Utilisation de la programmation semidéfinie pour la résolution exacte de problèmes quadratiques en 0-1

M.-C. Plateau, A. Billionnet, S. Elloumi
CNAM-CEDRIC

JFRO
15 juin 2007

Plan

1. Optimisation en 0-1, avec un objectif quadratique et des contraintes linéaires
2. Une méthode générale de résolution exacte
   QCR : Quadratic Convex Reformulation
3. Une variante de QCR
4. Conclusions et perspectives

Plan

1. **Optimisation en 0-1, avec un objectif quadratique et des contraintes linéaires**
2. Une méthode générale de résolution exacte
   QCR : Quadratic Convex Reformulation
3. Une variante de QCR
4. Conclusions et perspectives

1. Le problème étudié

Programme quadratique en 0-1 sous contraintes linéaires

$$(Q01)\begin{cases} \min & q(x) = \frac{1}{2}x^tQx + c^tx \\ \text{s.c.} & Ax = b \\ & A'x \leq b' \\ & x \in \{0,1\}^n \end{cases}$$

c : n-vecteur réel

b : m-vecteur réel

b' : r-vecteur réel

Q : $n \times n$-matrice réelle

A : $m \times n$-matrice réelle

A' : $r \times n$-matrice réelle

Applications

- Problèmes de bipartition de graphe, d'affectation quadratique, du sac-à-dos quadratique

- Domaines économiques, industriels : choix d'investissements, gestion de portefeuilles, transport

Méthodes de résolution exacte

$$
(Q01)\quad \begin{cases} \min & q(x) = \frac{1}{2}x^t Q x + c^t x \\ \text{s.c.} & Ax = b \\ & A'x \le b' \\ & x \in \{0,1\}^n \end{cases}
$$

(1) Reformuler le problème en un PL équivalent

(2) Utiliser la programmation quadratique convexe

(2.1) Si $q(x)$ convexe : utilisation directe d'un solveur

(2.2) Si $q(x)$ non convexe ($Q \not\succeq 0$) : reformuler $(Q01)$ en un problème quadratique équivalent avec un objectif convexe puis se ramener au (2.1)

Les motivations et buts

→ Utilisation des logiciels de programmation quadratique convexe en nombres entiers

↬ <u>but</u> : **Fonction objectif du problème reformulé convexe**

$$
\begin{tikzcd}
 & \text{(Q01)} \arrow[dl] \arrow[d] \arrow[dr] & \\
\text{(P1)} & \text{(P2)} & \dots
\end{tikzcd}
$$

REFORMULATION − CONVEXIFICATION

Les motivations et buts

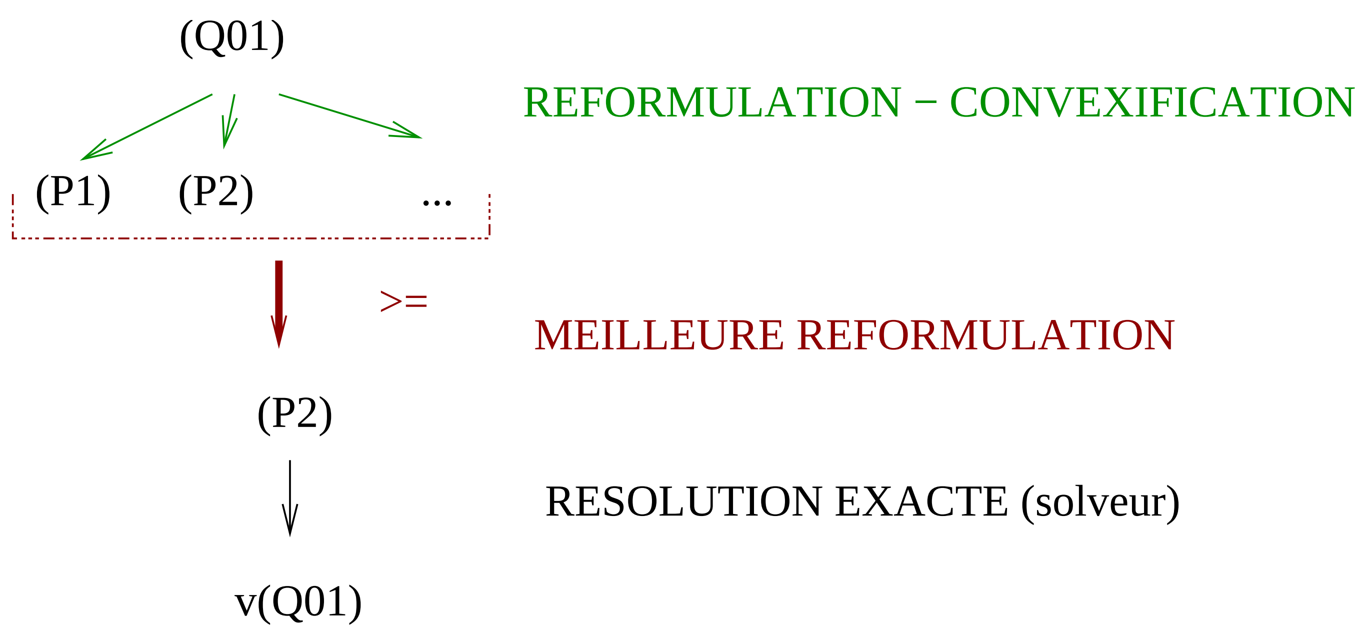
Un critère de comparaison des reformulations

