Nelineárne optimalizačné modely a metódy

Téma prednášky č. 9

Kvadratické programovanie

Prof. Dr. Michal Fendek

Katedra operačného výskumu a ekonometrie

Ekonomická univerzita Bratislava

Dolnozemská 1

852 35 Bratislava

Kvadratické programovanie

Všeobecná formulcia úlohy kvadratického programovania je nasledovná:

$$f(x) = x^T Cx + p^T x \to \min$$

pri ohraničeniach

$$x \in D$$

kde:

n - počet rozhodovacích premenných úlohy,

x - vektor rozhodovacích premenných, $x \in R^n$,

C - symetrická kladne semidefinitná matica *n*-tého stupňa,

p - vektor, $p \in R^n$

***D* - konvexná polyedrálna množina v R^n, $D \in R^n$.**

Z teoretického i praktického hľadiska je postačujúce, ak pri skúmaní polyedrálnej množiny *D* zameriame svoju pozornosť na nasledovné tri typy poledrálnych množín *D*:

$$D_I = \{ x \mid Ax \le b, x \ge 0 \}$$

$$D_{II} = \{ x \mid Ax = b, x \ge 0 \}$$

$$D_{III} = \{ x \mid Ax = b \}$$

Kvadratické programovanie

• **Keďže sústava ohraničení úlohy kvadratického programovania je tvorená lineárnymi, a teda konvexnými funkciami a predpokladáme, že matica C je kladne semidefininá, a teda aj účelová funkcia úlohy je konvexná, tak úloha kvadratického programovania je úlohou konvexného programovania.**

• **Na riešenie tejto triedy úloh by teda bolo možné s úspechom využiť niektoré metódy pre riešenie úloh na viazaný extrém. Štruktúra úlohy, ktorej kvadratická účelová funkcia implikuje lineárnosť funkcií zložiek jej gradientu, a to**

$$\nabla f(x) = 2Cx + p$$

však umožňuje využiť túto vlastnosť úlohy pri konštrukcii algoritmov založených na určitých modifikáciách algoritmov simplexovej metódy pre riešenie úloh lineárneho programovania.

Poznámka

• Uvedená vlastnosť gradientu účelovej funkcie úlohy kvadratického programovania má ďalej za následok, že Kuhnove-Tuckerove podmienky optimálnosti riešenia sú tvorené sústavou lineárnych rovníc a nerovníc, čo otvára priestor pre určenie optimálneho riešenia úlohy na základe analýzy sústavy podmienok optimálnosti Kuhna-Tuckera.

• Vlastnosť konvexnosti funkcií úlohy (7.28) garantuje platnosť podmienok optimálnosti Kuhna-Tuckera nielen ako nutných, ale aj ako postačujúcich.

Podmienky optimálnosti Kuhna-Tuckera

Formulujme Kuhnove -Tuckerove podmienky optimálnosti pre úlohu kvadratického programovania so sústavou ohraničení v tvare *D*$_I$.

$$f(x) = x^T C x + p^T x \rightarrow \min$$

pri ohraničeniach **(7.28)**

$$\begin{aligned} Ax &\leq b \\ x &\geq 0 \end{aligned}$$

kde

A - matica sústavy ohraničení, $A=[a_{ij}]$ *i=1,...,m; j=1,...,n*

b - vektor pravej strany sústavy ohraničení, $b \in R^m$,

x - vektor rozhodovacích premenných, $x \in R^n$,

C - symetrická kladne semidefinitná matica *n*-tého stupňa,

p - vektor koeficientov, $p \in R^n$.

Ukážeme, ako na základe podmienok optimálnosti Kuhna-Tuckera možno určiť riešenie úlohy kvadratického programovania (7.28) na základe riešenia sústavy lineárnych rovníc a nerovníc. Lagrangeova funkcia pre úlohu (7.28) s multiplikátormi $u^1 \in R^m$, $u^2 \in R^n$ má tvar

$$L(x,u) = x^T Cx + p^T x + u_1^T (Ax - b) + u_2^T (-x)$$

Keďže rozhodovacie premenné úlohy sú nezáporné, tak v snahe vyhnúť sa povinnosti zohľadniť tieto premenné v samostatnej časti podmienok prostredníctvom vektora Lagrangeových multiplkátorov u_2, použijeme zovšeobecnenú Lagrangeovu funkciu v tvare

$$L(x,u) = x^T Cx + p^T x + u^T (Ax - b)$$

Podmienky optimálnosti Kuhna-Tuckera úlohy (7.28) majú pre zovšeobecnenú Lagrangeovu funkciu (7.29) nasledovný tvar

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial L}{\partial x} \geq 0 && \frac{\partial L}{\partial u} \leq 0 \\
&x\frac{\partial L}{\partial x} = 0 && u\frac{\partial L}{\partial u} = 0 \\
&x \geq 0 && u \geq 0
\end{aligned}
\qquad (7.30)
$$

