上海大学出版社

2005年上海大学博士学位论文 43

0－1二次规划的全局最优性条件及算法

● 作者：陈　伟

● 专业：运筹学与控制论

● 导师：张连生

上海大学出版社

2005年上海大学博士学位论文 43

0－1二次规划的全局最优性条件及算法

● 作者：陈　伟

● 专业：运筹学与控制论

● 导师：张连生

A Dissertation Submitted to Shanghai University for the Degree of Doctor (2005)

Global Optimality Conditions and Algorithms for Quadratic 0 - 1 Programming

Ph. D. Candidate: Wei CHEN
Supervisor: Liansheng Zhang
Major: Operations Research & Cybernetics

Shanghai University Press
· Shanghai ·

摘　　要

全局优化问题广泛见于工程、国防、经济等诸多重要领域，是数学规划理论的一个重要研究领域。本文首先讨论一类特殊结构的全局优化问题：二次规划的全局优化问题。我们给出了 0－1 二次规划的全局最优性条件，并讨论了其相应的算法。然后，对于一般结构的全局优化问题，我们给出了一个新的无参数的填充函数方法。

本论文的第一章介绍全局优化理论的一些研究成果。第二章讨论无约束 0－1 二次规划的全局最优性条件。在第二节得到一个充分条件和一个必要条件的基础上，我们希望能够得到一些充要条件。为此，我们首先在第三节中给出在线性约束条件下，$\bar{x}$成为一个凸的二次函数的全局极大点的充分必要条件。从这个结论出发，在第四节，我们得到了无约束 0－1 二次问题全局最优的充分必要条件及其等价形式。在第五节，我们将注意力放在全局最优的必要条件上。我们得到的必要条件都不含对偶变量，仅用到原问题的数据。这样，这些条件在实际中都是可以被检验的。进一步，为了使必要条件在实际中易被检验、易操作，我们降低了必要条件中的维数，在比原问题维数更低的空间中，给出一些简洁的必要条件，以达到方便检验的目的。

在第三章，我们进一步研究有约束的 0－1 二次规划的全局最优条件。对于带有线性不等式约束的 0－1 二次问题，我们在

第一节中得到了它全局最优的充分条件和必要条件。必要条件也不含对偶变量。当系数矩阵正定时，我们建立了原0－1问题的解与松弛问题的解之间的联系。对于带有线性等式约束的0－1二次问题，我们在第二节证明了一个带有线性等式约束的0－1二次规划问题，它的全局最优解集和其相应的罚问题的全局最优解集是相等的。这样，带有线性等式约束的0－1二次问题的解，可以通过无约束0－1二次规划问题的解得到。第三章的另一个内容是讨论0－1二次规划问题的实际应用。将我们得到的一些结论运用于极大团问题和二次分派问题，我们得出了一些相关的结论。

将全局最优条件发展成为可实现的算法，是全局优化研究中的重要的工作。本文的第四章讨论无约束0－1二次规划问题的算法。首先我们将原0－1问题化为一个等价的半正定的0－1二次问题。在得到这个半正定二次问题的松弛解 x 之后，取与 x“最接近的”0－1解 y，在一定的条件之下，y 就是原0－1问题的全局最优解。由于松弛后的问题是凸的二次规划问题，可以在多项式时间内求解，所以，我们的算法是可实现的。为了确定 y 是否是原问题的最优解，我们设计了三种算法。在研究了第二章所给出的一些充分条件之间的关系之后，在第四章第四节，我们进一步讨论了这种方法能够成功的一些条件。