Définition : Soit (Pi) et (Pj) deux reformulations de $(Q01)$.
(Pi) est une *meilleure reformulation* que (Pj) si et seulement si
$v\left(\overline{Pi}\right) \geq v\left(\overline{Pj}\right)$

Les motivations et buts

→ Avoir le meilleur minorant possible pour le B&B

$\looparrowright$ <u>but</u> : **Valeur optimale de la relaxation continue du problème reformulé maximale**



Reformulations quadratiques convexes

- *Hammer et Rubin (1970)* : $q_\gamma(x) = q(x) + \gamma \sum_{i=1}^{n} (x_i^2 - x_i)$

$$Q_\gamma = \begin{pmatrix} q_{11} + \gamma & \dots & \dots & \dots & q_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{i1} & \dots & q_{ii} + \gamma & \dots & q_{in} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{n1} & \dots & \dots & \dots & q_{nn} + \gamma \end{pmatrix}$$

$\rightarrow \gamma^* = -\lambda_{\mathbf{min}}(Q)$

Reformulations quadratiques convexes

- *Billionnet et Elloumi (2005)* : $q_u(x) = q(x) + \sum_{i=1}^{n} u_i(x_i^2 - x_i)$

$$Q_u = \begin{pmatrix} q_{11} + u_1 & q_{12} & \dots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} + u_2 & \dots & q_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{n1} & q_{n2} & \dots & q_{nn} + u_n \end{pmatrix}$$

$\rightarrow u^*$: programmation semidéfinie

Plan

1. Optimisation en 0-1, avec un objectif quadratique et des contraintes linéaires
2. **Une méthode générale de résolution exacte QCR : Quadratic Convex Reformulation**
3. Une variante de QCR
4. Conclusions et perspectives

2. La méthode QCR : méthode en deux phases

QCR : Quadratic Convex Reformulation

Phase I : Reformulation de $(Q01)$ en un programme quadratique en 0-1 équivalent avec une fonction objectif **convexe** $q_{\alpha,u}(x)$ qui dépend de deux paramètres α et u.

Phase II : Résolution du nouveau problème à l'aide d'un solveur quadratique convexe.

QCR - Phase I

Ajout des deux fonctions

$$q_u(x) = \sum_{i=1}^{n} u_i \left(x_i^2 - x_i\right)$$

$$q_\alpha(x) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{m} \alpha_{ki} x_i \left(\sum_{j=1}^{n} a_{kj} x_j - b_k \right)$$

$\longrightarrow$ dépendent de deux paramètres $\alpha \in \mathbb{R}^{m \times n}$ et $u \in \mathbb{R}^n$

$\longrightarrow$ nulles sur l'ensemble admissible

QCR - Phase I

Reformulation

Nouvelle fonction objectif

$$q_{\alpha,u}(x) = q(x) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{m}\alpha_{ki}x_i\left(\sum_{j=1}^{n}a_{kj}x_j - b_k\right) + \sum_{i=1}^{n}u_i\left(x_i^2 - x_i\right)$$

