УДК519.85

МЕТОД ШТРАФНЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ НА ПОЛИЭДРАЛЬНО-СФЕРИЧЕСКИХ КОМБИНАТОРНЫХ МНОЖЕСТВАХ

ПИЧУГИНА О.С., ЯКОВЛЕВ В.С.

Предлагается новый подход к решению задач оптимизации на вписанных в сферу евклидовых комбинаторных множествах, основанный на применении функциональных представлений дискретных множеств и выпуклых продолжений с них в $\square^{n}$ в методе штрафных функций.

Ключевые слова: комбинаторная оптимизация, евклидовое комбинаторное множество, выпуклое продолжение функций, непрерывное представление множеств, метод штрафных функций.

Key words: combinatorial optimization, the euclidean combinatorial set, a convex extension of functions, a continuous representation of sets, the penalty method.

Введение

Задачи дискретной оптимизации традиционно считаются сложными [1-4], поэтому точные методы имеют, как правило, теоретический интерес, в то время как многочисленные практические задачи, сводящиеся к дискретным, зачастую разрешимы лишь эвристически [5]. Задачи комбинаторной оптимизации как подкласс дискретных являются более перспективными, поскольку позволяют разрабатывать методы, учитывающие алгебро-топологическую структуру этих множеств и функций на них [6-8]. Особый интерес представляют подходы, основанные на применении к комбинаторным задачам методов непрерывной, в том числе выпуклой, оптимизации [2-3,9-16]. В них, в свою очередь, выделяются релаксационные методы, основанные на непрерывных переформулировках комбинаторных задач. Последние, как правило, предусматривают существенное увеличение размерности задачи. Известны также случаи, когда исходные комбинаторные задачи сводятся к оптимизации выпуклых функций, что дает возможность создания как эффективных приближенных алгоритмов, так и точных методов типа ветвей и границ, использующих для оценок выпуклые релаксации.

В данной статье рассматривается именно такой класс задач оптимизации на вписанных в сферу евклидовых комбинаторных множествах (далее <u>полиэдрально-сферических множествах</u>), позволяющих непрерывные постановки с выпуклыми целевыми функциями в пространстве исходной размерности.

Цель исследования – разработка непрерывного подхода к решению задач оптимизации на полиэдрально-сферических множествах, основанного на использовании их аналитических непрерывных представлений и продолжений целевых функций с них в надмножества $\square^{n}$, включая выпуклые продолжения [17-19].

Основные задания:

1. Ввести понятия и дать классификацию функциональных представлений евклидовых комбинаторных множеств и продолжений функций с них.

2. Для безусловных задач комбинаторной оптимизации на полиэдрально-сферических ЕКМ представить эквивалентные непрерывные формулировки в терминах строгих функциональных представлений допустимой области.

3. Обосновать возможность построения выпуклых, дифференцируемых и строгих продолжений целевой функции с полиэдрально-сферических множеств в их выпуклые надмножества и целесообразности их использования в оптимизационном методе.

4. Провести сравнительный анализ различных способов выпуклых продолжений штрафных функций.

5. Описать и обосновать метод решения задач оптимизации на полиэдрально-сферических множествах с использованием метода штрафных функций.

Оптимизационные задачи на полиэдрально-сферических комбинаторных множествах охватывает широкий класс задач евклидовой комбинаторной оптимизации [6,7], как безусловных и условных, к ним сводящихся. Это задачи оптимизации на общем множестве перестановок [4,6,7,20], множестве B_n n-мерных булевых векторов [10,13-16], отдельных классах размещений и сочетаний [7], а также на их подмножествах, декартовых произведениях и некоторых других композиционных образах [21]. Примером являются множество полиперестановок [7,21], такие подмножества B_n как [22]:

$$B_n(k)=\left\{x:\sum_{i=1}^{n}x_i=k\right\} \text{ и } B_n(0,k)=\left\{x:\sum_{i=1}^{n}x_i\le k\right\}.$$

Итак, рассматриваемый класс задач охватывает безусловные булевые задачи, известные разнообразием применений и множеством методов решения [3,14-16,22-25,27]. Перечислим некоторые задачи на подмножествах B_n. На $B_n(k)$ формулируются: задача бисекции графа [0] (the graph bisection problem); задача о наиболее плотном k-подграфе (the densest k-subgraph problem) [23], обобщающая задачу о k-кластерах (k-cluster problem) [220] и целый ряд классических задач теории графов, таких как задача о максимальной клике [1]. Еще одним широко использующимся подмножеством B_n является множество перестановочных матриц [24], оптимизационные задачи на котором включают линейную и квадратичную задачи о назначениях [25] и множество других задач. Задачи на перестановочных матрицах зачастую позволяют упрощенную формулировку на перестановочном множестве E_n [4,6], которое также относится к классу полиэдрально-сферических.

1. Постановка задачи и необходимые определения

Рассмотрим безусловную задачу на полиэдрально-сферическом множестве:

$$z^* = \min_E f(x), \; x^* = \arg\min_E f(x), \tag{1}$$

$$E = P \cap S_r(a), \tag{2}$$

где

$$P=\operatorname{conv} E=\left\{x \in \mathbb{R}^n : \; Ax \le b\right\} \text{ – многогранник,} \tag{3}$$

$$S_r(a) = \left\{x \in \mathbb{R}^n : (x-a)^2 = r^2\right\} \text{ – сфера.} \tag{4}$$

Условия (2), (3) означают, что E – вершинно расположено:

$$E = \operatorname{vert} P \tag{5}$$

и конечно. Будем также считать, что E – не вырожденное в точку множество, т.е.

$$1<N=|E| < \infty . \tag{6}$$

Напомним, что евклидовым комбинаторным множеством (ЕКМ) [8] называется произвольный числовой набор объектов комбинаторной природы, элементы которого отличаются составом либо порядком следования элементов. Иначе говоря, ЕКМ – это комбинаторное множество, позволяющее погружение в $\mathbb{R}^n$, при этом полученный образ также является ЕКМ [7].

