Non-séparabilité en Programmation Quadratique en Nombres Entiers : Reformulations du multi-sac-à-dos quadratique entier

Dominique Quadri [a], Eric Soutif [b] et Pierre Tolla [a]

[a] *LAMSADE, Univ. Paris Dauphine, Place du M^{al} De Lattre de Tassigny, 75775 Paris Cedex 16, France*

[b] *CEDRIC, Conservatoire National des Arts et Métiers, 292 rue Saint Martin, 75141 Paris Cedex 03, France*

Résumé

Nous nous intéressons dans ce rapport de recherche à la résolution du problème de multi-sac-à-dos quadratique en variables entières, dans le cas non séparable, noté $(QMKP)$. Ce problème consiste à maximiser une fonction quadratique concave en variables entières, soumise à m contraintes linéaires de capacité. À la différence du cas séparable plus souvent étudié, la fonction objectif considérée ici est non-séparable, ce qui rend la résolution du problème à la fois plus difficile mais également plus intéressante dans la mesure où les applications financières de $(QMKP)$ correspondent précisément au cas non-séparable. Nous proposons plusieurs reformulations du problème non-séparable en un problème séparable et discutons de leur intérêt respectif.

Mots clés : programmation entière, programmation quadratique non-séparable, multi-sac-à-dos quadratique entier

1 Introduction

Dans [QST07] est proposée une méthode de recherche arborescente par séparation et évaluation pour résoudre de façon exacte le problème du multi-sac-à-dos quadratique en variables entières $(QMKP)$ dont la fonction objectif est séparable. Nous la notons $B\&BSEP$. Cette méthode s'est avérée intéressante car elle nous a permis de résoudre à l'optimum des instances de $(QMKP)$ allant jusqu'à 2000 variables et contraintes en moins de 5 minutes en moyenne. Nous souhaitons désormais traiter le problème $(QMKP)$ dans une version plus générale c'est-à-dire

Adresses email: `quadri@lamsade.dauphine.fr` (Dominique Quadri), `Eric.Soutif@cnam.fr` (Eric Soutif), `tolla@lamsade.dauphine.fr` (Pierre Tolla).

lorsque la fonction économique de ce dernier est non séparable tout en mettant à profit nos connaissances du contexte séparable. Notre objectif est donc double : nous désirons résoudre de manière exacte $(QMKP)$ non séparable de telle sorte que nous puissions employer notre algorithme de *branch-and-bound* $B\&BSEP$.

Ainsi, nous présentons dans ce rapport une méthode visant à résoudre de manière exacte le problème $(QMKP)$ dont la fonction économique est concave et non séparable. Notre approche repose sur une transformation du problème initial non séparable en un problème équivalent séparable. Il est alors possible de résoudre le problème équivalent, ainsi établi, à l'aide d'une adaptation de notre algorithme $B\&BSEP$.

Il est important de souligner, qu'à notre connaissance, parmi les rares résultats concernant la résolution exacte du problème $(QMKP)$ non séparable, aucune approche ne propose la résolution de ce problème à l'aide d'un problème équivalent. Djerdjour [Dje97], par exemple, propose un algorithme de résolution exacte basé sur le calcul d'un majorant. Ce dernier est obtenu par la résolution d'un problème de multi-sac-à-dos quadratique séparable en variables entières. L'auteur ne reporte aucun résultat numérique.

Nous consacrons la section 2 à l'énoncé du problème généralisé que nous traitons ainsi qu'aux propriétés que doit intégrer la transformation du problème non séparable en un problème séparable. Nous présentons à cette occasion plusieurs possibilités de changement de variables que nous avons envisagées. A travers un exemple très simple (section 2), nous mettons en évidence les limites ou succès des trois transformations évoquées dans la section précédente. La section 4 est consacrée à l'algorithme de résolution exacte que nous proposons pour le problème $(QMKP)$ non séparable. Nous mettons l'accent sur la présentation de la transformation choisie ainsi que sur le calcul du majorant du problème équivalent. Enfin, nous présentons dans la section 5 les perspectives offertes par notre approche.

2 Contexte de l'étude

Nous souhaitons résoudre un problème de multi-sac-à-dos quadratique en variables entières plus général que celui traité dans [QST07], c'est-à-dire que nous n'imposons plus à la fonction objectif d'être séparable, néanmoins elle reste concave.

