УДК 519.8

П.И. СТЕЦЮК, П.М. ПАРДАЛОС

# ОБ УТОЧНЕНИИ ЛАГРАНЖЕВЫХ ДВОЙСТВЕННЫХ ОЦЕНОК В БИНАРНЫХ И БУЛЕВЫХ КВАДРАТИЧНЫХ ЗАДАЧАХ

*Рассмотрен подход для улучшения лагранжевых двойственных оценок в квадратичных оптимизационных задачах с бинарными* $(\pm 1)$ *и булевыми* $(0-1)$ *переменными. Он базируется на использовании семейств функционально избыточных квадратичных ограничений-равенств, которые для этих задач можно построить при введении новых переменных в форме произведений уже существующих переменных. Показано, что введение этих ограничений улучшает точность лагранжевых двойственных оценок.*



Многие из *NP*-трудных экстремальных задач на графах (максимальное устойчивое множество вершин графа, максимальный разрез графа, оптимальная бисекция графа, максимальная клика графа и ряд других) формулируются с помощью оптимизационных квадратичных задач на максимум, используя либо бинарные $(\pm 1)$, либо булевые $(0-1)$ переменные. Верхнюю оценку для глобального максимума целевой функции в этих задачах позволяет находить разработанная Н.З. Шором техника нахождения оптимальных лагранжевых двойственных оценок [1, 2], которая базируется на решении задачи минимизации выпуклой недифференцируемой функции, определенной на параметрическом семействе неотрицательно определенных симметричных матриц.

Для уточнения лагранжевых двойственных верхних оценок очень важную роль играют функционально избыточные ограничения [1,2], которые являются нетривиальными следствиями из уже имеющихся ограничений, но в то же время не являются линейными комбинациями уже существующих ограничений. Такие ограничения не изменяют оптимального значения исходной квадратичной задачи. Но их добавление к исходной квадратичной задаче приводит к новой функции Лагранжа и может оказаться, что новая лагранжева двойственная оценка – более точная верхняя оценка, чем лагранжева двойственная оценка, которая соответствует исходной задаче.

Строить функционально избыточные ограничения можно по разному. Так, например, в [1–3] для экстремальных задач на графах (максимальное устойчивое множество вершин графа, максимальный разрез графа и др.) исследованы различные семейства функционально избыточных квадратичных ограничений. Большинство из них ориентированы на учет специфических особенностей каждой конкретной задачи для того или иного семейства графов. Оказывается, этого неудобства можно избежать, используя простой прием "расширения" множества бинарных (булевых) переменных. Он дает возможность генерировать функционально избыточные квадратичные ограничения-равенства, не обращая внимая на специфику задачи, для которой была сформулирована оптимизационная квадратичная модель.

Такой "автомат" для генерации функционально-избыточных ограничений в бинарных и булевых квадратичных задачах обсудим в данной работе. Сделаем это на примере простейших квадратичных задач, которые связаны с максимизацией квадратичной функции от $n$ бинарных переменных $y_1,\ldots,y_n$, каждая из которых может принимать значение либо +1, либо –1, либо $n$ булевых переменных $x_1,\ldots,x_n$, каждая из которых может принимать значение либо 0, либо 1. Заметим, что ничего не изменится, если рассмотреть квадратичную задачу от бинарных (булевых) переменных в общем виде, т.е. при наличии квадратичных ограничений равенств или неравенств.

**1. Простейшие бинарная и булевая квадратичные задачи.** Простейшую бинарную квадратичную задачу рассмотрим в следующей формулировке:

$$Q_y^* = Q(y^*) = \max\left\{ Q(y) = \sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j>i}^{n} q_{ij} y_i y_j + \sum_{i=1}^{n} q_{i0} y_i + q_{00} \right\} \tag{1}$$

при ограничениях

$$y_i^2 = 1,\ i = 1,\ldots,n, \tag{2}$$

а простейшую булевую квадратичную задачу – в формулировке:

$$Q_x^* = Q(x^*) = \max\left\{ Q(x) = \sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j>i}^{n} q_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} q_{i0} x_i + q_{00} \right\} \tag{1'}$$

при ограничениях

$$x_i^2 - x_i = 0,\ i = 1,\ldots,n. \tag{2'}$$

Пусть $\Psi_y^*$ и $\Psi_x^*$ – наилучшие лагранжевые двойственные оценки, соответствующие задачам (1)–(2) и (1')–(2'). Их можно найти с помощью решения задачи минимизации выпуклой недифференцируемой функции, определенной на параметрическом семействе неотрицательно определенных симметричных матриц [1]. Здесь не будем обсуждать алгоритмы нахождения оценок $\Psi_y^*$ и $\Psi_x^*$, а отметим лишь, что эти оценки служат оценками сверху для глобального максимума $Q_y^*$ и $Q_x^*$, т.е.

