# KVADRATINIO PROGRAMAVIMO UŽDAVINIAI

**Nerijus Galiauskas, Julius Žilinskas**
*Vilniaus universitetas, Matematikos ir informatikos institutas*

## Įvadas

Apibrėžkime kvadratinio programavimo uždavinį ir pateikime pagrindines jo savybes.

Tegu $X$ yra kuri nors netuščia erdvės $\mathbf{R}^n$ aibė ir $f(x) = x^TAx + b^Tx + c$ $(A \in \mathbf{R}^{n\times n}, A \neq \mathbf{0}, b \in \mathbf{R}^n, c \in \mathbf{R})$, $x \in \mathbf{R}^n$, yra kvadratinė funkcija su koeficientais iš aibės $\mathbf{R}$. Tada optimizavimo uždavinys $min\{f(x): x \in X\}$ yra vadinamas kvadratinio programavimo uždaviniu. Kvadratinė funkcija erdvėje $\mathbf{R}^n$ gali būti iškiloji, įgaubtoji arba nei iškiloji, nei įgaubtoji. Yra žinoma, jog kvadratinio programavimo uždavinys, kuriame $X$ yra plokščiasienis, t. y. $X = \{x \in \mathbf{R}^n : Cx \leq d\}$ $(C \in \mathbf{R}^{m\times n}, d \in \mathbf{R}^m)$, ir $f(x)$ yra iškiloji erdvėje $\mathbf{R}^n$ su koeficientais iš aibės $\mathbf{Z}$, priklauso sudėtingumo klasei P ([1]), t. y. egzistuoja polinominio sudėtingumo algoritmas tiksliam tokio uždavinio sprendiniui rasti. Tačiau kvadratinio programavimo uždavinys, kuriame $X$ yra plokščiasienis ir $f(x)$ yra neiškiloji (įgaubtoji arba nei iškiloji, nei įgaubtoji) erdvėje $\mathbf{R}^n$ su koeficientais iš aibės $\mathbf{Z}$, priklauso sudėtingumo klasei NP-hard ([2]), t. y. vis dar nesudarytas polinominio sudėtingumo algoritmas tiksliam tokio uždavinio sprendiniui rasti. Taigi, prieš pradedant spręsti kvadratinio programavimo uždavinį, naudinga atlikti tikslo funkcijos $f(x)$ iškilumo erdvėje $\mathbf{R}^n$ analizę. Pateiksime sąlygą, kuri yra ekvivalenti kvadratinės funkcijos iškilumo erdvėje $\mathbf{R}^n$ apibrėžimui.

*1 teorema ([3, 4]).* Jeigu $\lambda(A) = (\lambda_1(A), ..., \lambda_n(A))^T \in \mathbf{C}^n$ yra matricos $A$ tikrinių reikšmių vektorius, tai kvadratinė funkcija $f(x)$ yra iškiloji erdvėje $\mathbf{R}^n$ tada ir tik tada, kai $\lambda(A) \geq \mathbf{0}$.

*1 išvada ([3, 4]).* Kvadratinė funkcija $f(x)$ yra įgaubtoji erdvėje $\mathbf{R}^n$ tada ir tik tada, kai $\lambda(A) \leq \mathbf{0}$.

*2 išvada ([3, 4]).* Kvadratinė funkcija $f(x)$ yra nei iškiloji, nei įgaubtoji erdvėje $\mathbf{R}^n$ tada ir tik tada, kai $\exists\, i, j \in \{1, ..., n\} (i \neq j)$: $\lambda_i < 0$, $\lambda_j > \mathbf{0}$.

Toliau pristatykime tyrimo, kurio tikslas buvo išanalizuoti kelias problemas, iš kurių kiekviena gali būti modeliuojama, kaip kvadratinio programavimo uždavinys, rezultatus.

## Tyrimo rezultatai

*1. Daugiamačių duomenų vizualizavimas ([5])*

Duota:

1) $A = \{a_1, ..., a_n\}$ $(n > 1)$ – kurių nors daugiamačių objektų aibė;

2) $\delta = (\delta_{ij})$ $(\delta_{ij} \in \mathbf{R}, \delta_{ii} = \mathbf{0}, \delta_{ij} = \delta_{ji})$, $1 \leq i, j \leq n$ – matrica, kurios elementas $\delta_{ij}$ žymi skirtumą tarp aibės $A$ objektų $a_i$ ir $a_j$, $1 \leq i, j \leq n$(skirtumą galima suvokti, kaip atstumą, ryšį ir pan., tarp aibės $A$ objektų);

3) $m \in \mathbf{N}$.