$\rightarrow$ Convexe ssi le hessien de $q_{\alpha,u}(x)$ est SDP

QCR - Phase I

Reformulation

$$Q + \begin{pmatrix} \sum_k \alpha_{k1} a_{k1} + u_1 & \dots & \dots & \sum_k \alpha_{k1} a_{kj} & \dots \\ \dots & \sum_k \alpha_{k2} a_{k2} + u_2 & \dots & \sum_k \alpha_{k2} a_{kj} & \dots \\ \dots & \dots & \ddots & \dots & \dots \\ \sum_k \alpha_{k1} a_{kj} & \sum_k \alpha_{k2} a_{kj} & \dots & \ddots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \sum_k \alpha_{kn} a_{kn} + u_n \end{pmatrix}$$

QCR - Phase I

Calcul des α et u “optimaux”

Deux buts : convexifier ET maximiser le minorant (relaxation continue)

NB : convexifier $q_{\alpha,u}(x) = q(x) + q_\alpha(x) + q_u(x)$

$\exists u \in \mathbb{R}^n$ t.q. $q(x) + q_u(x)$ convexe ? OUI

QCR - Phase I

Calcul des α et u "optimaux"

Deux buts : convexifier ET maximiser le minorant (relaxation continue)

Prop1 : convexifier $q_{\alpha,u}(x) = q(x) + q_\alpha(x) + q_u(x)$

$$\begin{array}{ll} \exists u \in \mathbb{R}^n & \text{t.q. } q(x) + q_u(x) \text{ convexe ? OUI} \\ \exists \alpha \in \mathbb{R}^{m\times n} & \text{t.q. } q(x) + q_\alpha(x) \text{ convexe ? NON, pas toujours} \end{array}$$

QCR - Phase I

Calcul des α et u "optimaux"

Deux buts : convexifier ET maximiser le minorant (relaxation continue)

Prop1 : convexifier $q_{\alpha,u}(x) = q(x) + q_\alpha(x) + q_u(x)$

$\exists u \in \mathbb{R}^n$ t.q. $q(x) + q_u(x)$ convexe ? OUI

$\exists \alpha \in \mathbb{R}^{m \times n}$ t.q. $q(x) + q_\alpha(x)$ convexe ? NON, pas toujours

Prop2 : $v(\overline{Q01_{\alpha,u}}) \geq v(\overline{Q01_u})$

Théorème :Une solution optimale (α^*, u^*) peut être obtenue en résolvant le programme semidéfini suivant (une relaxation SDP du problème) :

$$
(SDQ01) \left\{
\begin{array}{lll}
\min & c^t x + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} Q_{ij} X_{ij} & \\
\text{s.c.} & X_{ii} = x_i & i = 1, \ldots, n \qquad (1) \leftarrow u_i^* \\
& -b_k x_i + \sum_{j=1}^{n} a_{kj} X_{ij} = 0 & i = 1, \ldots, n;\ k = 1, \ldots, m \ (2) \leftarrow \alpha_{ki}^* \\
& Ax = b & \\
& A' x \leq b' & \\
& \begin{pmatrix} 1 & x^t \\ x & X \end{pmatrix} \succeq 0 & \\
& x \in \mathbb{R}^n,\ X \in S_n &
\end{array}
\right.
$$

Théorème :Une solution optimale (α^*, u^*) peut être obtenue en résolvant le programme semidéfini suivant (une relaxation SDP du problème) :

$$(SDQ01) \left\{ \begin{array}{lll} \min & c^t x + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} Q_{ij} X_{ij} & \\ \text{s.c.} & X_{ii} = x_i & i = 1, \ldots, n \quad (1) \leftarrow u_i^* \\ & -b_k x_i + \sum_{j=1}^{n} a_{kj} X_{ij} = 0 & i = 1, \ldots, n;\ k = 1, \ldots, m \quad (2) \leftarrow \alpha_{ki}^* \\ & Ax = b & \\ & A' x \leq b' & \\ & \begin{pmatrix} 1 & x^t \\ x & X \end{pmatrix} \succeq 0 & \\ & x \in \mathbb{R}^n,\ X \in S_n & \end{array} \right.$$

Rmq : $v(SDQ01) = v(\overline{Q01_{\alpha^*, u^*}})$

Idées de preuve :

- Utilisation de la dualité lagrangienne sur le problème initial auquel on ajoute des contraintes quadratiques redondantes

- Passage du problème dualisé à un problème SDP

- Une condition nécessaire pour que le minimum d'une fonction quadratique sans contrainte soit fini est que le hessien soit SDP.