$$\Psi_y^* \ge Q_y^* \text{ и } \Psi_x^* \ge Q_x^*.$$

Оценки $\Psi_y^*$ и $\Psi_x^*$ не всегда есть достаточно хорошими верхними оценками для $Q_y^*$ и $Q_x^*$. Так, например, для функций от двух переменных имеем

$$Q(y) = -y_1 y_2 - y_1 - y_2 \quad \Rightarrow Q_y^* = 1,\ \Psi_y^* = 1.5,$$

$$Q(y) = -y_1 y_2 - 2y_1 - y_2 \quad \Rightarrow Q_y^* = 2,\ \Psi_y^* = 2.25,$$

$$Q(y) = -2x_1 x_2 + 3x_1 + 2x_2 \Rightarrow Q_x^* = 3,\ \Psi_x^* = 3.125,$$

$$Q(y) = -x_1 x_2 + x_1 + x_2 \quad \Rightarrow Q_x^* = 1,\ \Psi_x^* = 1.125,$$

и, следовательно, для всех указанных примеров они являются неточными. Более того, в первом примере имеем наихудшую относительную точность оценки $\Psi_y^*$, которая составляет 50%.

Поэтому оценки $\Psi_y^*$ и $\Psi_x^*$ нуждаются в уточнении. Сделать это можно за счет использования функционально избыточных ограничений. Далее рассмотрим получение новых более точных верхних оценок, чем оценки $\Psi_y^*$ и $\Psi_x^*$. Новые оценки получены благодаря использованию фунционально избыточных ограничений, которые можно построить, если для задач (1)–(2) и (1')–(2') определенным образом расширить множество бинарных и булевых переменных.

**2. Расширенные бинарная и булевая квадратичные задачи.** Для задачи (1)–(2) множество бинарных переменных расширим введением новых бинарных переменных $y_{ij} = y_i y_j$ для всех $i, j : 1 \le i < j \le n$. В результате получим "расширенную" формулировку квадратичной задачи (1)–(2):

$$Q_y^* = Q(y^*) = \max\left\{ Q(y) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j>i}^{n} q_{ij} y_i y_j + \sum_{i=1}^{n} q_{i0} y_i + q_{00} \right\} \tag{3}$$

при ограничениях

$$y_i^2 = 1,\ i = 1, \ldots, n, \tag{4}$$

$$\begin{cases} y_{ij} = y_i y_j, \\ y_{ij}^2 = 1, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \le i < j \le n. \tag{5}$$

Множество булевых переменных для задачи (1')–(2') расширим за счет введения новых булевых переменных $x_{ij} = x_i x_j$ для всех $i, j : 1 \le i < j \le n$. В результате получим "расширенную" формулировку булевой квадратичной задачи (1')–(2'):

$$Q_x^* = Q(x^*) = \max\left\{ Q(x) = \sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j>i}^{n} q_{ij}x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} q_{i0}x_i + q_{00} \right\} \quad (3')$$

при ограничениях

$$x_i^2 - x_i = 0,\ i = 1,\ldots,n. \quad (4')$$

$$\begin{cases} x_{ij} = x_i x_j, \\ x_{ij}^2 - x_{ij} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \le i < j \le n. \quad (5')$$

Справедлива следующая теорема.

**Теорема 1.** Расширенным квадратичным задачам (3)–(5) и (3')–(5') соответствуют точно такие же наилучшие лагранжевые двойственные оценки как и квадратичным задачам (1)–(2) и (1')–(2'), т.е.

(i) лагранжева двойственная оценка для задачи (3)–(5) равна $\Psi_y^*$,

(ii) лагранжева двойственная оценка для задачи (3')–(5') равна $\Psi_x^*$.

Итак, расширение множества переменных не дает никаких улучшений лагранжевых двойственных оценок. Зато "расширенные" формулировки квадратичных задач позволяют описывать семейства функционально избыточных ограничений в форме квадратичных ограничений-равенств [4], добавление которых к задачам (3)–(5) и (3')–(5') может способствовать уточнению лагранжевых двойственных оценок. Содержательный смысл этих семейств ограничений состоит в отражении различных видов "избыточных" квадратичных зависимостей между новыми переменными $y_{ij}$ и старыми переменными $y_i$ для бинарной квадратичной задачи, и между новыми переменными $x_{ij}$ и старыми переменными $x_i$ для булевой квадратичной задачи.