对于一般结构的全局优化问题，全局优化的算法研究始终是人们关注的问题。在第五章，我们分别对整变量的和连续变量的全局优化问题，讨论求解它们的无参数的填充函数方法。

目前已有的一些填充函数一般带有一个或两个参数。在实际的计算过程中，往往要花费很多的时间和内存来确定适当

的参数值。另外，用填充函数方法解决整变量的全局优化问题，这也是一个重要的研究方向。基于此，我们在第五章第二节首先针对非线性规划中整变量的全局优化问题，给出一个无参数的填充函数方法。按照填充函数方法的基本思想，我们给出了修正的填充函数的定义。在定义中，我们强调它能帮助我们找到比当前局部极小值具有更小目标函数值的点。理论分析和数值计算的结果都表明，我们所构造的无参数的填充函数，可以有效地使目标函数 $f(x)$ 离开当前的局部极小点，并跳过很多局部极小点，最终找到全局极小点。而且，无论是目标函数还是填充函数，它们需要赋值的点在所有的可行点中占的比例很小。对于连续变量的全局优化问题，我们在第五章第三节同样给出了其修正的填充函数定义。并构造了满足这个定义的填充函数。随后，我们讨论了它的一些理论性质并进行了数值计算。由于无需调节参数，这个新的填充函数是有效的并且是简便的。

关键词： 0-1二次规划，全局优化，全局最优性条件，填充函数，整数规划

Abstract

During the past several decades, many new theoretical, algorithmic and computational contributions have helped to solve globally multiextreme problems arising from important practical applications. In this thesis, we emphasize nonconvex optimization problems presenting some specific structures like quadratic 0 - 1 programming problems first. We obtain global optimality conditions of these problems and discuss the algorithms for solving these problems. Then, we consider a new filled function method with parameter free for solving general global optimization problems.

Quadratic optimization problems cover a large spectrum of situations. Many quadratic programming problems are NP - hard or NP - complete. They constitute an important part both in the field of local optimization and of global optimization. There are close connections between nonconvex quadratic optimization problems and combinatorial optimization. It is important to study these problems because such problems have many diverse applications. But tackling them from the global optimality and duality viewpoints is not as yet at hand.

In the first chapter of this thesis, we introduce the recent developments in global optimization. The global optimality conditions of quadratic 0 - 1 programming problems are discussed in chapter two. First we obtain a necessary and

sufficient condition for a feasible point to be a global maximizer of a convex quadratic function under linear constraints. Through this work, we find explicit global optimality conditions of quadratic 0 - 1 programming problems, including sufficient and necessary conditions and some necessary conditions. The necessary and sufficient condition is mixed first and second order information about the data. These works are presented in section three and four. In section five of chapter two, we focus on the necessary conditions of quadratic 0 - 1 problems. All the necessary conditions we got are expressed only with the primal problems' data in a simple way and without dual variables. That makes the necessary conditions can be checked in practical applications. Furthermore, we reduce the dimensions in our global optimality conditions. Some necessary conditions expressed here are given with lower dimensions than the primal problem and can be used easily.

In chapter three, we consider quadratic 0 - 1 problems with linear constraints. In section one, we establish global optimality conditions for quadratic 0 - 1 problems with inequality constrains, including sufficient conditions and a necessary condition. The necessary condition is expressed without dual variables. We also study the relations between the global optimal solutions of nonconvex 0 - 1 quadratic problems versus the associated relaxed and convex problems. Section two gives the relations between the global optimal solutions of quadratic 0 - 1 problems with linear equality constraints and the global solutions of quadratic 0 - 1 problems. The set of the global optimal solutions of these two class of problems are the same. Some applications of quadratic 0 - 1 problems are discussed in section three of chapter three. We discuss some properties of the maximum clique problems and quadratic assignment problems by applying the results we have gotten in the thesis.

It is an important work to develop the algorithms with global optimality conditions. The methods for solving quadratic 0 - 1 problems are discussed in chapter four. By making the coefficients matrix being a positive semidefinite matrix, we make a quadratic 0 - 1 problem being another quadratic 0 - 1 problem with same solutions of the prime problem. Then under some conditions, we can get 0 - 1 global solutions of the prime problem y through the solutions of the associated relaxed convex problem. The relaxed problem is a convex quadratic problem and can be solved in polynomial time. We design three algorithms to decider whether y is the global solution of the prime 0 - 1 problem. After studying the relations between the sufficient conditions gotten in chapter two, we discuss the conditions for the method being succeed.