QCR - Phase II

Résolution de :

$$(Q01_{\alpha^*,u^*}) \quad : \quad \min \quad \{q_{\alpha^*,u^*}(x) : Ax = b,\; A'x \leq b',\; x \in \{0,1\}^n\}$$

par un solveur

Exemple

$$
\begin{aligned}
(QP): \quad & min \quad -x_1x_2 - x_1x_3 - x_1x_4 - x_1x_5 - x_2x_4 - x_4x_5 \\
& s.c. \quad \sum_{i=1}^{5} x_i = 3 \\
& \qquad\quad x_1 + x_2 + 9x_3 + 9x_5 = 11 \\
& \qquad\quad x_1 + x_4 \leq 1 \\
& \qquad\quad x \in \{0,1\}^5
\end{aligned}
$$

$$v(QP) = -2$$

1. Résolution du programme SDP associé

$$min \quad \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1,j\neq i}^{5} - X_{12} - X_{13} - X_{14} - X_{15} - X_{24} - X_{45}$$

s.c.

$$X_{ii} = x_i \qquad i = 1, .., 5$$

$$-3x_i + \sum_{j=1}^{5} X_{ij} = 0 \quad i = 1, \ldots, 5$$

$$-11x_i + X_{i1} + X_{i2} + 9X_{i3} + 9X_{i5} = 0 \quad i = 1, \ldots, 5$$

$$\sum_{i=1}^{5} x_i = 3$$

$$x_1 + x_2 + 9x_3 + 9x_5 = 11$$

$$x_1 + x_4 \leq 1$$

$$\begin{pmatrix} 1 & x^t \\ x & X \end{pmatrix} \succeq 0$$

$$x \in \mathbb{R}^5, \; X \in S_5$$

$\mathbf{v(SDP) = -2.005}$

$v(QP) = -2$

1. Résolution du programme SDP associé

$$min \quad \sum_{i=1}^{5} \sum_{j=1, j \neq i}^{5} - X_{12} - X_{13} - X_{14} - X_{15} - X_{24} - X_{45}$$

s.c.

$$X_{ii} = x_i \qquad i = 1, .., 5$$

$$-3x_i + \sum_{j=1}^{5} X_{ij} = 0 \quad i = 1, \ldots, 5$$

$$-11x_i + X_{i1} + X_{i2} + 9X_{i3} + 9X_{i5} = 0 \quad i = 1, \ldots, 5$$

$$\sum_{i=1}^{5} x_i = 3$$

$$x_1 + x_2 + 9x_3 + 9x_5 = 11$$

$$x_1 + x_4 \leq 1 \qquad \mathbf{v(SDP) = -2.005}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & x^t \\ x & X \end{pmatrix} \succeq 0 \qquad Q_u \rightarrow -3.27$$

$$x \in \mathbb{R}^5, \; X \in S_5 \qquad HR \rightarrow -3.43$$

1. Résolution du programme SDP associé

$$\min \quad \sum_{i=1}^{5} \sum_{j=1, j \neq i}^{5} - X_{12} - X_{13} - X_{14} - X_{15} - X_{24} - X_{45}$$

s.c.

$$X_{ii} = x_i \qquad i = 1, .., 5 \qquad \leftarrow u_i^*$$

$$-3x_i + \sum_{j=1}^{5} X_{ij} = 0 \quad i = 1, \ldots, 5 \qquad \leftarrow \alpha_{1i}^*$$

$$-11x_i + X_{i1} + X_{i2} + 9X_{i3} + 9X_{i5} = 0 \quad i = 1, \ldots, 5 \qquad \leftarrow \alpha_{2i}^*$$

$$\sum_{i=1}^{5} x_i = 3$$

$$x_1 + x_2 + 9x_3 + 9x_5 = 11$$

$$x_1 + x_4 \leq 1 \qquad \mathbf{v(SDP) = -2.005}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & x^t \\ x & X \end{pmatrix} \succeq 0 \qquad Q_u \rightarrow -3.27$$

$$x \in \mathbb{R}^5, \; X \in S_5 \qquad HR \rightarrow -3.43$$

2. Récupération des u_i^*, α_{1i}^* et α_{2i}^*.

$$\alpha^* = \begin{pmatrix} 1523.18 & 1520.38 & -1254.08 & 1870.78 & -1253.08 \\ -280.34 & -280.23 & 497.02 & -377.56 & 496.02 \end{pmatrix}, u^* = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 3.04 \\ -4 \\ -0.84 \\ 4 \end{pmatrix}$$