Итак, поставленная задача (1)-(2) – безусловная задача на конечном полиэдрально-сферическом евклидовом комбинаторном множестве.

Функциональным назовем представление множества E при помощи функциональных зависимостей вида:

$$f_j(x) = 0, \; j \in J_{m'}, \tag{7}$$

$$f_j(x) \le 0, \; j \in J_m \setminus J_{m'}, \tag{8}$$

где $J_m = \{1,...,m\}$.

В обозначениях $m = m' + m''$ представление (7)-(8) назовем:

– строгим представлением E в случае $m = m'$,

иначе – нестрогим;

– непрерывным представлением E, если

$$f_j(x), \; j \in J_m \text{ – непрерывные;} \tag{9}$$

– выпуклым представлением E, когда

$f_j(x), \; j \in J_m$ – выпуклые

на некотором выпуклом множестве, содержащем E.

Так, система (3), (4) задает непрерывное, нестрогое, выпуклое функциональное представление E, называемое, в силу (2), полиэдрально-сферическим.

Предположим, что для E известно также строгое представление, т.е. система (7), (8) приобретает вид:

$$f_j(x) = 0, \; j \in J_m . \tag{10}$$

Продолжением функции $f(x)$ с E в $E' \supseteq E$ называется функция $F(x)$, определенная на E' и совпадающая с $f(x)$ на E:

$$F(x) \underset{E}{=} f(x). \tag{11}$$

В зависимости от типа функции $F(x)$ такие продолжения могут быть непрерывными, выпуклыми, дифференцируемыми и т.п.

Продолжение функции $f(x)$ с E в $E' \supseteq E$ называется строгим, если

$$F(x) = f(x) \Leftrightarrow x \in E . \tag{12}$$

Продолжение функции $f(x)$ с в $\mathbb{R}^n$ называется ее продолжением с E или просто продолжением $f(x)$.

2. Анализ литературных данных

Основные направления современной комбинаторной оптимизации условно делятся на:

– комбинаторные методы, такие как методы ветвей и границ, отсечений, ветвей и отсечений, эвристики [1-3,5,16];

– непрерывные методы, среди которых выделяются [2,3,26]:

релаксационные подходы, в том числе основанные на полу-определенных релаксациях [22];

подходы, использующие эквивалентные непрерывные переформулировки исходной дискретной задачи [26].

Все эти методы используют в большей или меньшей степени свойства конкретного комбинаторного множества и функций, например, вогнутых и выпуклых, на нем.

Остановимся далее на непрерывных подходах, для применения которых комбинаторное множество должно быть представимо в непрерывных переменных. Как правило, при этой трансформации размерность пространства увеличивается [3,16,22,26]. Наличие же функционального представления (7)-(8) допустимого множества означает возможность непрерывной постановки комбинаторной задачи в исходном пространстве и открывает перспективы создания новых методов ее решения.

Так, в булевой оптимизации широко применяется следующий вид булевых множеств $B_n = \{0,1\}^n$ [10, 14-15,26], $B_n^{'} = \{-1,1\}^n$ [10,22,27]:

$$B_n = \left\{ x \in \mathbb{R}^n : f_i(x) = x_i^2 - x_i = 0,\ i \in J_n \right\}, \tag{13}$$

$$B_n^{'} = \left\{ x \in \mathbb{R}^n :\ f_j(x) = x_j^2 - 1 = 0,\ j \in J_n \right\}. \tag{14}$$

В нашей терминологии (13),(14) – строгие функциональные представления (10) булевых множеств, где $m = n$. Поэтому множества $B_n, B_n^{'}$ в виде представлений (13),(14) выбраны для иллюстрации излагаемого материала и примеров.

Отличительной особенностью вершинно расположенных множеств вообще и полиэдрально-сферических в частности является возможность формирования выпуклых, вогнутых и дифференцируемых продолжений с них [17], что находит применение как в непрерывных, так и в комбинаторных методах.

Например, для безусловной булевой задачи

$$f(x) \underset{B_n}{\rightarrow} \min,\ f(x) \in C^2(\mathbb{R}^n), \tag{15}$$

применимы следующие непрерывные методы, использующие непрерывные функциональные представления множества B_n и продолжений с него:

– вогнутое программирование, при котором функциональное представление (13) аккумулируется в одно ограничение, в результате чего (15) сводится к минимизации вогнутого продолжения $f(x)$ на единичном гиперкубе [26];

– методы штрафных функций, в которых используется представление (13) и, с его помощью, задача (15) сводится к серии выпуклых задач оптимизации квадратичной штрафной функции, являющейся выпуклым продолжением сглаживания $f(x)$ [14-15].

– полиэдрально-сферический метод [11], основанный на использовании представлений (2),(13) и сводящий (15) к серии задач минимизации выпуклого продолжения $f(x)$ на единичных гиперкубах и сферах различной размерности.

3. Мотивация к методу. Примеры

Рассматриваемые полиэдрально-сферические ЕКМ обладают важными особенностями, положенными в основу предлагаемого метода решения (1), (2) (см. п.3.4). А именно, это существование строгих функциональных представлений, а также возможность построения как выпуклых, так и строгих их продолжений. Кратко обоснуем это.

Существование строгих представлений множеств типа (2) показано на примере $B_n, B_n^{'}$ (см. (13)-(14)). Для произвольного такого множества также может быть найдено представление $E = S \cap S_r(a)$, где S – сглаживающая поверхность многогранника (3) выпуклая поверхность, вписанная в $S_r(a)$: $E \subset S$. В рамках данной статьи задача построения строгих представлений не ставится. Предполагается, что она уже решена и (10) известно.

Существование выпуклых продолжений $f(x)$ с E в произвольное выпуклое его надмножество основано на следующих фактах: вписанность конечного множества E в сферу означает выполнение условия (5), а, как известно [17], для произвольной функции, определенной на таком множестве, существует выпуклое дифференцируемое продолжение с E.