Rasti: aibę erdvės $\mathbf{R}^m$ taškų $X^* = \{x_1^*, ..., x_n^*\}$ $(X^* \subset \mathbf{R}^m)$, tarp kurių atstumai $d(x_i^*, x_j^*) = \sum_{k=1}^{m} \left|x_{ik}^* - x_{jk}^*\right|$ būtų kuo artimesni į skirtumus $\delta_{ij}$, $1 \leq i, j \leq n$ $(i < j)$.

Sprendimas. Nagrinėjama problema dažniausiai modeliuojama kaip optimizavimo uždavinys

$$min\{f(x): x \in \mathbf{R}^{mn}\}, \qquad (1)$$

Kuriame $f(x) = \sum_{i<j}^{n} \left|d(x_i, x_j) - \delta_{ij}\right|$,

arba $f(x) = \sum_{i<j}^{n} (d(x_i, x_j)^2 - \delta_{ij}^2)^2$,

arba $f(x) = \sum_{i<j}^{n} (d(x_i, x_j) - \delta_{ij})^2$, $x \in \mathbf{R}^{mn}$.

Pasirinkime funkciją

$f(x) = \sum_{i<j}^{n} \left( \sum_{k=1}^{m} \left|x_{ik} - x_{jk}\right| - \delta_{ij} \right)^2$, $x \in \mathbf{R}^{mn}$, ir nagrinėkime (1) optimizavimo uždavinį. Funkcija $f(x)$ nėra kvadratinė erdvėje $\mathbf{R}^{mn}$. Padalinkime erdvę $\mathbf{R}^{mn}$ į poerdvius $B_y = \{x \in \mathbf{R}^{mn}: (x_{ik} - x_{jk})\, y_{ijk} \geq 0, 1 \leq i, \leq n (i < j), 1 \leq k \leq m\}$, kai $y \in \{-1; 1\}^{\frac{n(n-1)m}{2}} = Y$. Nesunku suvokti, jog $\mathbf{R}^{mn} = \bigcup_{y \in Y} B_y$. Tada funkcija

$f_y(x) = \sum_{i<j}^{n} \left( \sum_{k=1}^{m} (x_{ik} - x_{jk}) y_{ijk} - \delta_{ij} \right)^2$ yra kvadratinė poerdvyje $B_y$, $y \in Y$. Taigi, (1) uždavinį galime nagrinėti kaip dviejų lygmenų optimizavimo uždavinį $min\{min\{f_y(x): x \in B_y\}: y \in Y\}$, kuriame viršutinis lygmuo yra kombinatorinio optimizavimo, o apatinis lygmuo yra kvadratinio programavimo uždaviniai.

Atkreipkime dėmesį, jog kvadratinė funkcija $f_y(x) \geq \mathbf{0}$ su $\forall x \in \mathbf{R}^{mn}$, $y \in Y$, todėl ir $min\{f_y(x): x \in \mathbf{R}^{mn}\} \geq \mathbf{0}$, vadinasi $f_y(x)$ yra iškiloji erdvėje $\mathbf{R}^{mn}$, o kartu ir poerdvyje $B_y$, $y \in Y$. Atlikus elementarius aritmetinius veiksmus, lengva pamatyti, jog kvadratinės funkcijos $f_y(x)$, $x \in B_y$, $y \in Y$, koeficientai priklauso sveikųjų skaičių aibei $\mathbf{Z}$. Be to, aibė $B_y$, $y \in Y$, yra plokščiasienis, todėl optimizavimo uždavinį $min\{f_y(x): x \in B_y\}$, $y \in Y$ galime spręsti su polinominio sudėtingumo algoritmu. Vis dėlto turime perrinkti visus $y \in Y$, o $|Y| = 2^{\frac{n(n-1)m}{2}}$, todėl optimizavimo uždavinio (1) sudėtingumas yra eksponentinis.