The algorithms for solving general global optimization problems play an important role in the field of global optimization. In chapter five, we discuss the filled function method with parameter free for the problems with integer variables and with continuous variables respectively.

Generally, the filled functions have been proposed have one or two parameters. It took a long time and large internal storage to chose appropriate parameters. On the other hand, it is a reasonable way to solve nonlinear integer programming problems with filled function method. Section two of chapter five proposes a new filled function without parameter for nonlinear programming problems with integer variables. According to the idea of the filled function method, we give the modified definition of the filled function. In our definition, we emphasize the properties of the filled function that it can help us to find the points with smaller objective function values than the current smallest minimum. Both theoretical analysis and computational results showed that the filled function we proposed allows one to leave the current local integer minimizer to find a new better starting points. Moreover the method does not sort all local minimizers. It is able to jump over many local minima and succeeds in finding a global minimizer. The ratio of the number of the points need to be evaluated to the number of feasible points are very small, both of the objective function and of the filled function. For the problems with continuous variables, we also give the modified definition of the filled function and propose a filled function satisfying the definition. The properties of the filled function are discussed and some problems are tested. Since there are no parameters need to be adjusted, the computation is more efficient and convenient.

Key Words: 0 − 1 quadratic programming, global optimization, global optimality conditions, filled function method, integer programming

目　录

第一章　全局优化研究的一些新进展

§1.1　引言

在自然科学和社会科学的研究中，有大量理论问题和实际问题都与数学规划有关。其中，全局优化问题又是数学规划理论中的一个重要的而又困难的研究领域。科学研究、经济领域以及工程技术中的诸多问题都依赖于用数值方法寻求相应问题的全局解。在实际应用中，尤其是当问题的规模较大时，通常存在多个不同的局部最优解，所以传统的非线性规划技术不能被应用于求解全局优化问题。长期以来，全局优化问题一直受到研究人员和工程技术人员的关注。近三十年来，尤其是最近几年，对全局优化问题的研究在世界范围更受重视，也有了很多新的研究成果。

所谓全局优化问题，可用如下形式予以表述：

$$\min f(x)$$

$$s.t.\ x \in C$$

定义 1.1.1　设 $C \subset R^n$ 是一个非空闭集，$f(x): R^n \to R$ 在 C 上连续。若存在 $x^* \in C$，使得 $f(x^*) \leqslant f(x)$ ($f(x^*) < f(x)$) 对所有的 $x \in C$ 成立，则 x^* 是 $f(x)$ 在 C 上的一个(严格)全局极小。

至少找到一个全局极小点 x^*，使 $f(x^*) \leqslant f(x)$ 对所有的 $x \in C$ 成立，或证明全局极小点不存在，这样的问题称为全局极小化问题。

现有的绝大多数关于非线性规划的极小化方法都只能求出局部极小点。但是，在科学研究和工程设计中，人们经常会面对这样的问

题：现有的设计或者结果是否已经是最优的了？是否还有改进的余地？同时，在实际应用中，问题的维数越来越大，结构越来越复杂，如何处理不同的局部极小点也是值得考虑的问题。例如，在最小平方和问题中，用局部极小化的方法得到的数值结果显示，不同的起始点会得到不同的答案。如果运用全局极小化方法，那么答案就会更令人信服和满意。

尽管全局优化问题在理论上有研究的必要，在实际上有广阔的应用背景，但较之于局部问题的研究，全局优化问题的研究结果并不是很多。这是因为全局优化问题在某些方面与局部优化问题有本质上的区别，它有其自身的特点和需要克服的困难。

一个首先必须面对的问题是：数学分析领域中哪些工具或结果可以被用于全局问题的研究。众所周知，梯度的计算在求解局部优化问题中起到了重要的作用，无论是局部最优性条件还是局部优化算法的设计，都离不开梯度的概念(参见文献[6])。但在全局优化问题中，由于梯度是一个局部概念，如何将其应用于全局问题，还是一个值得研究的课题(参见[27-29,80,83]等文献)。