**3. Семейства функционально избыточных ограничений для расширенных бинарной и булевой задач.** Для бинарных переменных имеем следующие семейства функционально избыточных ограничений.

Для каждой двойки бинарных переменных $y_i$, $y_j$ имеем два ограничения

$$y_i - y_{ij}y_i = 0,\ y_j - y_{ij}y_j = 0, \quad (6)$$

которые являются следствием очевидных равенств

$$y_i = y_i y_j^2 = (y_i y_j) y_j = y_{ij} y_j,$$

$$y_j = y_j y_i^2 = (y_i y_j) y_i = y_{ij} y_i$$

и справедливы при любых $i$ и $j$, таких, что $1 \le i < j \le n$.

Для каждой тройки бинарных переменных $y_i$, $y_j$ и $y_k$ имеем пять функционально избыточных ограничений. Первые три из них такие

$$y_{ij} - y_{ik}y_{jk} = 0,\ y_{ik} - y_{ij}y_{jk} = 0,\ y_{jk} - y_{ij}y_{ik} = 0 \quad (7)$$

и являются следствием очевидных равенств

$$y_{ij} = y_i y_j = y_i y_j y_k^2 = (y_i y_k)(y_j y_k) = y_{ik} y_{jk},$$

$$y_{ik} = y_i y_k = y_i y_k y_j^2 = (y_i y_j)(y_j y_k) = y_{ij} y_{jk},$$

$$y_{jk} = y_j y_k = y_j y_k y_i^2 = (y_i y_j)(y_i y_k) = y_{ij} y_{ik},$$

которые, учитывая (2), справедливы при любых индексах $i$, $j$ и $k$. Три ограничения (7) дополняются двумя ограничениями:

$$y_{ij} y_k - y_{ik} y_j = 0,\ y_{ij} y_k - y_{jk} y_i = 0, \qquad (8)$$

которые следуют из неоднозначности представления произведения $y_i y_j y_k$, т.е.

$$y_i y_j y_k = (y_i y_j) y_k = y_{ij} y_k = (y_i y_k) y_j = y_{ik} y_j = (y_j y_k) y_i = y_{jk} y_i.$$

Заметим, что из неоднозначного представления $y_i y_j y_k$ следует три ограничения. Но одно из них – линейно зависимо от двух оставшихся ограничений, и не будет влиять на точность лагранжевой двойственной оценки.

Для каждой четверки бинарных переменных $y_i$, $y_j$, $y_k$ и $y_l$ имеем два ограничения:

$$y_{ij} y_{kl} - y_{ik} y_{jl} = 0,\ y_{ij} y_{kl} - y_{il} y_{jk} = 0, \qquad (9)$$

которые линейно независимы и следуют из неоднозначности представления произведения всех четырех переменных

$$y_i y_j y_k y_l = y_{ij} y_{kl} = y_{ik} y_{jl} = y_{il} y_{jk}.$$

По аналогичной схеме для булевых переменных имеем следующие семейства функционально избыточных ограничений.

Для каждой двойки булевых переменных $x_i$, $x_j$ имеем два ограничения:

$$x_{ij} x_i - x_{ij} = 0,\ x_{ij} x_j - x_{ij} = 0, \qquad (6')$$

которые являются следствием равенств:

$$0 = x_i^2 - x_i = (x_i^2 - x_i) x_j = x_i (x_i x_j) - x_i x_j = x_i x_{ij} - x_{ij} = 0,$$

$$0 = x_j^2 - x_j = (x_j^2 - x_j) x_i = x_j (x_i x_j) - x_i x_j = x_j x_{ij} - x_{ij} = 0,$$

и справедливы при любых $i$ и $j$, таких что $1 \le i < j \le n$.

Для каждой тройки булевых переменных $x_i$, $x_j$ и $x_k$ имеем пять ограничений. Первые три ограничения:

$$x_{ij} x_{ik} - x_i x_{jk} = 0,\ x_{ij} x_{jk} - x_j x_{ik} = 0,\ x_{ik} x j_{jk} - x_k x_{ij} = 0, \qquad (7')$$

являются следствием таких очевидных равенств:

$$0 = (x_i^2 - x_i) x_j x_k = (x_i x_j)(x_i x_k) - x_i (x_j x_k) = x_{ij} x_{ik} - x_i x_{jk} = 0,$$

$$0 = (x_j^2 - x_j) x_i x_k = (x_i x_j)(x_j x_k) - x_j (x_i x_k) = x_{ij} x_{jk} - x_j x_{ik} = 0,$$

$$0 = (x_k^2 - x_k) x_i x_j = (x_i x_k)(x_j x_k) - x_k (x_i x_j) = x_{ik} x_{jk} - x_k x_{ij} = 0,$$