Nous traitons dans ce rapport le problème de **multi-sac-à-dos quadratique convexe non séparable en variables entières** que nous continuons à noter $(QMKP)$ et qui se présente sous la forme matricielle suivante :

$$
(QMKP) \begin{cases} \max \; f(x) = c^t x - x^t Q x \\ s.c \left| \begin{array}{l} Ax \leq b \\ 0 \leq x \leq u \; x \; entier \end{array} \right. \end{cases}
$$

où

- Le vecteur c est de dimension n et ses coefficients c_i sont positifs ou nuls.
- La matrice Q est *symétrique* définie positive de dimension (n, n).
- La matrice des contraintes A est de dimension (m, n) et ses coefficients a_{ji} sont positifs ou nuls. On appelle ces contraintes des *contraintes de capacité.*
- Le vecteur *second membre* b, de dimension m, est à coordonnées, b_j, positives ou nulles.
- Le vecteur x est de dimension n et ses coordonnées x_i sont entières et bornées supérieurement par des entiers u_i $(i = 1, .., n)$. On note X_i l'ensemble de valeurs entières que peut prendre chaque variable x_i et $|X_i|$ le cardinal de cet ensemble.

Remarque 1 *Si nous n'imposions pas à la matrice Q d'être symétrique et définie positive nous ne pourrions pas, d'une part, appliquer directement le changement de coordonnées choisi. Nous justifierons au moment adéquat ces hypothèses. D'autres part, lorsque nous traitions le problème $(QMKP)$ séparable, les problèmes que nous avons générés étaient tels que les éléments de la matrice diagonale D soient strictement positifs, et ce dans le but d'être le plus réaliste possible. En effet, une des applications de $(QMKP)$ est la gestion de portefeuilles de titres financiers. Or, les éléments de la matrice D, dans ce cas particulier, représentent en partie le risque lié à chaque investissement. Dans la pratique, ces coefficients sont strictement positifs car le risque d'un investissement n'est jamais nul. Ainsi, notre objectif étant de nous ramener dans un contexte connu (i.e. un programme quadratique séparable avec la possibilité d'appliquer notre méthode $B\&BSEP$) nous supposons la matrice Q définie positive afin, qu'après transformation du problème initial, la matrice diagonale D le soit également.*

Compte tenu des résultats encourageants obtenus dans [QST07] concernant le problème du multi-sac-à-dos quadratique convexe séparable en variables entières, il semble naturel d'adapter notre approche à un contexte où la fonction économique est non séparable.

Pour ce faire, nous proposons de transformer le problème $(QMKP)$ non séparable en un problème séparable équivalent. Cette transformation est fréquemment envisagée en algèbre linéaire du fait que les formes quadratiques diagonales sont plus simples à analyser qu'une forme quadratique comportant des termes croisés.

Il existe, donc des méthodes de transformation bien connues qui transforment une forme quadratique quelconque en une forme quadratique dont la matrice représentative est diagonale. Bien entendu, nous ne pouvons pas appliquer n'importe quel changement de coordonnées à notre problème $(QMKP)$. En effet, notre forme quadratique initiale à matrice non diagonale admet des propriétés particulières que nous souhaitons conserver. D'autre part, cette forme quadratique est incluse dans un problème bien particulier dont nous devons tenir compte. C'est pourquoi, nous testons trois transformations (les deux premières sont bien connues, la troisième est adaptée à notre problème initial) du problème initial en un problème connu i.e. séparable afin d'appliquer la méthode développée dans [QST07].

Nous présentons, ci-dessous, les trois possibilités que nous avons envisagées pour transformer notre problème $(QMKP)$ non séparable en un problème séparable :

(1) **Diagonaliser la matrice Q** de telle sorte que $Q = PDP^{-1}$ où D est une matrice diagonale constituée des **valeurs propres** de la matrice Q et P est une matrice de passage (c'est-à-dire constituée des vecteurs propres associés aux valeurs propres de Q) orthogonale (c'est-à-dire telle que $P^t = P^{-1}$ et telle que les vecteurs propres soient orthonormaux). Cette diagonalisation est réalisable en raison de l'hypothèse de symétrie de la matrice Q. Nous proposons alors d'appliquer le **changement de variables** $\mathbf{y = Px \iff x = P^{-1}y}$. Une fois le changement de variables appliqué, nous traitons un problème séparable.

