_2, \dots, y_m :

$$AH^{-1}A^TV(y) - U(y) = AH^{-1}g + b \quad (4)$$

Notăm prin $U'(y)$ și $V'(y)$ matricele diagonale de dimensiune $m \times m$ cu elementele

$$\frac{d}{dy_i}u(y_i), \text{ respectiv } \frac{d}{dy_i}v(y_i), \quad i = 1, 2, \dots, m :$$

$$U'(y) = \begin{pmatrix} \frac{d}{dy_1}u(y_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{d}{dy_2}u(y_2) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{d}{dy_m}u(y_m) \end{pmatrix},$$

$$V'(y) = \begin{pmatrix} \frac{d}{dy_1}v(y_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{d}{dy_2}v(y_2) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{d}{dy_m}v(y_m) \end{pmatrix}.$$

Matricea Jacobiană a funcției-vector

$$F(y) = AH^{-1}A^TV(y) - U(y) - AH^{-1}g - b,$$

utilizând notațiile de mai sus poate fi scrisă astfel

$$F'(y) = AH^{-1}A^TV'(y) - U'(y).$$

Teoremă. Dacă matricea H este pozitiv definită și $\text{rang}(A) = m \leq n$ atunci matricea jacobiană $F'(y)$ este nedegenerată în vecinătatea soluției sistemului (4).

Demonstrația este asemănătoare celei din lucrarea [6]

Fie orice $p \in \mathfrak{R}^m$. Atunci din

$$F'(y)p = 0$$

avem:

$$AH^{-1}A^TV'(y)p = U'(y)p \quad (5)$$

De unde

$$\begin{aligned} [AH^{-1}A^TV'(y)p]^T V'(y)p &= \\ = [U'(y)p]^T V'(y)p &= \\ = [V'(y)U'(y)p]^T p &= 0 \end{aligned}$$

deoarece $V'(y)U'(y) = O \in \mathfrak{R}^{m \times mm}$.

Pe de altă parte,

$$0 = [AH^{-1}A^TV'(y)p]^T V'(y)p \geq \mu \|V'(y)p\|_2^2 > 0,$$

unde $\mu > 0$ cea mai mică valoare proprie a matricei $AH^{-1}A^T$. Astfel $V'(y)p = 0$. Din (5) rezultă că și

$$U'(y)p = 0.$$

Prin urmare, dacă $v'(y_s) \neq 0$ rezultă $p_s = 0$ și $u'(y_s) = 0$. Dacă $v'(y_s) = 0$ rezultă că $u'(y_s) \neq 0$ și $p_s = 0$. Deci

$$p_s = 0, \forall s = 1, 2, \dots, m,$$

adică $\text{rang}(F'(y)) = m$. **Teorema este demonstrată.**

Astfel sistemul de ecuații (4) poate fi rezolvat cu ajutorul metodei Newton, având viteza supraliniară de convergență în vecinătatea soluției.

Fie $y^{(k)}$ aproximația curentă a soluției y^* . Atunci

aproximația $y^{(k+1)}$ se obține în urma rezolvării sistemului de ecuații liniare:

$$F'(y^{(k)})(y - y^{(k)}) = -F(y^{(k)}),$$

sau, în formă desfășurată, a sistemului:

$$\begin{aligned} & [AH^{-1}A^TV'(y^{(k)}) - U'(y^{(k)})](y - y^{(k)}) = \\ & = -AH^{-1}A^TV(y^{(k)}) + U(y^{(k)}). \end{aligned}$$

Soluția optimă λ^* a problemei duale (2) este limita șirului

$$\{\lambda^{(k+1)}\} = \{V(y^{(k+1)})\}.$$

Fie $y^* = (y_1^*, y_2^*, \dots, y_m^*)^T$ soluția sistemului de ecuații (4). Atunci

$$\lambda^* = (AH^{-1}A^T)^{-1}(U(y^*) + AH^{-1}g + b).$$

De aici rezultă soluția optimă a problemei considerate (1):

$$x^* = H^{-1}(A^TV(y^*) - g)$$

Metoda descrisă în această lucrare a fost implementată în cod MAPLE și testată pe un șir de probleme din [9].