Поэтому далее полагаем, что $f(x)$ – выпукла:

$$f(x) \in C^1(\mathbb{R}^n), \tag{16}$$

иначе переходим к рассмотрению ее выпуклого дифференцируемого продолжения [17].

Замечание 1. Если целевая функция (1):

$$f(x) \in C^2\left(\mathbb{R}^n\right), \tag{17}$$

то, согласно [19], существует ее продолжение вида:

$$F(x) = f(x) + M((x-a)^2 - r^2), \tag{18}$$

$$F(x) \in C^2\left(\mathbb{R}^n\right) \tag{19}$$

с E в произвольный компакт $E' \supset E$.

Будем полагать далее, что (17), выполнено.

Если к тому же выполнено

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \cdot \partial x_j} < \infty,\ i,j \in J_n, \tag{20}$$

то существует продолжение вида (18)-(19) функции $f(x)$ с E в $\mathbb{R}^n$.

Покажем, что существуют также строгие продолжения $f(x)$ с множества E. Построим их при помощи строгого представления (10) этого множества, которое, по предположению, известно.

Выберем произвольный вектор $\bar{\lambda} = (\lambda_i)_{i \in J_m} > 0$ и построим функцию вида:

$$F'(x, \bar{\lambda}) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i^2(x). \tag{21}$$

Нетрудно видеть, что (21) – продолжение $f(x)$. К тому же, в соответствии с определением строгого представления: $x \in E \Leftrightarrow \left\{ f_i(x) = 0 \right\}_{i \in J_m}$. А это означает:

$$x \in E \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i^2(x) = 0 \Leftrightarrow F'(x,\bar{\lambda}) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i^2(x).$$

Следовательно, для $F'(x,\bar{\lambda})$ выполнено (12), таким образом, (21) – строгое продолжение $f(x)$ с E.

Не ограничивая общности, можно считать, что составляющие строгого представления (10) – дифференцируемые:

$$f_j(x) \in C(\mathbb{R}^n),\ j \in J_m, \qquad (22)$$

иначе переходим к рассмотрению их дифференцируемых продолжений с E.

В совокупности допущения (16),(22) обосновывают существование дифференцируемых (а в случае (17) и дважды непрерывно-дифференцируемых) строгих продолжений $f(x)$.

Итак, показано, что для произвольного полиэдрально-сферического конечного множества существуют строгие функциональные представления. К тому же для любой целевой функции (1), заданной на E, существуют строгие, выпуклые, дифференцируемые (а при выполнении (17) – дважды непрерывно-дифференцируемые) продолжения с E. А это, в свою очередь, обосновывает возможность применения к ним непрерывной, а в отдельных случаях и выпуклой, оптимизации в исходном пространстве.

3.1. Непрерывные формулировки исходной задачи

Приведем некоторые непрерывные постановки задачи (1),(2),(10):

1) Первая непрерывная формулировка этой задачи состоит в использовании полиэдрально-сферического представления (2)-(4) и замены условия дискретности $x \in E$ условиями принадлежности континуальным множествам (3) ($x \in P$) и (4) ($x \in S_r(a)$).

2) Еще одна непрерывная постановка в виде условной нелинейной задачи состоит в применении строгого представления E и замене в (1) условия $x \in E$ на (10) (нелинейность системы объясняется тем, что линейная система задавала бы выпуклое множество, что противоречит дискретности и невырожденности (6)).

3) Наконец, условия (10) могут быть интегрированы в функцию Лагранжа, в результате чего исходная задача эквивалентно формулируется как безусловная задача ее минимизации:

$$\phi(x,\bar{\lambda}) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(x) \to \min. \qquad (23)$$

При этом новая целевая функция по-прежнему непрерывно-дифференцируема в силу (16),(22). Задача (23) решается в пространстве $\mathbb{R}^{n+m}$.

4) Следующая эквивалентная непрерывная формулировка задачи (1),(2) основана на использовании строгого функционального представления в штрафных функциях (10). Например, для квадратичной штрафной функции она выглядит следующим образом:

$$\varphi(x,\lambda) = f(x) + \lambda \sum_{i=1}^{m} f_i^2(x) \underset{\lambda\to\infty}{\to} \min, \qquad (24)$$

где $\lambda > 0$ – штрафной множитель.

Эквивалентность задач (1),(2) и (24) основана на следующих свойствах:

1. $\forall x \in R^n, \lambda > 0\ \varphi(x,\lambda) \ge f(x)$;

2. $\forall \lambda > 0\ \varphi(x,\lambda) = f(x) \Leftrightarrow x \in E$, т.е. (24) – строгое продолжение функции $f(x)$. Оно является частным случаем (21) при $\bar{\lambda} = \lambda e,\ \lambda \in R^+$;

3. $$\arg\min_{\lambda\to\infty} \varphi(x,\lambda) \in E. \qquad (25)$$

В совокупности с предположениями (17) и (22) получаем, что $\varphi(x,\lambda) \in C^2(\mathbb{R}^n)$, т.е. (1),(2),(17),(22) эквивалентна задаче оптимизации (24) дважды непрерывно-дифференцируемой $\varphi(x,\lambda)$.

Функции (23), (24) могут комбинироваться следующим образом

$$\chi(x,\bar{\lambda},\lambda) = f(x) + \lambda \sum_{i=1}^{m} f_i^2(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(x) \underset{\lambda\to\infty}{\to} \min. \qquad (26)$$

Задача (26) может быть решена модифицированным методом множителей Лагранжа [13], который в среднем дает быстрее численное решение исходной задачи по сравнению с методом штрафных функций и одновременно позволяет оценить вектор множителей Лагранжа (28) $\bar{\lambda} = (\lambda_i)_{i \in J_m}$.

Заметим также, что (23)-(26) – задачи оптимизации продолжений $f(x)$ с E, при этом для функций (17) продолжения (23), (26) – непрерывно-дифференцируемые, а (24) – дважды непрерывно-дифференцируемое.