*2. Didžiausia grafo klika ([6])*

Duota: $G = (V, E)$ ($V = \{1, ..., n\}$, $n > 1$, $E \subset V \times V$, $E \neq ø$) – paprastas neorientuotas grafas be kilpų.

Rasti: didžiausią kliką grafe $G$.

Sprendimas. Tegu $A = (a_{ij})$, $a_{ij} = \begin{cases} 0, (1, j) \notin E \\ 1, (i, j) \in E \end{cases}$, $1 \leq i, j \leq n$, yra grafo $G$ gretimumo matrica ir $C^* \subseteq V$ yra didžiausia grafo $G$ klika. Nagrinėkime optimizavimo uždavinį

$$man\{f(x): x \in X\} = -min\{-f(x): x \in X\} \qquad (2)$$

kuriame $X = \left\{x \in \mathbf{R}^n : \sum_{i=1}^{n} x_i = 1, x_i \geq 0, 1 \leq i \leq n\right\}$ ir $f(x) = \frac{1}{2} x^T Ax, x \in X$. Jeigu $x^* \in X$ yra (2) uždavinio sprendinys, tai galima įrodyti, jog $C^* = \{i \in V: x_i^* > \mathbf{0}\}$ ([6]).Atkreipkime dėmesį, jog (2) uždavinio tikslo funkcija $f(x)$, $x \in X$, yra kvadratinė.

*2 teorema.* Kvadratinė funkcija $f(x)$ yra nei iškiloji, nei įgaubtoji erdvėje $\mathbf{R}^n$.

*Įrodymas.* Tegu $\lambda(A) = (\lambda_1(A), ..., \lambda_n(A))^T \in \mathbf{C}^n$ yra matricos $A$ tikrinių reikšmių vektorius. Kadangi $A = A^T$, t. y. matrica $A$ yra simetrinė, todėl $\lambda(A) \in \mathbf{R}^n$. Parodykime, kad $\exists\, i,j \in \{1, ..., n\}$ $(i \neq j)$: $\lambda_i > 0$, $\lambda_j < \mathbf{0}$.

Jeigu $\lambda(A)$ yra matricos $A$ tikrinių reikšmių vektorius, tai su

$$\forall i \in \{1,...,n\} : \det(A - \lambda_i(A)I) = \sum_{j=0}^{n} b_j \lambda_i(A)^{n-j} = 0,$$

kai $I \in \mathbf{R}^{n \times n}$ yra vienetinė matrica, $b_0 = (-1)^n$ ir $b_j = -\frac{1}{j}\sum_{k=1}^{j} b_{j-k} tr(A^k)$, $1 \leq j \leq n$ (čia $tr(A^k)$ žymi matricos $A^k$ pėdsaką) ([7]). Kadangi $tr(A) = \mathbf{0}$, todėl $b_1 = -b_0 tr(A) = \mathbf{0}$ ir $b_2 = -\frac{1}{2} b_0 tr(A^2)$. $A = A^T$ ir $A \neq \mathbf{0}$ (nes $E \neq ø$), todėl $tr(A^2) \neq \mathbf{0}$ ir $b_2 \neq \mathbf{0}$. Vadinasi lygtis

$$\det(A - \lambda I) = b_0 \lambda^{n-2}(\lambda^2 - \frac{1}{2} tr(A^2)) + \sum_{j=2}^{n} b_j \lambda^{n-j} = 0,$$

$\lambda \in \mathbf{R}$ turi bent vieną nenulinį sprendinį. Kadangi

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i(A) = tr(A) = 0 \text{ ir } \exists k \in \{1,...,n\} : \lambda_k(A) \neq 0,$$

todėl $\exists i, j \in \{1,...,n\} (i \neq j) : \lambda_i > 0, \lambda_j < 0$.

Taigi (2) optimizavimo uždavinys yra kvadratinio programavimo uždavinys su tiesiniais apribojimais ir nei iškiląją, nei įgaubtąją erdvėje $\mathbf{R}^n$ tikslo funkcija, todėl jis yra eksponentinio sudėtingumo.