Vypočítajme parciálne derivácie zovšeobecnenej Lagrangeovej funkcie (7.29) podľa vektorov premenných x, u. Dostaneme:

$$
\frac{\partial L}{\partial x} = 2\mathrm{Cx} + \mathrm{p} + \mathrm{A}^{\mathrm{T}}\mathrm{u}, \qquad \frac{\partial L}{\partial u} = \mathrm{Ax} - \mathrm{b} \qquad (7.31)
$$

Kvadratické programovanie

Po dosadení vzťahov (7.31) do vyjadrenia Kuhnových-Tuckerových podmienok optimálnosti (7.30) vyjadríme tieto nasledovne:

$$
\begin{array}{cc}
2Cx + p + A^T u \geq 0 & Ax - b \leq 0 \\
x^T (2Cx + p + A^T u) = 0 & u^T (Ax - b) = 0 \\
x \geq 0 & u \geq 0
\end{array}
\qquad (7.32)
$$

Vidíme, že vo vyjadrení Kuhnových-Tuckerových podmienok (7.32) sa opakujú výrazy parciálnych derivácií Lagrangeovej zovšeobecnenej funkcie. Zaveďme nové premenné

$$v \in R^n, \quad y \in R^m$$

a použime nasledovné substitúcie:

$$
\frac{\partial L}{\partial x} = 2Cx + p + A^T u = v, \qquad \frac{\partial L}{\partial u} = Ax - b = -y \qquad (7.33)
$$

Kvadratické programovanie

Po dosadení vzťahov (7.33) do Kuhnových-Tuckerových podmienok (7.32) dostávame ich nasledovné vyjadrenie:

$$
\begin{array}{ccc}
2Cx + p + A^T u = v \geq 0 & \qquad & Ax - b = - y \leq 0 \\
x_j v_j = 0 \quad pre\ j = 1, \ldots, n & & u_i y_i = 0 \quad pre\ i = 1, \ldots, m \\
x \geq 0 & & u \geq 0
\end{array}
\qquad (7.34)
$$

resp. vyjadrenie, ktoré budeme používať pri aplikácii výpočtových procedúr

$$-2Cx - A^T u + v \quad = p \qquad (7.35)$$

$$Ax \qquad + y \ = b \qquad (7.36)$$

$$x \geq 0,\ u \geq 0,\ u \geq 0,\ y \geq 0 \qquad (7.37)$$

$$x_j v_j = 0, \quad j=1,\ldots,n \qquad (7.38)$$

$$u_i y_i = 0, \quad i=1,\ldots,m \qquad (7.39)$$

Kvadratické programovanie

Vidíme, že konečný tvar Kuhnových-Tuckerových podmienok (7.35)...(7.39) sformulovaných pre úlohu (7.28) obsahuje ako podmienky lineárne (7.35), (7.36), (7.37), tak aj nelineárne (7.38), (7.39). Z podmienok (7.37), (7.39) vyplýva, že z každej dvojice premnných

$$(x_j, v_j), \text{ resp. } (u_i, y_i)$$

je *aspoň* jedna zložka nulová, a teda najviac $n+m$ premenných môže byť nenulových. Podmienky (7.35), (7.36) však tvoria sústavu $n+m$ rovníc o $2n+2m$ premenných, pričom hodnosť matice sústavy ohraničení je $n+m$.

• Ak nejaká sústava rovníc má nezáporné riešenie, potom má aj nezáporné bázické riešenie. Pri hľadaní bodu vyhovujúceho podmienkam optimálnosti Kuhna-Tuckera teda stačí skúmať nezáporné bázické riešenia sústavy rovníc (7.35), (7.36).

• Pre riešenie tejto úlohy potom možno využiť modifikáciu niektorého algoritmu simplexovej metódy. Na tomto princípe sú založené algoritmy na riešenie úloh kvadratického programovanie, ktoré publikovali napr. Wolfe, van de Panne, Shetty, Lemke.

• V konečnom dôsledku sú všetky založené na analýze podmienok optimálnosti Kuhna-Tuckera, ktoré možno vyjadriť na základe schémy uvedenej v tabuľke č.7.14:

Kvadratické programovanie

Ta.7.14: Kuhnove-Tuckerove podmienky optimálnosti

		x	u	v	y	
n {	v	-2C	$-A^T$	E		p
m {	y	A			E	b
		n	m	n	m	

Vychádzajúc zo štruktúry podmienok Kuhna-Tuckera uvedených v tabuľke č.7.14 môžeme určiť východiskové bázické riešenie sústavy rovníc (7.35), (7.36):

$$\mathbf{x} = \mathbf{0},\quad \mathbf{u} = \mathbf{0},\quad \mathbf{v} = \mathbf{p},\quad \mathbf{y} = \mathbf{b}.$$

Toto riešenie síce vyhovuje okrem podmienok (7.35), (7.36) aj podmienke (7.37), nemusí však vyhovovať podmienkam prípustnosti (7.38), (7.39):

$$\mathbf{x} \geq \mathbf{0},\quad \mathbf{u} \geq \mathbf{0},\quad \mathbf{v} \geq \mathbf{0},\quad \mathbf{y} \geq \mathbf{0}.$$

Ak by toto riešenie bolo prípustným riešením a platilo by

$$\mathbf{v} = \mathbf{p} \geq \mathbf{0},\quad \mathbf{y} = \mathbf{b} \geq \mathbf{0},$$

tak riešenie **x=0** by bolo optimálnym riešením zodpovedajúcej úlohy kvadratického programovania.