которые, учитывая (2'), справедливы при любых индексах $i$, $j$ и $k$. Они точно также, как и в случае бинарных переменных дополняются еще двумя ограничениями

$$x_{ij}x_k - x_{ik}x_j = 0\,,\ x_{ij}x_k - x_{jk}x_i = 0\,, \qquad (8')$$

которые следуют из неоднозначного представления

$$x_i x_j x_k = (x_i x_j)x_k = x_{ij}x_k = (x_i x_k)x_j = x_{ik}x_j = (x_j x_k)x_i = x_{jk}x_i\,.$$

Для каждой четверки булевых переменных $x_i$, $x_j$, $x_k$ и $x_l$ имеем два ограничения:

$$x_{ij}x_{kl} - x_{ik}x_{jl} = 0\,,\ x_{ij}x_{kl} - x_{il}x_{jk} = 0\,, \qquad (9')$$

которые линейно независимы и следуют из неоднозначности представления произведения четырех переменных:

$$x_i x_j x_k x_l = x_{ij}x_{kl} = x_{ik}x_{jl} = x_{il}x_{jk}\,.$$

Семейства функционально избыточных ограничений (6)–(9) и (6')–(9') дают возможность построить новые улучшенные бинарные и булевые квадратичные задачи, которым в ряде случаев будут соответствовать более точные оценки, чем оценки $\Psi_y^*$ и $\Psi_x^*$.

**4. Улучшенные бинарная и булевая квадратичные задачи.** Если квадратичную задачу (3)–(5) дополнить группами функционально избыточных ограничений (6), (7), (8) и (9), то получим новую квадратичную задачу в бинарных переменных:

$$Q_y^* = \max\left\{ Q(y) = \sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j>i}^{n} q_{ij}y_i y_j + \sum_{i=1}^{n} q_{i0}y_i + q_{00} \right\} \qquad (10)$$

при ограничениях

$$y_i^2 - 1 = 0\,,\ i = 1,\ldots,n\,, \qquad (11)$$

$$\begin{cases} y_{ij}^2 - 1 = 0, \\ y_i y_j - y_{ij} = 0, \\ y_{ij}y_i - y_j = 0, \\ y_{ij}y_j - y_i = 0, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \le i < j \le n\,, \qquad (12)$$

$$\begin{cases} y_{ij} y_k - y_{ik} y_j = 0, \\ y_{ij} y_k - y_{jk} y_i = 0, \\ y_{ik} y_{jk} - y_{ij} = 0, \\ y_{ij} y_{jk} - y_{ik} = 0, \\ y_{ij} y_{ik} - y_{jk} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k : 1 \le i < j < k \le n, \tag{13}$$

$$\begin{cases} y_{ij} y_{kl} - y_{ik} y_{jl} = 0, \\ y_{ij} y_{kl} - y_{il} y_{jk} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k, l : 1 \le i < j < k < l \le n. \tag{14}$$

Пусть $\psi_y^*$ – наилучшая лагранжевая двойственная оценка для задачи (10)–(14). Она всегда будет не хуже, чем оценка $\Psi_y^*$, а в ряде случаев будет более точной верхней оценкой для $Q_y^*$.

Аналогично, если квадратичную задачу (3')–(5') дополнить группами функционально избыточных ограничений (6'), (7'), (8') и (9'), то получим новую квадратичную задачу в булевых переменных:

$$Q_x^* = \max\left\{ Q(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j>i}^{n} q_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} q_{i0} x_i + q_{00} \right\} \tag{10'}$$

при ограничениях

$$x_i^2 - x_i = 0, \; i = 1, \ldots, n. \tag{11'}$$

$$\begin{cases} x_{ij}^2 - 1 = 0, \\ x_i x_j - x_{ij} = 0, \\ x_{ij} x_i - x_{ij} = 0, \\ x_{ij} x_j - x_{ji} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j : 1 \le i < j \le n, \tag{12'}$$

$$\begin{cases} x_{ij} x_k - x_{ik} x_j = 0, \\ x_{ij} x_k - x_{jk} x_i = 0, \\ x_{ik} x_{jk} - x_{ij} x_k = 0, \\ x_{ij} x_{jk} - x_{ik} x_j = 0, \\ x_{ij} x_{ik} - x_{jk} x_i = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k : 1 \le i < j < k \le n, \tag{13'}$$

$$\begin{cases} x_{ij} x_{kl} - x_{ik} x_{jl} = 0, \\ x_{ij} x_{kl} - x_{il} x_{jk} = 0, \end{cases} \quad \forall i, j, k, l : 1 \le i < j < k < l \le n. \tag{14'}$$

Пусть $\psi_x^*$ – наилучшая лагранжевая двойственная оценка для задачи (10')–(14'). Она всегда будет не хуже, чем оценка $\Psi_x^*$, а в ряде случаев будет более точной верхней оценкой для $Q_x^*$.