Для иллюстрации здесь и далее выбран класс безусловных булевых задач (the Unconstrained Boolean Problem, UBP):

$$f(x) \underset{B_n'}{\to} \min, \qquad (27)$$

с булевым множеством $E = B_n'$, строгое представление (10) которого имеет вид (14).

Пример 1. Эквивалентные по отношению к (27) задачи (23), (24) имеют, соответственно, вид:

$$\phi\left(x,\bar{\lambda}\right)=f\left(x\right)+\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left(x_i^2-1\right)\to\min, \qquad (28)$$

$$\varphi\left(x,\lambda\right)=f\left(x\right)+\lambda\sum_{i=1}^{n}\left(x_i^2-1\right)^2 \underset{\lambda\to\infty}{\to} \min. \qquad (29)$$

Введем обозначение для штрафного слагаемого

$$\psi\left(x\right)=\sum_{i=1}^{m}f_i^2\left(x\right), \qquad (30)$$

тогда (24) перепишется так:

$$\varphi\left(x,\lambda\right)=f\left(x\right)+\lambda\cdot\psi\left(x\right)\underset{\lambda\to\infty}{\to}\min. \qquad (31)$$

Пример 2. Для задачи (27), учитывая (14), штрафное слагаемое (30) приобретает вид:

$$\psi\left(x\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(x_i^2-1\right)^2. \qquad (32)$$

3.2. Мотивация к использованию выпуклых продолжений

Были предприняты небезуспешные попытки применения метода штрафных функций для решения задач дискретной, в частности булевой, оптимизации [14,15]. Основной проблемой, с которой сталкиваются при этом исследователи, – это большое (порой сравнимое с N) число локальных минимумов (32) [14]. Теоретически все точки E становятся точками локального минимума $\varphi\left(x,\lambda\right)$ при больших λ, так как штрафная часть обнуляется только на E, а значение исходной функции (1) становится несущественным по сравнению с $\lambda\cdot\psi\left(x\right)$. Это объясняется невыпуклостью штрафного слагаемого (30) даже для выпуклых строгих представлений множеств.

Так, для $B_n^{'}$ (см. (14)) $f_i\left(x\right)=x_i^2-1$ – выпукла и при этом $f_i\left(x\right)<0,\ x\in\left(-1,1\right)$, поэтому $f_i^2\left(x\right)=\left(x_i^2-1\right)^2$ не является выпуклой ($i\in J_n$).

Обобщим это наблюдение в следующем утверждении.

Утверждение. Если E – дискретное множество вида (6) со строгим представлением (10), тогда штрафное слагаемое (30) – невыпукло.

Доказательство от противного. Предположим, (30) – выпуклая, т.е.

$$\begin{aligned}&\forall x^1,x^2\in R^n\ \forall\lambda\in\left[0,1\right],\ \psi\left(\lambda\cdot x^1+\left(1-\lambda\right)\cdot x^2\right)\le\\&\le\lambda\cdot\psi\left(x^1\right)+\left(1-\lambda\right)\cdot\psi\left(x^2\right).\end{aligned} \qquad (33)$$

Выберем две различные точки E :

$$x^1,x^2\in E,\ x^1\ne x^2, \qquad (34)$$

что возможно в силу (6), и рассмотрим (30) на интервале $\left(x^1,x^2\right)$: $x'=\lambda\cdot x^1+\left(1-\lambda\right)\cdot x^2,\ \lambda\in\left(0,1\right)$.

Исходя из (30),

– с одной стороны, $\forall x\in R^n:\ \psi\left(x\right)\ge0$,

– с другой стороны, поскольку выполнено (10) и, в частности, $\forall j\in J_m$ $f_j(x^1)=f_j(x^2)=0$, то $\psi\left(x^1\right)=\psi\left(x^2\right)=0$.

Если наше предположение верно, в силу (33),

$$\begin{aligned}&\forall\lambda\in\left(0,1\right),\ 0\le\psi\left(x'\right)\le\lambda\cdot0+\left(1-\lambda\right)\cdot0=0\Rightarrow\psi\left(x'\right)=0\Rightarrow\\&\Rightarrow f_j(x')=0,\ j\in J_m\Rightarrow x'\in E,\end{aligned} \qquad (35)$$

так как по условию (10) – строгое функциональное представление E.

Учитывая произвольность выбора $x^1,x^2\in E$ и объединяя (35) с (33), получаем: $\forall x^1,x^2\in E\ [x^1,x^2]\in E$, что, очевидно, нарушает (6). Полученное противоречие доказывает утверждение.

Однако известно (см. п.3), что для произвольной функции, в том числе для штрафной функции (31), для заданного λ существует выпуклое продолжение. Как было показано, преимуществом использования, вместо $f(x)$, продолжения с E, представляющего собой:

– штрафную функцию, является ею достижение минимума в точке E (см. (25));

– выпуклую функцию – одноэкстремальность и возможность оценить снизу z^* в (1).

Исследуем возможности совместного использования штрафных функций и выпуклых продолжений исходной целевой функции для решения поставленной задачи (1).

Обозначим через $F\left(x,\bullet\right)$ – выпуклое продолжение $f(x)$ ($F\left(x,\bullet\right)\underset{E}{=}f(x)$, $F\left(x,\bullet\right)$ – выпукла); $\Phi\left(x,\lambda,\bullet\right)$ – выпуклое продолжение штрафной функции $\varphi(x,\lambda)$.

Существование выпуклых продолжений функции $f(x)$ было обосновано в п. 3, а поскольку $\Phi\left(x,\lambda,\bullet\right)$ – выпукла и одновременно является продолжением $f(x)$, то она также существует.

Заметим, что с дискретных множеств выпуклое продолжение определено далеко неоднозначно. Рассмотрим два способа построения $\Phi\left(x,\lambda,\bullet\right)$: а) при помощи выпуклого продолжения (30); б) за счет выпуклого продолжения функции (31) в целом. Сравним два эти подхода.