Shettyho-Lemkeho algoritmus pre riešenie úloh kvadratického programovania

Ako sme už spomenuli, metóda patrí medzi tzv. "simplexové algoritmy", ktoré sú založené na hľadaní bodu vyhovujúceho podmienkam optimálosti Kuhna-Tuckera. ďalej formulovaný algoritmus je určený pre riešenie úloh kvadratického programovania v tvare (7.28), t.j. pre úlohy so sústavou ohraničení v tvare D_I. Možno ho však pomerne jednoducho upraviť, a teda aj použiť pre riešenie úloh so sústavou ohraničení v tvare D_{II}, resp. D_{III}.

Inicializačná fáza

Skúmajme úlohu (7.29). Formulujme podmienky optimálnosti Kuhna-Tuckera v tvare (7.35)...(7.39) a do podmienok (7.35) a (7.36) zavedieme umelú premennú μ, pričom jej koeficienty tvoria vektory $\mathbf{q}\in R^n$, $\mathbf{t}\in R^m$ s koeficientami

$$q_j = \begin{cases} -1 & \text{ak} \quad p_j < 0 \\ 0 & \text{ak} \quad p_j \geq 0 \end{cases} \qquad t_i = \begin{cases} -1 & \text{ak} \quad b_i < 0 \\ 0 & \text{ak} \quad b_i \geq 0 \end{cases}$$

Kvadratické programovanie

Podmienky optimálnosti Kuhna-Tuckera formulujeme v tvare

$$\mathbf{-2Cx - A^Tu + v \quad + \ \mu q \ = p}$$

$$\mathbf{Ax \qquad\quad + y \ + \ \mu t \ = b}$$

$$\mathbf{x \geq 0,\ u \geq 0,\ u \geq 0,\ y \geq 0}$$

$$x_j v_j = 0, \quad j=1,\dots,n$$

$$u_i y_i = 0, \quad i=1,\dots,m$$

Riešením sústavy rovníc zodpvedajúcich podmienkam optimálnosti nájdeme riešenie úlohy. Podmienkam optimálnosti č.1 a č.2 zodpovedá simplexová tabuľka

	x	u	v	y	μ	
v	-2C	$-A^T$	E		q	p
y	A			E	t	b

a východiskové bázické riešenie

$$[\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\mu}] = [\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{p}, \mathbf{b}, 0]$$

Kvadratické programovanie

a) ak $v \geq 0$, $y \geq 0$, tak východiskové riešenie vyhovuje podmienkam optimálnosti a vektor $x=0$ je *optimálnym riešeném úlohy.* Algoritmus končí.

b) v opačnom prípade realizujeme elementárnu zmeny bázy, pričom:

- ako vedúci stĺpec vyberieme stĺpec zodpovedajúci umelej premenej μ,
- ako vedúci riadok vyberieme riadok zodpovedajúci minimálnemu prvku na pravej strane.

Pokračujeme výpočtovou fázou algoritmu.

Kvadratické programovanie

Výpočtová fáza

- **Zavedením umelej premennej μ medzi bázické premenné sa niektorá z premenných v_j, y_i stala nebázickou a získané bázické riešenie potom nespĺňa podmienky (7.35), (7.36).**
- **Aby sme získali riešenie vyhovujúce podmienkam (7.35) a (7.36), pokračujeme v simplexových transformáciách dovtedy, kým sa umelá premenná μ nestane nebázickou.**

- **Nezápornosť premených x,u,v,y garantuje kritérium prípustnosti riešenia pri priamom algoritme simplexovej metódy, ktoré sa používa pri voľbe vedúceho riadku na každej iterácii.**
- **Splnenie podmienky (7.37) docielime uplatnením nasledovného kritéria pre určenie vstupujúcej premenej na jednotlivých iteráciách:**

Ak z bázy vystúpil v predchádzajúcej (k-1)-ej iterácii vektor zodpovedajúci premennej v_j (resp. x_j), alebo y_i (resp. u_i), tak v aktuálnej k-tej iterácii vstúpi do bázy vektor zodpovedajúci premenej x_j (resp. v_j), alebo u_i (resp. y_i)

Poznámka

a) Dá sa ukázať, že po konečnom počte krokov algoritmus konverguje k optimálnemu riešeniu úlohy (7.28). Poznatok vyplýva z vlastnosti konvexnosti účelovej funkcie a funkcií sústavy ohraničení úlohy.

b) Poznamenajme ešte, že bázické riešenia na jednotlivých krokoch algoritmu nemusia byť prípustnými riešeniami úlohy (7.28).