(2) **Rendre diagonale la matrice Q** à l'aide de la **décomposition en carrés de Gauss** (méthode analytique) encore appelée décomposition en matrice diagonale à l'aide des **matrices d'éliminations de Gauss** (méthode matricielle). Supposons que la matrice Q soit symétrique et carrée de dimension n. Q est remplacée par le produit matriciel suivant : $E_1^{-1}E_2^{-1}...E_{n-1}^{-1}D(E_{n-1}^t)^{-1}...(E_2^t)^{-1}(E_1^t)^{-1}$ où les matrices E_i $\forall i = 1, ..., n-1$ sont les matrices d'éliminations de Gauss et la matrice D est une matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont les pivots de Gauss obtenus lors de la transformation. Le changement de variables serait le suivant : $\mathbf{y = (E_{n-1}^t)^{-1}...(E_2^t)^{-1}(E_1^t)^{-1}x \iff x = E_1^t\ E_2^t\ ...\ E_{n-1}^t\ y}$. Le problème ainsi obtenu est un problème séparable.

(3) La dernière transformation, que nous avons retenue en définitive, consiste à appliquer une méthode de **décomposition de Gauss à la matrice** Q mais en effectuant un **changement de variables partiel**, dérivé de celui évoqué dans la deuxième possibilité. Nous conservons les n variables initiales x et nous introduisons n variables supplémentaires y ainsi qu'au pire des cas n contraintes. Nous détaillons cette méthode dans la section 5.3.

Notre choix c'est donc porté sur la dernière transformation. Afin de justifier notre décision, nous établissons dans un premier temps les propriétés qui doivent être conservées par la transformation du problème $(QMKP)$ (non séparable) en un problème séparable quadratique convexe en variables entières $(QMKP_{sep})$. Dans un second temps (section 5.2) nous mettons en œuvre les trois transformations à travers un exemple simple afin de mettre à jour les limites ou au contraire le caractère approprié de chaque changement de variables. Nous présentons dans la section 5.3 l'adaptation de notre méthode $B\&BSEP$ au problème $(QMKP_{sep})$.

Propriétés indispensables de la transformation :

(1) *Si* $(QMKP)$ est convexe <u>*alors*</u> $(QMKP_{sep})$ est convexe.

(2) $Z[QMKP] = Z[QMKP_{sep}]$ ce qui induit que :

(a) *Si* $(QMKP)$ est un problème en variables entières <u>*alors*</u> $(QMKP_{sep})$ gère également des variables entières et à valeurs discrètes.

(b) Nous ne souhaitons pas gérer des erreurs d'arrondi insurmontables, en insérant par exemple des valeurs irrationnelles.

(3) Possibilité d'appliquer notre méthode $B\&BSEP$ pour résoudre $(QMKP_{sep})$ qui repose en particulier sur le calcul d'un bon majorant de la valeur optimale du problème initial.

Afin de mettre en exergue les limites des deux premières transformations et de justifier notre choix, nous proposons d'appliquer les trois voies évoquées dans cette introduction à un exemple numérique très simple.

3 Présentation des trois transformations à travers un exemple

Appliquons les trois changements de variables, évoqués dans la section précédente, sur un exemple numérique très simple de $(QMKP)$ (non séparable) comportant 2 variables et 2 contraintes. Cet exemple est l'occasion de mettre en évidence les difficultés ou succès auxquels nous sommes confrontés lors des différentes transformations.

L'exemple que nous traitons est le suivant :

$$(QP_x)\begin{cases} \max\ f(x) = 69x_1 + 71x_2 - (15x_1^2 + 2x_1x_2 + 17x_2^2) \\ s.c \left| \begin{array}{ll} 81x_1 + 50x_2 \leq 61 & \\ 17x_1 + 2x_2 \leq 105 & \\ 0 \leq x_1 \leq 3 & x_1\ entier \\ 0 \leq x_2 \leq 2 & x_2\ entier \end{array} \right. \end{cases}$$

On note X_i l'ensemble fini de valeurs entières que peut prendre la variable x_i $(\forall i = 1, ..., n)$. Le cardinal de chacun de ces ensembles est noté $|X_i|$. Ici par exemple, $x_1 \in X_1 = \{0, 1, 2, 3\}$ et

$x_2 \in X_2 = \{0, 1, 2\}$ avec $|X_1| = 4$ et $|X_2| = 3$.

Le problème (QP_x) est un multi-sac-à-dos quadratique convexe non séparable en variables entières. La **valeur optimale** du problème $(\mathbf{QP_x})$, $Z[QP_x]$ est égale à **54** où $(x_1^*, x_2^*) = (0, 1)$ est la solution optimale.

La **valeur optimale** de la relaxation continue, notée $(\overline{\mathbf{QP_x}})$, est égale à **62.87** où $(\overline{x_1^*}, \overline{x_2^*}) = (0.17, 0.95)$ est la solution optimale du problème relâché continûment.