*3. Duomenų klasifikavimas ([8])*

Duota: $X = \{x_1, ..., x_n\}$, $Y = \{y_1, ..., y_m\}$ ($X$, $Y \in \mathbf{R}^k$, $X \neq ø$, $Y \neq ø$, $convX \cap convY = ø$, kai

$$convX = \{x \in \mathbf{R}^k : x = \sum_{i=1}^{n} a_i x_i, \sum_{i=1}^{n} a_i = 1, a_i \geq 0, x_i \in X, 1 \leq i \leq n\},$$

$$convY = \{y\ convY = \left\{y \in \mathbf{R}^k : y = \sum_{i=1}^{m} \beta_j y_j, \sum_{i=1}^{m} \beta_j = 1, \beta_j \geq 0, \beta_j \in Y, 1 \leq j \leq m\right\}$$ – erdvės $\mathbf{R}^k$ aibės.

Rasti: hiperplokštumą $H(a, b) = \{z \in \mathbf{R}^k: a^T z = b\}$ ($a \in \mathbf{R}^k$, $a \neq \mathbf{0}$, $b \in \mathbf{R}$), kuri atskirtų iškiliuosius briaunainius $convX$ ir $convY$ su didžiausiu atstumu iki jų atitinkamų (ir lygiagrečių hiperplokštumai $H(a, b)$) atraminių hiperplokštumų.

Sprendimas. Aibės $convX$ ir $convY$ yra uždaros ir aprėžtos iškilosios erdvės $\mathbf{R}^k$ aibės, todėl egzistuoja jas atskiriančioji hiperplokštuma ([3]). Tegu $M$ ($M > 0$) žymi atstumą tarp hiperplokštumos $H(a, b)$ ir jai lygiagrečių iškilųjų briaunainių $convX$ bei $convY$ atraminių hiperplokštumų. Tarkime, kad $X \subset H^+(a,b) = \{z \in \mathbf{R}^k : a^T z \geq b\}$ ir $X \subset H^-(a,b) = \{z \in \mathbf{R}^k : a^T z \geq b\}$. Tada atstumas tarp bet kurio taško $z \in X \cup Y$ ir hiperplokštumos $H(a, b)$ yra lygus skaičiui $\frac{|a^T z - b|}{\|a\|}$, kai $|a^T z - b| = \begin{cases} a^T z - b, z \in X \\ b - a^T z, z \in Y \end{cases}$, ir $\frac{|a^T z - b|}{\|a\|} \geq M$, todėl natūralu hiperplokštumą $H(a, b)$, su kuria skaičius $M$ yra didžiausias, apibrėžiančių parametrų $a \in \mathbf{R}^k (a \neq 0)$ ir $b \in \mathbf{R}$ ieškoti sprendžiant dviejų lygmenų optimizavimo uždavinį

$$max\{M(a,b) = min\left\{\frac{|a^T z - b|}{\|a\|} : z \in X \cup Y\right\} : a \in \mathbf{R}^k, a \neq 0, b \in \mathbf{R}\} \quad (3)$$

Atkreipkime dėmesį, jog, spręsdami (3) uždavinį, be galo daug kartų pasirenkame vektorius $a \in \mathbf{R}^k$ ($a \neq 0$), kurie skiriasi tik savo ilgiu, bet ne kryptimi. Reikalaukime, kad $a \in \{a \in \mathbf{R}^k : \|a\| = \frac{1}{M}\}$ ($M > 0$). Tada, užuot sprendę (3) uždavinį, galime spręsti kvadratinio programavimo uždavinį $min\{f(a, b): (a, b) \in AB\}$, kuriame $AB = \{(a,b) \in \mathbf{R}^{k+1} : |a^T z - b| \geq 1, a \neq 0, z \in X \cup Y\}$ ir $f(a, b) = \|a\|^2$, $(a,b) \in AB$.

Nesunku patikrinti, jog aibė $AB$ yra plokščiasienis ir kvadratinė funkcija $f(a, b) = a^T Da$, kai $D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, I $\in \mathbf{R}^{k \times k}$ – vienetinė matrica, yra iškilioji erdvėje $\mathbf{R}^{k+1}$ ($\lambda_i(D) = 1, 1 \leq i \leq k, \lambda_{k+1}(D) = 0$) su koeficientais iš aibės $\mathbf{Z}$, todėl nagrinėtą duomenų klasifikavimo uždavinį galime išspręsti polinominio sudėtingumo algoritmu.