毫无疑问，全局优化问题的研究需要全局化的信息。Stephens和Baritompa在[79]一文中指出，一般而言，全局优化的算法都依赖于某个全局性的常数，例如李普希兹常数、函数在可行域的上下界等等。但是这些常数往往很难得到。这也是全局优化研究的另一个困难。

另外，全局最优性条件对全局优化问题的研究也是至关重要的。经典的KKT等局部最优性条件的发现，极大地推动了数学规划理论的发展，它们也是各种局部优化算法的理论基础。同样，全局优化的算法与全局最优性条件密切相关。现有的绝大多数关于非线性规划的极小化方法都只能求出其局部极小点，而且还缺少一个好的判别标准来判定一个局部极小点是否是全局极小点。

正是由于存在这些困难，目前关于全局优化问题的研究结果不像局部问题那样全面和丰富。在此，我们将全局优化问题的研究文

献大致分成两类：一类是关于全局最优性条件的研究；如文献[7,27-28,70,80]等等。另一类是关于全局优化问题的算法研究的，如文献[18-19,24,50,66,98]等等。当然还有很多综合性的文献，如[33,35-36,84]等等。这些文献中，有的是关于一些具有特殊结构的全局优化问题的研究，如凹规划、反凸规划、DC规划、单调规划等等。有的讨论一些一般结构的全局优化问题。现有的文献表明，解全局优化问题的方法与通常的非线性规划的工具是很不相同的，研究解全局优化问题的方法是很重要也是很必要的。

对于凸规划问题，即目标函数是凸函数，可行域是凸集的极小化问题，它的局部极小点就是全局极小点。因此，局部的最优性条件就是全局最优性条件，一般的求局部极小点的方法可以用来求全局极小点。我们对这一类问题不再讨论，而将注意力集中于那些不能直接运用局部理论的全局优化问题。

本博士论文将主要讨论一类具有特殊结构全局优化问题：0-1二次规划问题。对一般结构的全局优化问题，将在第五章中讨论它的一个算法。二次规划问题在传统的数学规划理论中就占有重要地位。二次函数是非线性函数中一类较为简单的函数。对二次问题的研究将有助于对一般非线性问题的研究。同时，二次规划问题本身在现实世界中也具有重要意义。很多二次规划问题都是NP难(NP-hard)或NP-完备的(NP-complete)。所以，无论是在局部优化问题还是全局优化问题的研究，二次规划问题始终得到广泛的重视，也取得了一系列的成果。同时，二次规划问题有着广泛的应用背景。0-1二次问题在组合理论中有很多实际的例子，例如著名的二次分派问题。对这一类全局优化问题的研究，是很有挑战性的，也是很有意义的。鉴于此，我们在第二章和第三章分别就无约束和有约束的0-1二次规划问题给出了相应的全局最优性条件。根据其中的某些条件，我们将在第四章讨论0-1二次规划问题的算法。在这一章，我们首先简单介绍一下目前国内外已有的关于全局优化问题的一些研究成果，包括全局最优性条件和全局优化的确定

性算法。

§1.2 全局最优性条件简介

在这一节，我们将简单介绍一下在全局优化研究领域中，关于全局最优性条件的一些成果。

在非线性规划理论中，KKT 条件、二阶充分条件等都是局部最优性条件。对这些条件，文献[6]有详细的阐述。而在全局优化领域，文献[27]和[28]总结并分析了一些相关的研究成果。在此以后，又有不少研究成果出现。我们在此介绍的是一些讨论较多的结论。

对一般结构的全局优化问题 $\min\{f(x): x \in R^n\}$，1992 年，J. Benoist 和 J. -B. Hiriart-Urruty 得到这样一个结论(参见文献[27])：当 $f(x)$可微时，$\bar{x}$是 $f(x)$的全局极小当且仅当(1) $\nabla f(\bar{x}) = 0$；(2) $(\mathrm{co}f)(\bar{x}) = f(\bar{x})$。这里，$\mathrm{co}f$ 是 $f(x)$的凸包络。但是，对一般函数而言，$f(x)$的凸包络 $\mathrm{co}f$ 很难计算。所以上述结论中的第二个条件较难验证。但它可以有另一种形式的应用：如果估计 $\mathrm{co}f$ 在点$\bar{x}$的上界为 l，而 $l < f(\bar{x})$，那么$\bar{x}$不可能是 $f(x)$的全局极小点。