Nous présentons sous forme matricielle les coefficients de la fonction économique ainsi que ceux des contraintes qui constituent le problème (QP_x).

Les vecteurs c, b et u sont de la forme :

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} 69 \\ 71 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 61 \\ 105 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Les matrices Q (représentant les termes quadratiques) et A (matrice des contraintes) sont de la forme suivante :

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 15 & 1 \\ 1 & 17 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 81 & 50 \\ 17 & 2 \end{pmatrix}$$

Nous appliquons successivement, au problème (QP_x), les trois transformations suivantes :

(1) **Transformation 1** : diagonalisation de la matrice Q, utilisation des valeurs propres de Q.

(2) **Transformation 2** : décomposition de Gauss, changement de variables total.

(3) **Transformation 3** : décomposition de Gauss, changement de variables partiel.

3.1 Transformation 1 : diagonalisation de la matrice Q

Nous souhaitons transformer la fonction objectif non séparable du problème $(QMKP)$ en une fonction objectif séparable. Pour cela, nous envisageons un changement de variables qui repose sur la diagonalisation de la matrice Q. C'est pourquoi nous débutons cette section par la présentation de notions relatives au calcul matriciel nécessaires à la mise en œuvre du changement de variables que nous suggérons par la suite.

3.1.1 Notions de calcul matriciel

Définition 2 *(Valeurs propres, vecteurs propres)*
Un scalaire λ est une valeur propre de la matrice Q si et seulement s'il existe un vecteur $v \neq 0_{\mathbb{R}^n}$:

$$Qv = \lambda v \quad v \neq 0_{\mathbb{R}^n} \tag{1}$$

v est appelé vecteur propre de la matrice Q associé à la valeur propre λ.

Théorème 3 *Soit Q une matrice (n,n).*

(1) λ est valeur propre de Q si et seulement si $det(Q - \lambda Id_{(n,n)}) = 0_{\mathbb{R}^n}$.

(2) Si λ est une valeur propre de Q alors toute solution $v \neq 0_{\mathbb{R}^n}$ de $(Q - \lambda Id_{(n,n)})v = 0_{\mathbb{R}^n}$ est un vecteur propre associé à λ.

Remarque 4 *Le terme **det(Q)** correspond au déterminant de la matrice Q. Le terme $\mathbf{Id_{(n,n)}}$ correspond à la matrice identité dont la dimension est fonction de la dimension de la matrice Q. Ici la matrice identité est de dimension (n,n).*

Définition 5 *(Matrice inversible, matrice inverse)*
Soit P une matrice (n,n). La matrice P est inversible s'il existe une matrice (n,n) notée P^{-1} telle que :

$$PP^{-1} = P^{-1}P = Id_{(n,n)} \tag{2}$$

P^{-1} est appelée inverse de P.

Définition 6 *(Matrice diagonalisable)*
Soit Q une matrice (n,n). Q est diagonalisable si et seulement s'il existe une matrice inversible P (n,n), telle que $P^{-1}QP = D$ soit une matrice diagonale. On dit alors que la matrice P est une matrice de passage qui diagonalise Q.

Corollaire 7 *Soit Q une matrice (n,n). Si Q est diagonalisable alors il existe un ensemble de vecteurs propres $v_1, ..., v_n$ tel que :*

$$Qv_i = \lambda_i v_i, \quad v_i \neq 0_{\mathbb{R}^n} \quad i = 1, ..., n \tag{3}$$

Théorème 8 *(Condition de diagonalisabilité)*
Soit Q une matrice (n,n) de valeurs propres $\lambda_1, ..., \lambda_n$. S'il existe un ensemble de vecteurs propres $\{v_1, ..., v_n\}$, linéairement indépendants, alors Q est diagonalisable.

Définition 9 *(Matrice orthogonale, matrice symétrique)*
Soit P une matrice (n,n).

(1) P est dite orthogonale si $PP^t = P^tP = Id_{(n,n)}$.
(i.e. la matrice inverse de P n'est autre que sa matrice transposée).

(2) Q est symétrique si $Q = Q^t$.

Corollaire 10 *P est une matrice orthogonale si et seulement si les vecteurs lignes et colonnes de P sont orthonormaux.*

Théorème 11 *Soit Q une matrice (n,n) symétrique. Alors il existe une matrice orthogonale P qui diagonalise Q i.e. $P^tQP = D$ où P est orthogonale.*

Nous énonçons maintenant le théorème qui est à la source du changement de variables que nous proposons d'envisager, dans un premier temps, pour transformer une forme quadratique comportant des termes croisés (i.e. $x_i x_k$ pour $i \neq k$) en une forme quadratique ne comportant que des termes carrés (i.e. x_i^2).