## Išvados

1. Kvadratinio programavimo uždaviniais gali būti modeliuojamos įvairios problemos.
2. Kvadratinės funkcijos iškilumo nagrinėjamoje erdvėje analizė yra svarbus kvadratinio programavimo uždavinio sprendimo etapas.

## Literatūra


1. Kozlov M. K.,Tarasov S. P., Khachiyan L. G., 1980, The polynomial solvability of convex quadratic programming. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*. Vol. 20. No 5. P. 223–228.
2. Pardalos P. M., Vavasis S. A.,1991, Quadratic programming with one negative eigenvalue is NP-hard. *Journal of global optimization*. Vol. 1. No. 1. P. 15–22.
3. Apynis A., 2005, *Optimizavimo metodai*. Vilnius: Vilniaus universiteto leidykla.
4. Helmberg C., 2000, *Semidefinite programming for combinatorial optimization*. Berlin: Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin.
5. Dzemyda G., Kurasova O., Žilinskas J., 2008, *Daugiamačių duomenų vizualizavimo metodai*. Vilnius: Mokslo aidai.
6. Horst R., Pardalos P. M., Thoai N. V., 2000, *Introduction to global optimization. Second edition*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.
7. Pennisi L. L., 1987, Coefficients of the characteristic polynomial. *Mathematics magazine*. Vol. 60. No. 1. P. 31–33.
8. Boser B. E., Guyon I. M., Vapnik V. N., 1992, A training algorithm for optimal margin classifiers. *COLT'92: Konferencijos medžiaga*. P. 144–152. New York: ACM Press.

## QUADRATIC PROGRAMMING PROBLEMS

*Nerijus Galiauskas, Julius Žilinskas*

### Summary

In this paper we consider applications of quadratic programming to solving some problems. First of all we define a quadratic programming problem as an optimization problem with a quadratic objective function and some constraints. We present two important properties of a quadratic programming problem: (i) quadratic programming problem with a convex and with integer number coefficients objective function and linear constraints in complexity class P and (ii) quadratic programming problem with nonconvex (concave or non convex, non concave) and with integer number coefficients objective function and linear constraints in complexity class NP-hard. Next we present results of research aimed at analysing some problems that can be formulated as quadratic programming problems: visualisation of multidimensional data, search for maximum clique of a graph, and classification of data.

**Keywords**: quadratic programming, visualisation of multidimensional data, maximum clique of a graph, classification of data.

## KVADRATINIO PROGRAMAVIMO UŽDAVINIAI

*Nerijus Galiauskas, Julius Žilinskas*

### Santrauka

Straipsnyje yra nagrinėjamas kvadratinio programavimo taikymas kai kuriems uždaviniams spręsti. Kvadratinio programavimo uždavinys yra apibrėžiamas, kaip optimizavimo uždavinys su kvadratine tikslo funkcija ir tam tikrais apribojimais.Yra pateikiamos dvi svarbios kvadratinio programavimo uždavinio savybės: (i) kvadratinio programavimo uždavinys, kuriame leistinoji aibė yra apribota tiesiškai ir tikslo funkcija yra iškiloji su koeficientais iš sveikųjų skaičių aibės, priklauso sudėtingumo klasei P ir (ii) kvadratinio programavimo uždavinys, kuriame leistinoji aibė yra apribota tiesiškai ir tikslo funkcija yra neiškiloji (įgaubtoji arba nei iškiloji, nei įgaubtoji) su koeficientais iš sveikųjų skaičių aibės, priklauso sudėtingumo klasei NP-hard.Toliau yra pristatomi tyrimo, kurio tikslas buvo išanalizuoti kelias problemas, iš kurių kiekviena gali būti modeliuojama kaip kvadratinio programavimo uždavinys, rezultatai. Analizuojamos šios problemos: daugiamačių duomenų vizualizavimas, didžiausios klikos paieška grafe ir duomenų klasifikavimas.

**Prasminiai žodžiai**: kvadratinis programavimas, daugiamačių duomenų vizualizavimas, didžiausia grafo klika, duomenų klasifikavimas.

Įteikta 2011-11-15