3.3. Различные способы построения выпуклых продолжений функции $\varphi(x,\lambda)$

Способ 1. Построение $\Phi(x,\lambda,\bullet)=\Phi(x,\lambda)$ за счет выпуклого продолжения штрафной функции

По условию первое слагаемое в (31) – выпукло, а второе – невыпукло по утверждению. Следовательно, для построения $\Phi(x,\lambda)$ достаточно построить выпуклое продолжение $\Psi(x)$ функции $\psi(x)$:

$$\Phi(x,\lambda)=f(x)+\lambda\cdot\Psi(x). \qquad (36)$$

Пример 3. Для $E=B_n^{'}$ построим одно из возможных выпуклых продолжений функции (32), используя функциональное представление (14), в частности, производя для невыпуклых слагаемых замену $x_i^2=1$ $(\forall i\in J_n)$:

$$\psi(x)=\sum_{i=1}^{n}\left(x_i^2-1\right)^2=\sum_{i=1}^{n}\left(x_i^4-2\cdot x_i^2+1\right)=\sum_{i=1}^{n}x_i^4-$$
$$-2\cdot\sum_{i=1}^{n}x_i^2+n\underset{B_n^{'}}{=}\sum_{i=1}^{n}x_i^4-2\cdot\sum_{i=1}^{n}1+n=\sum_{i=1}^{n}x_i^4-n. \qquad (37)$$

Правая часть (37) – выпуклая, т.е. является выпуклым продолжением функции (32):

$$\Psi(x)=\sum_{i=1}^{n}x_i^4-n\,. \qquad (38)$$

Сравним исходную и полученную функции. Функция (32):

– достигает минимума только в точках E:

$$\min_{\mathbb{R}^n}\psi(x)=0,\ \ \operatorname{Arg}\min_{\mathbb{R}^n}\psi(x)=E\,,$$

где $\forall M\subseteq R^n$ $\operatorname{Arg}\min_{M}f(x)=\left\{x'\in M: f(x')=\min_{M}f(x)\right\}$;

– принимает значение n:

в пределах P – в начале координат (при этом O – точка локального максимума);

вне P – в остальных точках множества размещений с повторениями [7,10] $E'=\overline{E}_3^2(G)$, $G=\left\{-\sqrt{2},0,\sqrt{2}\right\}^n$:

$$n=\psi(x)=\sum_{i=1}^{n}\left(x_i^2-1\right)^2=\sum_{i=1}^{n}x_i^4-2\cdot\sum_{i=1}^{n}x_i^2+n\,;$$

$$0=\sum_{i=1}^{n}x_i^4-2\cdot\sum_{i=1}^{n}x_i^2=\sum_{i=1}^{n}x_i^2\cdot\left(x_i^2-2\right)\Leftrightarrow x\in\left\{0,\pm\sqrt{2}\right\}^n.$$

Функция (38):

– достигает минимума в начале координат:

$$\min_{\mathbb{R}^n}\Psi(x)=-n,\ \ \operatorname{Arg}\min_{\mathbb{R}^n}\Psi(x)=O\,;$$

· принимает значение 0, помимо E, на целой поверхности четвертого порядка:

$$S=\left\{x\in R^n:\sum_{i=1}^{n}x_i^4=n\right\} \qquad (39)$$

($0=\Psi(x)=\sum_{i=1}^{n}x_i^4-n\Leftrightarrow x\in S\supset E$).

Замечание 2. Итак, функция (39) – выпукла, хотя и достигает своего минимума вне E. С ее помощью выпуклое продолжение (36) штрафной функции (31) приобретает вид:

$$\Phi(x,\lambda)=f(x)+\lambda\cdot\Psi(x)=f(x)+\lambda\cdot\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^4-n\right). \qquad (40)$$

Отсюда видно, что в $\Phi(x,\lambda)$ штраф накладывается только за выход за пределы выпуклого тела

$$C=\operatorname{conv}S\,, \qquad (41)$$

ограниченного поверхностью (39), что является существенной релаксацией по отношению к штрафу за выход с поверхностей (10), заложенный в (30)-(31).

Тот недостаток (38), что $\min_{E}\Psi(x)\neq\min_{\mathbb{R}^n}\Psi(x)$, а именно $\min_{\mathbb{R}^n}\Psi(x)<\min_{E}\Psi(x)$, легко снимается переходом от $\Psi(x)$ к выпуклому продолжению функции $\psi(x)$ вида:

$$\Psi'(x)=\max\left(\Psi(x),0\right) \qquad (42)$$

и, соответственно, от (40) к

$$\Phi'(x,\lambda)=f(x)+\lambda\cdot\Psi'(x)=f(x)+\lambda\cdot\max\left(0,\sum_{i=1}^{n}x_i^4-n\right).$$

В терминах (41), (42) переписывается в виде:

$$\Psi'(x)=\begin{cases}0,\ x\in C,\\ \sum_{i=1}^{n}x_i^4\text{-}n,\ x\notin C.\end{cases}$$

Соответственно, мы имеем два случая: если решение безусловной задачи:

1) внутренняя точка C, в том числе P:

$$x^{**}=\arg\min_{\mathbb{R}^n}\ f(x)\in C\ \Rightarrow\max\left(0,\sum_{i=1}^{n}x^{**4}_{\ i}-n\right)=0, \qquad (43)$$

то задача минимизации $\Phi'(x,\lambda)$ фактически сводится к поиску x^{**}, т.е. к решению релаксационной по отношению к (1)-(2) задачи на $C\supset E$ вместо E;

2) если x^{**} – внешняя точка C, то $\sum_{i=1}^{n} x_i^{**4} - n > 0$ и в результате применения метода штрафных функций для $\Phi'(x,\lambda)$ мы получим $x' \in S$, т.е. опять же решим лишь релаксационную по отношению к (1)-(2) задачу.

Как видно, использование выпуклого продолжения для штрафного слагаемого нецелесообразно, поскольку приводит к оптимизации функции, достигающей минимума вне E, и снимает главное требование, заложенное в нем, – принадлежность E.

Способ 2. Построение $\Phi(x,\lambda,\mu(\lambda))$ за счет выпуклого продолжения исходной целевой функции.