Théorème 12 *Soit $Q = (q_{ik})_{n\times n}$ une matrice symétrique de valeurs propres $\lambda_1, ..., \lambda_n$. Soit P une matrice orthogonale qui diagonalise Q. Alors le changement de coordonnées $x = Py$ transforme $\sum_{i,k}^n q_{ik}x_i x_k$ en $\sum_i^n \lambda_i y_i^2$.*

Remarque 13 *La matrice orthogonale P qui diagonalise la matrice Q existe d'après le théorème 11.*

Ainsi, d'après le théorème 12, il est possible de transformer la forme quadratique x^tQx présente au sein de la fonction économique non séparable de $(QMKP)$ en une forme diagonale x^tDx où D est une matrice diagonale formée des valeurs propres de la matrice Q.

3.1.2 Changement de coordonnées

Nous proposons d'utiliser le changement de coordonnées suggéré par le théorème 12 pour transformer le problème $(QMKP)$ dont la fonction économique est non séparable en un problème pour lequel la fonction objectif est séparable.

Le changement de variables est donc le suivant : $\mathbf{x} = \mathbf{Py}$ où $\mathbf{P}$ est une **matrice orthogonale qui diagonalise** la matrice $\mathbf{Q}$ (représentant les termes quadratiques de la fonction économique de $(QMKP)$).

Selon nos hypothèses, la matrice Q est symétrique donc, d'après le théorème 11, il existe bien une matrice orthogonale qui diagonalise Q.

La matrice P est ainsi la matrice de passage c'est-à-dire la matrice constituée des vecteurs propres orthonormaux associés aux valeurs propres de Q.

Par conséquent, notre but est de diagonaliser la matrice Q (dont les valeurs propres sont réelles et positives car Q est définie positive). On choisit P une matrice orthogonale comme matrice de passage.

Le changement de coordonnées $x = Py$ (i.e. $y = P^{-1}x$) transforme le problème $(QMKP)$ en un problème séparable dont la formulation est la suivante :

$$(QMKP_y) \begin{cases} \max \ g(y) = c^tPy - y^tDy \\ s.c \left| \begin{array}{l} APy \leq b \\ 0 \leq Py \leq u \ (\ y \in Y \ ) \end{array} \right. \end{cases}$$

où

- D est une matrice diagonale constituée des valeurs propres réelles positives de la matrice Q.

– Y est un ensemble fini de valeurs résultant du produit de la matrice P^1 (ou P^t) et du vecteur u.

Remarque 14 *Le fait que la matrice P soit orthogonale nous permet d'établir le changement de coordonnées de façon agréable. En effet, dans la mesure où $P^{-1} = P^t$ nous pouvons remplacer x^tP par y^t sans quoi l'on verrait apparaître la matrice P^{-1} au sein de la fonction objectif.*

3.1.3 Application à notre exemple

La première étape consiste à diagonaliser la matrice Q. Les valeurs propres (distinctes et réelles positives) λ_1 et λ_2 de cette matrice sont :

$$\lambda_1 = 16 + \sqrt{2} \quad \lambda_2 = 16 - \sqrt{2} \tag{4}$$

Les vecteurs propres w_1 et w_2 associés respectivement aux valeurs propres λ_1 et λ_2 sont les suivants :

$$w_1^t = (1, 1 + \sqrt{2}) \quad w_2^t = (1, 1 - \sqrt{2}) \tag{5}$$

Ces vecteurs propres sont orthogonaux mais pas orthonormés. Or, pour que la matrice de passage P soit orthogonale, il faut que les vecteurs propres qui la constituent soient de norme 1. Nous procédons donc à une normalisation des vecteurs w_1 et w_2, et nous obtenons les vecteurs v_1 et v_2 orthonormaux suivants :

$$v_1^t = (\frac{1}{\sqrt{(4 + 2\sqrt{2})}}, \frac{1 + \sqrt{2}}{\sqrt{(4 + 2\sqrt{2})}}) \tag{6}$$

$$v_2^t = (\frac{1}{\sqrt{(4 - 2\sqrt{2})}}, \frac{1 - \sqrt{2}}{\sqrt{(4 - 2\sqrt{2})}}) \tag{7}$$