3. Résoudre le nouveau problème reformulé (solveur) :

$$\min_{x \in Dom} \left\{ \sum_{i=1}^{5} \sum_{j=1, j \neq i}^{5} p_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{5} \sum_{k=1}^{2} \alpha_{ki}^* x_i \left(\sum_{j=1}^{5} a_{kj} x_j - b_k \right) + \sum_{i=1}^{5} u_i^* \left(x_i^2 - x_i \right) \right\}$$

Optimalité de QCR
pour l'optimisation d'une fonction quadratique
sous une contrainte de cardinalité

$$(QCC) \ : \ \min \ \left\{ q(x) = \frac{1}{2} x^t Q x + c^t x \ : \ x \in X_{n,k} \right\}$$

où $X_{n,k} = \left\{ x : \sum_{i=1}^{n} x_i = k, x \in \{0,1\}^n \right\}$

Théorème :

La meilleure reformulation quadratique de (QCC) est déterminée par QCR.

Idée de preuve :

Toutes les fonctions quadratiques nulles sur $X_{n,k}$ s'écrivent :

$$\left(\mu_0 + \sum_{i=1}^{n} \mu_i x_i\right) \left(\sum_{j=1}^{n} x_j - k\right) + \sum_{i=1}^{n} \gamma_i \left(x_i^2 - x_i\right)$$

Plan

1. Optimisation en 0-1, avec un objectif quadratique et des contraintes linéaires
2. Une méthode générale de résolution exacte

   QCR : Quadratic Convex Reformulation
3. **Une variante de QCR**
4. Conclusions et perspectives

3. Une variante simple de QCR : La méthode EQCR

EQCR : Eigenvalue Quadratic Convex Reformulation

$$q_{\beta,u}(x) = q(x) + \beta \sum_{k=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{kj} x_j - b_k \right)^2 + u \sum_{i=1}^{n} \left(x_i^2 - x_i \right)$$

avec $\beta \in \mathbb{R}$, $u \in \mathbb{R}$

3. Une variante simple de QCR : La méthode EQCR

$$q_{\beta,u}(x) = q(x) + \beta \sum_{k=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{kj} x_j - b_k \right)^2 + u \sum_{i=1}^{n} (x_i^2 - x_i)$$

avec $\beta \in \mathbb{R}$, $u \in \mathbb{R}$

meilleur u pour β fixé : $u^* = -\lambda_{\min}(Q_\beta)$

$$Q_\beta = \begin{pmatrix} \beta \sum_k a_{k1} & \beta \sum_k a_{k1} a_{k2} & \dots & \beta \sum_k a_{k1} a_{kn} \\ \beta \sum_k a_{k1} a_{k2} & \beta \sum_k a_{k2} & \dots & \beta \sum_k a_{k2} a_{kn} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta \sum_k a_{k1} a_{kn} & \beta \sum_k a_{kn} a_{k2} & \dots & \beta \sum_k a_{kn} \end{pmatrix}$$

Une variante simple de QCR : La méthode EQCR

$$q_{\beta,-\lambda_{\min}(Q_\beta)}(x) = q(x) + \beta \sum_{k=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{kj} x_j - b_k \right)^2 - \lambda_{\min}(Q_\beta) \sum_{i=1}^{n} (x_i^2 - x_i)$$

avec $\beta \in \mathbb{R}$

meilleur β : celui qui minimise $-\lambda_{\min}(Q_\beta)$ et donc qui maximise $\lambda_{\min}(Q_\beta)$

$$\max \{\lambda_{\min}(Q_\beta) : \beta \in \mathbb{R}\}$$

Une variante simple de QCR : La méthode EQCR

$\max\{\lambda_{\min}(Q_\beta) : \beta \in \mathbb{R}\}$ est un programme SDP dont le dual est :

$$(SDP) \left\{ \begin{array}{lll} \min & \displaystyle\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} Q_{ij}X_{ij} & & \leftarrow \lambda_{\min}(Q_{\beta^*}) \\ \text{s.c.} & \displaystyle\sum_{i=1}^{n} X_{ii} & = 1 & \\ & \displaystyle\sum_{i,j=1}^{n}\sum_{k=1}^{m} A_{ki}A_{kj}X_{ij} & = 0 & \leftarrow \beta^* \\ & X \succeq 0 & & \end{array} \right.$$

$\rightarrow$ pas une relaxation SDP du problème de départ

Une variante simple de QCR : La méthode EQCR

– Calcul du meilleur β avec la SDP

– Calcul heuristique d'une bonne valeur de β (méthode itérative)