Естественным образом мы пришли к идее использования выпуклого продолжения функции (31) за счет выпуклого продолжения функции $f(x)$ при неизменном штрафном слагаемом:

$$\varphi(x,\lambda) \to \Phi(x,\lambda,\mu(\lambda)) = F(x,\mu(\lambda)) + \lambda \cdot \psi(x),$$

$$F(x,\mu(\lambda)) = f(x) + \mu(\lambda) \cdot \gamma(x): \tag{44}$$

а) $F(x,\mu(\lambda))$ – выпуклое продолжение $f(x)$, обеспечивающее выпуклость $\Phi(x,\lambda,\mu(\lambda))$ для заданного λ,

в) $\gamma(x)$ – корректирующая функция. Так, для рассматриваемых нами полиэдрально-сферических множеств корректирующая функция имеет вид:

$$\gamma(x) = \mu(\lambda) \cdot \left((x-a)^2 - r^2\right), \tag{45}$$

соответственно,

$$\Phi(x,\lambda,\mu(\lambda)) = f(x) + \mu(\lambda) \cdot \left((x-a)^2 - r^2\right) + \lambda \cdot \psi(x) \tag{46}$$

выпукла.

Перепишем (46) в виде:

$$\Phi(x,\lambda,\mu(\lambda)) = \tilde{f}(x,\lambda) + \mu(\lambda) \cdot \left((x-a)^2 - r^2\right), \tag{47}$$

где $$\tilde{f}(x,\lambda) = f(x) + \lambda \cdot \sum_{i=1}^{m} f_i^2(x). \tag{48}$$

Функция (49) имеет свойства, аналогичные $f(x)$ (кроме выпуклости):

– если (17) выполнено, то, в силу (22),

$$\forall |\lambda| < \infty : \tilde{f}(x,\lambda) \in C^2(\mathbb{R}^n); \tag{49}$$

– если выполнено (20) и

$$\frac{\partial f_j(x)}{\partial x_i} < \infty, \ i \in J_n, \ j \in J_m,$$

то $$\frac{\partial^2 \tilde{f}(x,\lambda)}{\partial x_i \cdot \partial x_j} < \infty, \ i,j \in J_n. \tag{50}$$

Соответственно, согласно [18], при выполнении (49) существует выпуклое продолжение $\tilde{f}(x,\lambda)$ в форме (48) на любой компакт $E' \supset E$. Если к тому же выполнено (50), такое продолжение существует с E в $\mathbb{R}^n$. Более того, существует целое семейство таких продолжений:

$$\forall \lambda^* \in \mathbb{R} \ \exists M(\lambda^*) = g\left(\frac{\partial^2 \tilde{f}(x,\lambda^*)}{\partial x_i \cdot \partial x_j}\right)_{i,j \in J_n} \geq 0:$$

$\forall \ \mu(\lambda) \geq M(\lambda^*)$ функция (47) – выпукла.

В то же время, поскольку $\mu(\lambda) \geq 0$, то в (47)-(48) только составляющая $\lambda \cdot \sum_{i=1}^{m} f_i^2(x)$ невыпукла, откуда

$$\forall \lambda \leq \lambda^* \ \ \Phi(x,\lambda,M(\lambda^*)) = \tilde{f}(x,\lambda) + M(\lambda^*) \cdot \left((x-a)^2 - r^2\right)$$

будет выпуклой.

Замечание 3. Для определения $M(\lambda^*)$ могут быть применены оценки, приведенные в [18]. Также могут быть использованы свойства конкретной функции (30).

Так, для B_n' (45) корректирующая функция имеет вид $\gamma(x) = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n$, соответственно (47) может быть преобразована так: $\Phi(x,\lambda^*,M(\lambda^*)) =$

$$= f(x) + M(\lambda^*) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\right) + \lambda^* \cdot \sum_{i=1}^{n} \left(x_i^2 - 1\right)^2 =$$

$$= f(x) + M(\lambda^*) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\right) + \lambda^* \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^4 - 2\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + n\right) =$$

$$= f(x) + \lambda^* \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^4 + \left(M(\lambda^*) - 2\lambda^*\right)\sum_{i=1}^{n} x_i^2 +$$

$$+ \left(M(\lambda^*) - 2\lambda^*\right) n.$$

Отсюда видно, что для UBP (27) достаточно выбрать $M(\lambda^*) = 2 \cdot \lambda^*$.

Главное отличие в сформированных выпуклых продолжениях $\varphi(x,\lambda)$ и, соответственно, $f(x)$ состоит в том, что первое (36) является выпуклым продолжением штрафной функции $f(x)$, в то время как второе

$$\Phi\left(x,\lambda,\mu\left(\lambda^*\right)\right)=f(x)+\mu\left(\lambda^*\right)\cdot\left((x-a)^2-r^2\right)+\lambda\cdot\psi(x)$$

– это штрафная функция выпуклого продолжения $f(x)$.

3.4. Описание метода

Зафиксируем произвольное, сколь угодно большое $\lambda^*>0$ и определим $M\left(\lambda^*\right)$ (см. замечание 3). Исходная задача будет эквивалентна задаче оптимизации штрафной функции:

$$\Phi\left(x,\lambda,M\left(\lambda^*\right)\right)=f(x)+M\left(\lambda^*\right)\cdot\left((x-a)^2-r^2\right)+$$
$$+\lambda\cdot\sum_{i=1}^{m}f_i^2(x)\underset{\lambda\to\infty}{\to}\min. \qquad (51)$$

Применим метод штрафных функций к $\Phi\left(x,\lambda,M\left(\lambda^*\right)\right)$ для последовательности штрафных параметров $\lambda\in\Lambda$:

$$\Lambda=\left\{\lambda^k\right\}_k\ge 0:\ \lambda^0=0,\ \lambda^{k-1}<\lambda^k,\ k\in\mathbb{N}.$$

Обозначим z^l, z^u нижнюю и верхнюю оценки z^* (см.(1)), соответственно.