Итак, новые квадратичные задачи в (10)–(14) и (10')–(14') получены дополнением простейших квадратичных задач (1)–(2) и (1')–(2') полными семействами функционально избыточных ограничений, которые рассмотрены выше. Ограничения (12) и (12') описывают связи внутри каждой двойки булевых и бинарных переменных. Их количество равно $2n(n-1)$. Ограничения (13) и (13') описывают дополнительные связи внутри каждой тройки булевых и бинарных переменных и их количество равно $5n(n-1)(n-2)/6$. Количество ограничений (14) и (14') равно $n(n-1)(n-2)(n-3)/12$ и они описывают дополнительные связи для переменных внутри каждой четверки булевых и бинарных переменных.

Справедлива следующая теорема.

**Теорема 2.** Оценки $\psi_y^*$ и $\psi_x^*$ (при произвольном $n \geq 4$) удовлетворяют следующим неравенствам:

$$Q_y^* \leq \psi_y^* \leq \Psi_y^*,\ Q_x^* \leq \psi_x^* \leq \Psi_x^*.$$

В заключение отметим, что точность оценок $\psi_y^*$ и $\psi_x^*$ требует детального исследования. Так, неравенства в теореме 2 – очень грубые и рассчитаны на наихудшие случаи бинарной и булевой квадратичных задач. Конечно в ряде случаев оценки $\psi_y^*$ и $\psi_x^*$ будут более точными, чем оценки $\Psi_y^*$ и $\Psi_x^*$. Так, например, для бинарной квадратичной задачи с $n=4$, где $Q(y) = -y_1y_2 - y_1 - y_2 - y_3y_4 - y_3 - y_4$, имеем $Q_y^* = 2$, $\Psi_y^* = 3$, $\psi_y^* = 2$. Для булевой квадратичной задачи с $n=4$, где $Q(x) = -x_1x_2 + x_1 + x_2 - x_3x_4 + x_3 + x_4$, имеем $Q_x^* = 2$, $\Psi_x^* = 2.25$, $\psi_x^* = 2$.

*П.І. Стецюк, П.М. Пардалос*

ПРО УТОЧНЕННЯ ЛАГРАНЖЕВИХ ДВОЇСТИХ ОЦІНОК У БІНАРНИХ ТА БУЛЕВИХ КВАДРАТИЧНИХ ЗАДАЧАХ

Розглянуто підхід для покращення лагранжевих двоїстих оцінок у квадратичних оптимізаційних задачах з бінарними $(\pm 1)$ та булевими $(0-1)$ змінними. Він базується на використанні сімейств функціонально надлишкових квадратичних обмежень-рівностей, які для цих задач можна побудувати при введенні нових змінних у формі добутків вже існуючих змінних. Показано, що введення цих обмежень покращує точність лагранжевих двоїстих оцінок.

*P.I. Stetsyuk, P.M. Pardalos*

ON IMPROVING OF LAGRANGIAN DUAL BOUNDS IN BINARY AND BOOLEAN QUADRATIC PROBLEMS

The approach for improvement of dual lagrangian bounds in quadratic optimization problems with binary $(\pm 1)$ and boolean $(0-1)$ variables is considered. It is based on use of families superfluous constraints in form of equality, which for these problems can be constructed as a result of introduction new variable in the form of products already existing variable. Is shown, that the introduction of these constraints improves accuracy of lagrangian dual bounds problem.

1. *Shor N.Z.* Nondifferentiable Optimization and Polynomial Problems. – Dordrecht, Kluwer, 1998. – 394 p.
2. *Шор Н.З.* Роль избыточных ограничений в улучшении двойственных оценок для полиномиальных оптимизационных задач // Кибернетика и системный анализ. – 1998. – № 4. – С. 106–121.
3. *Shor N.Z., Stetsyuk P.I.* Lagrangian bounds in multiextremal polynomial and discrete optimization problems // J. of Global Optimization. – 2002. – № 23. – P. 1–41.
4. *Стецюк П.И.* О функционально избыточных ограничениях для булевых оптимизационных задач квадратичного типа // Кибернетика и системный анализ. – 2005. – № 6. – С. 168–172.

Получено 17.07.2006