La matrice de passage orthogonale P est donc la suivante :

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{(4+2\sqrt{2})}} & \frac{1}{\sqrt{(4-2\sqrt{2})}} \\ \frac{1+\sqrt{2}}{\sqrt{(4+2\sqrt{2})}} & \frac{1-\sqrt{2}}{\sqrt{(4-2\sqrt{2})}} \end{pmatrix}$$

Le nouveau problème après changement de variables est le suivant :

$$(QP_y) \begin{cases} \max \ f(y) = 92.0006036y_1 + 36.577164y_2 - (17.4142136y_1^2 + 14.5857864y_2^2) \\ s.c \left| \begin{array}{l} 77.1913346y_1 + 55.7000705y_2 \leq 61 \\ 8.35337742y_1 + 14.9405852y_2 \leq 105 \\ y_1 \in Y_1 \\ y_2 \in Y_2 \end{array} \right. \end{cases}$$

où les variables y_1 et y_2 sont des variables discrètes, c'est-à-dire prenant leurs valeurs, respectivement, dans les ensembles finis $Y_1 = \{a_1, ..., a_{12}\}$ et $Y_2 = \{b_1, ..., b_{12}\}$.

Par exemple, $y_1 = \frac{1}{\sqrt{(4+2\sqrt{(2)})}}x_1 + \frac{1+\sqrt{(2)}}{\sqrt{(4+2\sqrt{(2)})}}x_2$. Or x_1 et x_2 prennent respectivement leurs valeurs parmi les ensembles suivants : $\{0, 1, 2, 3\}$ et $\{0, 1, 2\}$. Par conséquent les variables y_1 et y_2 appartiennent aux ensembles suivants :

$$y_1 \in Y_1 = \{0, 0.92, 1.84, 0.38, 1.30, 3.23, 0.76, 1.68, 2.61, 1.14, 2.07, 2.99\} \tag{8}$$

$$y_2 \in Y_2 = \{0, -0.38, -0.76, 0.92, 0.61, 0.15, 1.84, 1.46, 1.08, 2.77, 2.38, 2.006\} \tag{9}$$

Remarque 15 *Pour une bonne lisibilité des ensembles Y_1 et Y_2, nous avons tronqué les valeurs que peuvent prendre les variables y_1 et y_2, toutefois ces valeurs peuvent être irrationnelles.*

Dans le cas général la fonction objectif du problème (QP_y) est toujours séparable. Elle est concave si le problème initial (QP_x) l'est. En revanche, les contraintes du problème (QP_y)

ne sont pas nécessairement des contraintes de sac à dos. En effet, il est possible que certains coefficients soient négatifs. Ceci résulte des coefficients de la matrice de passage P qui sont des réels quelconques. Toutefois, ces nouvelles contraintes ne constituent pas un obstacle majeur.

3.1.4 Conclusions concernant cette transformation

(1) Les problèmes (QP_x) et (QP_y) sont équivalents en théorie mais pas en pratique. En effet, la valeur optimale du problème relâché continûment $(\overline{QP_y})$ est égale à 61.87. Or la valeur optimale de $(\overline{QP_x})$ est égale à 62.87. Ces valeurs optimales ont été obtenues en utilisant le logiciel Cplex 9.0. Or, les problèmes $(\overline{QP_x})$ et $(\overline{QP_y})$ sont équivalents. Nous sommes donc confrontés à une importante erreur d'arrondi dû au caractère irrationnel des valeurs propres qui se répercute sur la nature irrationnelle de certains coefficients du problème.

(2) Si (QP_x) est convexe alors (QP_y) reste convexe.

(3) Le nombre de variables est resté le même.

(4) Nous sommes confrontés à la gestion de variables discrètes et non plus entières. Or, il est très délicat de mettre en œuvre un algorithme de type *branch-and-bound*, au cours duquel il est nécessaire de gérer de telles variables. Notons d'ailleurs qu'un logiciel tel que Cplex9.0 ne permet pas de résoudre un problème incluant de telles caractéristiques.

3.2 Transformation 2 : décomposition de Gauss (changement de variables total)

La première étape consiste à décomposer la partie quadratique de la fonction objectif en une combinaison linéaire de carrés de formes linéaires linéairement indépendantes. Nous présentons cette transformation sous forme matricielle.