Для получения z^l используем тот факт, что $\forall\lambda^k\le\lambda^*$ $\Phi\left(x,\lambda^k,M\left(\lambda^*\right)\right)$ – выпукла и решение x^k задачи (51) дает нижнюю оценку целевой функции:

$$z^l\ge\max_{\lambda^k\le\lambda^*}\Phi\left(x^k,\lambda^k,M\left(\lambda^*\right)\right). \qquad (52)$$

Обозначим через y^k – проекцию x^k на E ($y^k=\Pr_E x^k$) или результат комбинаторного округления x_k до элемента E ($y^k=\left[x^k\right]_E$) [4], тогда верхняя оценка:

$$z^u\le\min_{\lambda^k\in\Lambda}f\left(y^k\right). \qquad (53)$$

Замечание 4. Для полиэдрально-сферических множеств, рассматриваемых нами, квадратичная задача поиска проекции эквивалентна линейной задаче, которая и для многих ЕКМ решается в явном виде [7] или, по крайней мере, эффективно (такие множества называются хорошо описанными [28]).

Пример 4. Для B_n' все множество проекций на него:

$$Y^k=\left\{y^k=\Pr_E x^k\right\}=\begin{cases}-1,\ \text{если } x_i^k<0,\\ \pm1,\ \text{если } x_i^k=0,\ (i\in J_n).\\ 1,\ \text{если } x_i^k>0,\end{cases}$$

В зависимости от того, удовлетворяет ли нас точность достигнутого решения, процесс можно завершить либо повторить для большего λ^*.

Замечание 5. Также можно сформировать серию траекторий допустимых решений вспомогательной задачи (51) для $\lambda^*\in\Lambda^*$:

$$\Lambda^*=\left\{\lambda^{*j}\right\}_j\ge 0:\ \lambda^{*0}=0,\ \lambda^{*(j-1)}<\lambda^{*j},\ j\in\mathbb{N}.$$

В обозначениях

$$x^{jk}=\arg\min\Phi\left(x,\lambda^k,M\left(\lambda^{*j}\right)\right),\ y^{jk}=\Pr_E x^{jk},\ j,k,$$

оценки (52),(53) принимают вид:

$$z^l\ge\max_{\substack{\lambda^k\le\lambda^{*j}\\ \lambda^{*j}\in\Lambda^*,\lambda^k\in\Lambda}}\Phi\left(x^{jk},\lambda^k,M\left(\lambda^{*j}\right)\right); \qquad (54)$$

$$z^u\le\min_{\lambda^{*j}\in\Lambda^*,\lambda^k\in\Lambda}f\left(y^{jk}\right). \qquad (55)$$

В результате будет сформирован набор траекторий: $X^j=\left\{x^{jk}\right\}_k, j$, с началом в точках $x^{j0}=$ $=\arg\min\Phi\left(x,0,M\left(\lambda^{*j}\right)\right)$ и концами в точках E.

Начальные точки $\left\{x^{j0}\right\}_j$ также формируют траекторию, которая стремится к центру сферы (4): $x^{j0}\underset{j\to\infty}{\to}a$ за счет увеличения параметра $M\left(\lambda^{*j}\right)$ в $\Phi\left(x,\lambda,M\left(\lambda^{*j}\right)\right)=f(x)+M\left(\lambda^{*j}\right)\cdot\left((x-a)^2-r^2\right)$ с увеличением j ($M\left(\lambda^{*j}\right)\underset{j\to\infty}{\to}\infty$).

Поскольку мы рассматриваем полиэдрально-сферические множества, все точки которых равноудалены от центра a описанной сферы, на этапе проектирования будет получено все множество E и таким образом теоретически задача (1) будет решена точно.

Практически же процесс решения прерывается по достижению заданной точности ε по текущим, нижней и верхней, оценкам: $\dfrac{z^u-z^l}{z^l}<\varepsilon$.

Заметим также, что нижняя оценка может быть существенно улучшена при помощи решения релаксационных задач (см. п.3.1) на сфере и многограннике:

$$z^u\ge\max\left\{\min_P f(x),\min_{S_r(a)}f(x)\right\}.$$

Эти вспомогательные задачи эффективно решаются, в частности, на хорошо описанных комбинаторных множествах и для таких функций как квадратичные [28].

Выводы

Представлен новый подход к решению задач оптимизации для полиэдрально-сферических комбинаторных множеств, основанный на применении, наряду с методом штрафных функций, функциональных представлений евклидовых комбинаторных множеств и выпуклых продолжений функций с этих множеств в $\mathbb{R}^n$.

Данный метод может быть обобщен на произвольные хорошо описанные вершинно расположенные евклидовые комбинаторные множества при наличия их строгих функциональных представлений.

Непосредственное обобщение метода на не вершинно расположенные множества невозможно, поскольку основано на построении выпуклых продолжений функций, что возможно для произвольной функции только для вершинно расположенных множеств. Однако после предварительных преобразований, сводящих исходную задачу к задаче на вершинно расположенном множестве в пространстве большей размерности (см., например, в [16] схему сведения произвольной целочисленной и дискретной задачи с ограничениями, переменными к булевой задаче), данный метод применим.

Таким образом, актуальным является развитие теории выпуклых продолжений, решение линейных задач, а также поиск функциональных представлений различных вершинно расположенных комбинаторных множеств, таких как общее множество перестановок, вершинно расположенные классы размещений и сочетаний и их композиционные образы.