另外，文献[28]中也介绍了在可微条件下，一些高阶的最优性条件。

对于一些特殊结构的全局优化问题，如 D. C. 规划、反凸规划、二次规划，目前也有不少相关的文献给出了它们的全局最优条件。下面我们作简单的介绍。

§1.2.1 D. C. 规划、反凸规划

局部极小点是否是一个全局极小点，目标函数的凸性(拟凸、伪凸)起着重要作用。如果目标函数是凸的，那么局部信息“$\nabla f(\bar{x}) = 0$”就可以成为全局信息。因此，我们考虑如下两类问题：

(1) 在一个闭的凸集上求两个凸函数之差的极小点。(Difference of Convex functions，简称 D. C. 函数)

(2) 在一个凸集上求一个凸函数的极大点。

这两类问题是可以相互转换的。它们的共同特点是函数的凸性都出现了两次。但其中有一次是“反”的。这有利于我们运用凸分析技术，讨论它们的全局优化问题。

对于D. C. 规划的全局优化问题，不少文献中给出的全局最优条件与ε次梯度的概念有关。[30]中给出了这样一个结果：

定理 1.2.1 设 g、h 是凸函数，$\bar{x}$是 $f=g-h$ 在 R^n 上的全局极小点当且仅当对任意的 $\varepsilon>0$，$\partial_\varepsilon h(\bar{x})\subset\partial_\varepsilon g(\bar{x})$。

由此结论出发，可以就反凸规划问题得到一些相关的结论。将反凸规划问题记为 $\{\max h(x):x\in C\}$，h 是凸函数，C 是非空的闭的凸集。如果 $x\in C$，定义 $I_C(x)=0$；否则，定义 $I_C(x)=+\infty$。这样，通过构造 R^n 上的D. C. 函数 $f(x):=I_C(x)-h(x)$，求 $h(x)$的全局极大问题就转化为求 $f(x)$的全局极小问题。由于 $\partial_\varepsilon I_C(\bar{x})=\{d\in R^n:d^T(x-\bar{x})\leqslant\varepsilon,\ x\in C\}$，将此集合记为 $N_\varepsilon(C,\bar{x})$，就可以得到如下结论：

定理 1.2.2 在上面的假设下，$\bar{x}$是 h 在 C 上的全局极大当且仅当对任意的 $\varepsilon>0$，$\partial_\varepsilon h(\bar{x})\subset N_\varepsilon(C,\bar{x})$。

如果 h(不一定是凸的)在$\bar{x}$点可微，那么$\bar{x}\in C$ 是 h 在 C 上的局部极大的一个必要条件是 $\nabla h(\bar{x})\in N(C,\bar{x})$。如果 h(不必在$\bar{x}$可微)是凸的，那么必要条件就是 $\partial h(\bar{x})\subset N(C,\bar{x})$。这些恰好就是上述定理中 $\varepsilon=0$ 的情形。而 $\varepsilon>0$，则是将这些条件变成了全局极大的充分必要条件。

以上两个定理不仅有各种形式的证明，而且对某些具体问题(例如二次规划问题)，也有进一步的讨论。详细内容参见文献[12,27]和[30]。

以上两个结论将局部最优条件 $\partial f(\bar{x})\subset N(C,\bar{x})$ 扩展成了全局最优条件 $\partial_\varepsilon f(\bar{x})\subset N_\varepsilon(C,\bar{x})$。而 A. Strekalovski 在[80]中的工作是将水平超平面 $\{x\in R^n:h(x)=r\}$ 和方向锥 $N(C,x)=\{d\in R^n:d^T(c-x)\leqslant 0,\ \forall c\in C\}$ 的概念运用于全局优化问题。他证明了$\bar{x}$是