$\rightarrow$ La qualité de la relaxation est croissante en fonction de β

$\Rightarrow$ alternative intéressante

Comparaison

des reformulations quadratiques convexes

Qualité des bornes :

$$val(HR) \quad \leq \quad val(EQCR) \quad \leq \quad val(QCR)$$

Temps de pré-traitement :

$$CPU(HR) \quad \leq \quad CPU(EQCR) \quad \leq \quad CPU(QCR)$$

D'autres variantes

$$\star\ q_u(x) = \sum_{i=1}^{n} u_i \left(x_i^2 - x_i\right) \qquad\qquad u \in \mathbb{R}^n$$

$$\boxed{\star\ q_\alpha(x) = 0}$$

$$\left\{\begin{array}{lll} \min & c^t x + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} Q_{ij} X_{ij} & \\ \text{s.c.} & X_{ii} = x_i & i = 1, \ldots, n \qquad (1) \leftarrow u_i^* \\ & Ax = b & \\ & A'x \leq b' & \\ & \begin{pmatrix} 1 & x^t \\ x & X \end{pmatrix} \succeq 0 & \end{array}\right.$$

D'autres variantes

$$\star\ q_u(x) = \sum_{i=1}^{n} u_i \left(x_i^2 - x_i\right) \qquad u \in \mathbb{R}^n$$

$$\boxed{\star\ q_\alpha(x) = \alpha \sum_{k=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{kj} x_j - b_k \right)^2} \qquad \alpha \in \mathbb{R}$$

$$\begin{cases} \min & c^t x + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} Q_{ij} X_{ij} \\ \text{s.c.} & X_{ii} = x_i \qquad i = 1, \ldots, n \qquad (1) \leftarrow u_i^* \\ & \sum_{k=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{kj} x_j - b_k \right)^2 = 0 \qquad (2) \leftarrow \alpha^* \\ & Ax = b \\ & A' x \leq b' \\ & \begin{pmatrix} 1 & x^t \\ x & X \end{pmatrix} \succeq 0 \end{cases}$$

Applications de QCR

- problèmes quadratiques avec un objectif non convexe

  k-cluster

  bipartition de graphe

  minimisation d'échanges d'outils dans le magasin d'une machine

- problèmes quadratiques avec un objectif convexe

  plus court chemin probabiliste

  choix d'investissements

  ordonnancement sur machines parallèles

Plan

1. Optimisation en 0-1, avec un objectif quadratique et des contraintes linéaires
2. Une méthode générale de résolution exacte
   QCR : Quadratic Convex Reformulation
3. Une variante de QCR
4. **Conclusions et perspectives**

6. Conclusions

$$(Q01) \quad : \min \{ q(x) : Ax = b, A'x \leq b', x \in \{0,1\}^n \}$$

- **Reformulations quadratiques convexes**

◇ $q(x) = q'(x)$ quadratique convexe $\forall x$ sol. adm.
ajout de fonctions quad. nulles sur le domaine admissible

◇ Convexifier et Obtenir un minorant obtenu par relaxation continue le plus fin possible

◇ Récupérer les valeurs optimales d'une relaxation SDP

◇ Les intégrer ensuite dans notre reformulation

◇ Soumission à un solveur MIQP

6. Conclusions

$$(Q01) \quad : \min \{q(x) : Ax = b, A'x \leq b', x \in \{0,1\}^n\}$$

- **Reformulations quadratiques convexes**

  ◇ HR (prémices) : pré-traitement rapide

  ◇ EQCR (une variante de QCR) : pré-traitement par SDP ou méthode itérative

  ◇ $val(HR) \leq val(EQCR) \leq val(QCR)$

  ◇ Validations expérimentales

Perspectives - nature des contraintes

- Utilisation des contraintes d'inégalité

  ◇ une solution : pour les contraintes linéaires d'inégalité : ajouter une variable d'écart exprimée en fonction des variables binaires

  ◇ une autre approche ?

- Intégrer des coupes grâce aux contraintes d'inégalité

- Cas des contraintes quadratiques

Perspectives - Objectif et Variables

Fonction objectif :

- Trouver *d'autres* familles de fonctions quadratiques nulles pour des classes de problèmes (amélioration du minorant)
- Trouver *toutes* les familles de fonctions quadratiques nulles pour des classes de problèmes particulières.

Variables :

- Problèmes en nombres entiers
- Problèmes en variables mixtes

MERCI DE VOTRE ATTENTION