Exemplul 1. (Problema nr. 21 [33, p. 44]).

$$\left. \begin{aligned} f(x) &= 0.01x_1^2 + x_2^2 - 100 \rightarrow \min \\ &\text{referitor la :} \\ x_1 &\geq 2, \\ 10x_1 - x_2 &\geq 10. \end{aligned} \right\}$$

$$x^* = (2 \ 0)^T, \quad f(x^*) = -99.96.$$

Exemplul 2. (Problema nr. 35 [9, p. 58]).

$$\left. \begin{aligned} f(x) &= 2x_1^2 + 2x_2^2 + x_3^2 + 2x_1x_2 + 2x_1x_3 - \\ &- 8x_1 - 6x_2 - 4x_3 + 9 \rightarrow \min \\ &\text{referitor la :} \\ -x_1 - x_2 - 2x_3 &\geq -3. \end{aligned} \right\}$$

$$x^* = \left(\frac{4}{3} \ \frac{7}{9} \ \frac{4}{9}\right)^T, \quad f(x^*) = \frac{1}{9}$$

Exemplul 3. (Problema nr. 76 [9, p. 96]).

$$\left. \begin{aligned} f(x) &= x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + x_3^2 + \frac{1}{2}x_4^2 - x_1x_3 + x_3x_4 - \\ &- x_1 - 3x_2 + x_3 - x_4 \rightarrow \min \\ &\text{referitor la :} \\ -x_1 - 2x_2 - x_3 - x_4 &\geq -5, \\ -3x_1 - x_2 - 2x_3 + x_4 &\geq -4, \\ x_2 + 4x_3 &\geq \frac{3}{2}. \end{aligned} \right\}$$

$$x^* = (0.2727273 \ 2.090909 \ -0.26E-10 \ 0.5454545)^T,$$

$$f(x^*) = -4,6818181.$$

III. CONCLUZII

În această lucrare noi suntem interesați de rezolvarea numerică a problemelor de optimizare pătratică convexă cu restricții inegalități afine. De-a lungul anilor au fost propuse și ameliorate diferite metode de rezolvare (a se

vedea [1-6,10]). Procedura propusă constă în reducerea problemei de optimizare pătratică cu restricții inegalități afine la o problema echivalentă în variabile duale care are doar constrângeri simple. Sistemul Karush-Kuhn-Tucker pentru problema duală permite rezolvarea problemei de programare pătratică cu restricții simple în dimensiuni mari. Elementul principal îl constituie utilizarea funcțiilor de complementaritate $u(x)$ și $v(x)$ [4] cu ajutorul cărora se realizează reducerea problemei la un sistem în dimensiuni convenabile, care poate fi efectiv soluționat cu metoda Newton. Notăm că metoda propusă este efectivă în cazul rezolvării problemelor de programare pătratică convexă în dimensiuni mari în care numărul constângerilor este cu mult mai mic decât numărul variabilelor decizionale.

REFERENCES

- [1] N.I.M. Gould, Ph. L. Toint, A Quadratic Programming Bibliography. Numerical Analysis Group Internal Report 2000-1 Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, England, 2003. http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2001/02/285.html.
- [2] J.-B. Hiriart-Urruty, Optimisation et analyse convexe. Presses Universitaires de France. 1998.
- [3] Th. F Coleman., J. Liu, An interior Newton method for quadratic programming. Mathematical Programming, Ser. A85, 1999, pp.491-523.
- [4] V. Moraru, An Algorithm for Solving Quadratic Programming Problems. Computer Science Journal of Moldova, vol.5, No.2, 1997, pp.223-235.
- [5] M.C Bazaraa., C.M. Shetty, Nonlinear Programming. Theory and Algorithms. John Wiley&Sons, Inc. 1993.
- [6] V. Moraru., Dm. Stoian. Newton's Method for Solving Quadratic Programming Problems with Simple Constraints. 7th International Conference on Microelectronics and Computer Science, Chișinău, Republic of Moldova, September 22-24, 2011. pp.185-187.
- [7] M.C.Ferris, Ch. Kanzow, Complementary and related problems: A survey. 1998.
- [8] V. Moraru, A Smooth Newton Method for Nonlinear Programming Problems with Inequality Constraints. Computer Science Journal of Moldova, vol. 20, no. 2(56), 2011 (în curs de apariție).
- [9] W. Hock, K. Schittkowski, Test Examples for Nonlinear Programming Codes. Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Vol. 187, Springer-Verlag, Berlin / Heidelberg / New York, 1981.
- [10] N.I.M. Gould, Ph. L. Toint. A quadratic programming page. Quadratic programming codes. <http://www.numerical.rl.ac.uk/people/nimg/qp/qp.html>

Lucrarea este realizată în cadrul Proiectului bilateral România – Republica Moldova 2013-2014 ASDEC: Argumentarea structurilor pentru suportul deciziilor cu constrângeri normative.