3.2.1 La méthode de décomposition de Gauss

Soit une forme quadratique (version matricielle) $q(x) = x^t Q x$ où la matrice Q est de la forme suivante :

$$\mathbf{Q^{(1)}} = \begin{pmatrix} q_{11}^{(1)} \dots q_{1j}^{(1)} \dots q_{1n}^{(1)} \\ \dots \ \dots \ \dots \ \dots \ \dots \\ q_{i1}^{(1)} \dots q_{ij}^{(1)} \dots q_{in}^{(1)} \\ \dots \ \dots \ \dots \ \dots \ \dots \\ q_{n1}^{(1)} \dots q_{nj}^{(1)} \dots q_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$$

avec $1 \leq i, j \leq n$.

A l'origine l'algorithme du pivot de Gauss est utilisé pour résoudre des systèmes d'équations linéaires. Il triangularise la matrice qui forme le système d'équations en la multipliant, à gauche, par des matrices d'éliminations de Gauss successives qui sont au nombre de $n-1$ lorsque la matrice est de dimension n. L'algorithme de triangularisation est alors le suivant :

$$k = 1, ..., n-1 \begin{cases} q_{ij}^{(k+1)} = q_{ij}^{(k)} & i = 1, ...k \qquad j = 1, ...n \\ q_{ij}^{(k+1)} = 0 & i = k+1, ..., n \; j = 1, ..., k \\ q_{ij}^{(k+1)} = q_{ij}^{(k)} - \frac{q_{ik}^{(k)} q_{kj}^{(k)}}{q_{kk}^{(k)}} & i = k+1, ..., n \; j = k+1, ..., n \end{cases}$$

Or, si la matrice est symétrique, nous remarquons que la multiplication à droite, par les matrices d'élimination successives transposées, rend la matrice diagonale. Nous avons donc choisi cette approche pour obtenir une matrice diagonale à partir d'une matrice Q symétrique.

Rappelons les principales étapes de la méthode de décomposition de Gauss visant à rendre diagonale une matrice Q symétrique définie positive de dimension n.

Si $q_{11}^{(1)} \neq 0$ on établit, lors de la première itération (i.e. $k = 1$), la matrice d'élimination de Gauss correspondant à la première colonne relative au terme diagonale $q_{11}^{(1)}$ représentant le **pivot**. Cette première matrice, notée E_1 est une matrice identité mise à part la première colonne, elle est de la forme suivante :

$$\mathbf{E_1} = \begin{pmatrix} 1 & ... & 0 & ... & 0 \\ -\frac{q_{21}^{(1)}}{q_{11}^{(1)}} & 1 & 0 & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ -\frac{q_{i1}^{(1)}}{q_{11}^{(1)}} & ... & 1 & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ -\frac{q_{n1}^{(1)}}{q_{11}^{(1)}} & ... & 0 & ... & 1 \end{pmatrix}$$

Selon nos hypothèses, nous sommes assurés que l'élément $q_{11}^{(1)}$ est différent de zéro. En effet, la matrice $Q^{(1)}$ est supposée définie positive. Ainsi, ses mineurs principaux sont strictement positifs. Or, $q_{11}^{(1)}$ constitue le premier mineur principal de $Q^{(1)}$. Donc $q_{11}^{(1)} > 0$.

Proposition 16 *Soit $Q^{(1)}$ une matrice carrée d'ordre n, symétrique et définie positive. Si on applique à $Q^{(1)}$ les k ($k = 1, ..., n-1$) itérations successives de l'algorithme du pivot de Gauss alors, tous les pivots de Gauss successifs relatifs à la matrice $Q^{(1)}$ sont strictement positifs et la matrice résultante, $Q^{(n)}$, de cette transformation est définie positive.*

Preuve 17 *Effectuons un raisonnement par récurrence sur l'indice d'itération k.*

Initialisation *: $k = 1$. Vérifions qu'à l'itération $k = 1$ tous les pivots de Gauss successifs relatif à la matrice $Q^{(2)}$ sont strictement positifs.*

Soit $Q^{(1)}$ la matrice de dimension n initiale c'est-à-dire quand $k = 1$.

$$\mathbf{Q^{(1)}} = \begin{pmatrix} q_{11}^{(1)} & ... & q_{1j}^{(1)} & ... & q_{1n}^{(1)} \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ q_{i1}^{(1)} & ... & q_{ij}^{(1)} & ... & q_{in}^{(1)} \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ q_{n1}^{(1)} & ... & q_{nj}^{(1)} & ... & q_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$$

Nous savons par hypothèse que $Q^{(1)}$ est définie positive donc $q_{11}^{(1)} > 0$. Ainsi, $q_{11}^{(1)}$ constitue le premier pivot à partir duquel débute l'algorithme de décomposition de Gauss.