Литература: **1.** *Пападимитриу Х., Стайглиц К.* Комбинаторная оптимизация. Алгоритмы и сложность. М.: Мир, 1984. 512 с. **2.** *Approximation and Complexity in Numerical Optimization: Continuous and Discrete Problems* / edited by P.M. Pardalos. Boston: Kluwer Academic Publishers, 2000. 581 p. **3.** *Kochenberger G., Hao J.-K., Glover F., Lewis M., Lu Z., Wang H., and Wang Y.* The unconstrained binary quadratic programming problem: a survey // Journal of Combinatorial Optimization. 2014. №1. P. 58-81. **4.** *Емеличев В. А., Ковалев М. М., Кравцов М. К.* Многогранники, графы, оптимизация (комбинаторная теория многогранников). М.: Наука, 1981. 344 с. **5.** *Сергиенко И.В., Гуляницкий Л.Ф., Сиренко С.И.* Классификация прикладных методов комбинаторной оптимизации // Кибернетика и системный анализ. 2009. № 5. С. 71-83. **6.** *Стоян Ю.Г., Яковлев С.В.* Математические модели и оптимизационные методы геометрического проектирования. К. : Наук. думка, 1986. 268 с. **7.** *Стоян Ю. Г., Ємець О. О.* Теорія і методи евклідової комбінаторної оптимізації. К. : Ін-т системн. дослідж. освіти, 1993. 188 с. **8.** *Стоян Ю.Г.* Некоторые свойства специальных комбинаторных множеств: Препринт 85 АН УССР. Х.: Институт проблем машиностр, 1980. 22 с. **9.** *Стоян Ю.Г., Яковлев С.В., Паршин О.В.* Квадратичная оптимизация на комбинаторных множествах в R^n // Кибернетика и системный анализ, 1991. № 4. С. 97-104. **10.** *Яковлев С.В., Гребенник И.В.* О некоторых классах задач оптимизации на множестве размещений и их свойствах // Изв. вузов. Математика, 1991. № 11. С. 74-86. **11.** *Пичугина О.С., Яковлев С.В.* Полиэдрально-сферический подход к решению некоторых классов комбинаторных задач // Праці VI Міжнародної школи-семінару «Теорія прийняття рішень». Ужгород: УжНУ, 2012. С. 152-153. **12.** *Ємець О.О., Ємець Є.М.* Відсікання в лінійних частково комбінаторних задачах евклідової комбінаторної оптимізації // Доп. НАН України. 2000. № 9. С. 105-109. **13.** *Bertsekas D.P.* Nonlinear Programming. Belmont: Athena Scientific. 1995. 378 p. **14.** *Murray W., Ng K.-M.* An algorithm for nonlinear optimization problems with binary variables // Computational Optimization and Applications, 2010. V. 47. P. 257-288. **15.** *Chen J.-S., Li J.-F., Wul J.* A continuation approach for solving binary quadratic program based on a class of NCP-functions // Applied Mathematics and Computation, 2012. V. 219. P. 3975-3992. **16.** *Писарук Н.Н.* Модели и методы смешанно-целочисленного программирования. Минск: Изд-во БГУ, 2008. 250 с. **17.** *Яковлев С. В.* Теория выпуклых продолжений функций на вершинах выпуклых многогранников// Журнал вычислительной математики и математической физики. 1994. Т. 34, № 7. С. 1112-1119. **18.** *Стоян. Ю. Г., Яковлев С. В.* Построение выпуклых и вогнутых функций на перестановочном многограннике // ДАН УССР, СЕР. А. 1988. № 5. С. 66-68. **19.** *Стоян Ю.Г., Яковлев С.В., Емец О.А., Валуйская О.А.* Построение выпуклых продолжений для функций, заданных на гиперсфере // Кибернетика и системный анализ, 1998. № 2. С. 27-37. **20.** *Postnikov A.* Permutohedra, Associahedra, and Beyond // IMRN: International Mathematics Research Notices, 2009. №6. P. 1026-1106. **21.** *Гребенник И. В., Литвиненко А. С.* Генерация комбинаторных множеств с заданными свойствами // Кибернетика и системный анализ. 2012. № 6. С. 96-105. **22.** *Krislock N., Malick J., Roupin F.* Computational results of a semidefinite branch-and-bound algorithm for k-cluster // Computers & Operations Research, 2016. №66. P. 153-159. **23.** *Billionnet A., Elloumi S., Plateau M.-C.* Improving the performance of standard solvers for quadratic 0-1 programs by a tight convex reformulation: The QCR method // Discrete Applied Mathematics, 2009. №157. P. 1185–1197. **24.** *Brualdi R. A.* Combinatorial matrix classes. Cambridge: Cambridge University Press, 2006. 544 p. **25.** *Burkard R. E., Pardalos P. M., Du D.-Z., Graham R. L.* Quadratic Assignment Problems // in Handbook of Combinatorial Optimization. New York: Springer, 2013. P. 2741-2814. **26.** *Hillier F. S., Appa G., Pitsoulis L., Williams H. P., Pardalos P. M., Prokopyev O. A., Busygin S.* Continuous Approaches for Solving Discrete Optimization Problems // in Handbook on Modelling for Discrete Optimization. New York : Springer, 2006. P. 1-39. **27.** *Punnen A. P., Sripratak P., Karapetyan D.* The bipartite unconstrained 0-1 quadratic programming problem: Polynomially solvable cases // Discrete Applied Mathematics, 2015. V. 193. P. 1-10. **28.** *Berstein Y., Lee J., Onn S., Weismantel R.* Parametric nonlinear discrete optimization over well-described sets and matroid intersections // Mathematical Programming, 2010. V. 124, №1/2. P 233-253. **29.** *Dahl J.* Convex problems in signal processing and communications // Ph.D. thesis, Aalbort University. 2003. P.100.

Поступила в редколлегию 18.02.2016

Рецензент: д-р физ.-мат. наук, проф. Колечкина Л.Н.

Пичугина Оксана Сергеевна, канд. физ.-мат. наук, докторант кафедры прикладной математики ХНУРЭ. Научные интересы: полиэдральная комбинаторика, евклидовая комбинаторная, нелинейная, параметрическая оптимизация, теория графов. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Науки, 14, тел. (099)9598965.

Яковлев Сергей Всеволодович, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры информационных технологий и защиты информации Харьковского национального университета внутренних дел. Научные интересы: нелинейная оптимизация, евклидовая комбинаторная оптимизация, задачи упаковки и раскроя. Адрес: Украина, 61080, Харьков, пр. 50-летия СССР, 27, тел. (050)8046392.