Lors de la première itération ($k = 1$), la matrice d'élimination E_1 est alors de la forme suivante :

$$\mathbf{E_1} = \begin{pmatrix} 1 & ... & 0 & ... & 0 \\ -\frac{q_{21}^{(1)}}{q_{11}^{(1)}} & 1 & 0 & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ -\frac{q_{i1}^{(1)}}{q_{11}^{(1)}} & ... & 1 & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ -\frac{q_{n1}^{(1)}}{q_{11}^{(1)}} & ... & 0 & ... & 1 \end{pmatrix}$$

Nous effectuons ensuite le produit de matrices $E_1 Q^{(1)} E_1^t$ qui fournit la matrice $Q^{(2)}$ (i.e.

$k = 2$) :

$$\mathbf{Q^{(2)}} = \begin{pmatrix} q_{11}^{(1)} & 0 & ... & 0 \\ 0 & q_{22}^{(2)} & ... & q_{2n}^{(2)} \\ 0 & ... & ... & ... \\ 0 & q_{n2}^{(2)} & ... & q_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}$$

où $q_{ij}^{(2)} = q_{ij}^{(1)} - \frac{q_{ik}^{(1)} q_{kj}^{(1)}}{q_{11}^{(1)}}$ pour tout $i = 2, ..., n$ et $j = 2, ..., n$.

Notons $Q'^{(2)}$ la matrice de dimension $n - 1$ suivante :

$$\mathbf{Q'^{(2)}} = \begin{pmatrix} q_{22}^{(2)} & ... & q_{2n}^{(2)} \\ ... & ... & ... \\ q_{n2}^{(2)} & ... & q_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}$$

Vérifions dans un premier temps que le pivot $q_{22}^{(2)}$ relatif à la matrice ci-dessus est non nul. Nous vérifierons, dans un deuxième temps, que $Q'^{(2)}$ et par conséquent $Q^{(2)}$ reste définie positive.

L'élément $q_{22}^{(2)}$ est égale à $q_{22}^{(1)} - \frac{q_{21}^{(1)} q_{12}^{(1)}}{q_{11}^{(1)}}$.

Or, par hypothèse, nous savons que la matrice initiale $Q^{(1)}$ est définie positive, ce qui implique, que le mineur principal suivant (i.e. le déterminant ci-dessous) est strictement positif :

$$M_2 = \begin{vmatrix} q_{11}^{(1)} & q_{12}^{(1)} \\ q_{21}^{(1)} & q_{22}^{(1)} \end{vmatrix} > 0$$

où $|A|$ représente le déterminant de la matrice A.

Ainsi, nous pouvons établir les égalités suivantes : $q_{22}^{(2)} = q_{22}^{(1)} - \frac{q_{21}^{(1)} q_{12}^{(1)}}{q_{11}^{(1)}} = \frac{1}{q_{11}^{(1)}}(q_{11}^{(1)} q_{22}^{(1)} - q_{21}^{(1)} q_{12}^{(1)}) = \frac{1}{q_{11}^{(1)}} \; M_2$.

Or, $\frac{1}{q_{11}^{(1)}} > 0$ et $M_2 > 0$ donc $q_{22}^{(2)} > 0$. Par conséquent, le pivot correspondant à la matrice $Q'^{(2)}$ est strictement positif.

Par ailleurs, chaque élément de la matrice $Q^{(2)}$ correspond à un mineur principal de la matrice $Q^{(1)}$ et en particulier $|Q^{(1)}| = |Q^{(2)}|$. Donc, la matrice $Q^{(2)}$ obtenue à la fin de la première itération reste définie positive.

***Hypothèse de récurrence** : supposons que jusqu'à l'itération $k < n$, le pivot de la matrice $Q'^{(n)}$ soit strictement positif et que $Q^{(n)}$ reste définie positive.*

Montrons que $Q^{(k+1)}$ reste définie positive et que le pivot $q_{k+1,k+1}^{(k+1)}$ est strictement positif.

Nous ne détaillons pas ici la démonstration de ce point. Toutefois l'idée de cette dernière repose sur le fait que le pivot $q_{k+1,k+1}^{(k+1)}$ est fonction des mineurs principaux successifs de la matrice de l'itération précédente. Or d'après l'hypothèse de récurrence, la matrice $Q^{(k)}$ est définie positive, ce qui signifie que ses mineurs principaux successifs sont strictement positifs. Donc $q_{k+1,k+1}^{(k+1)} > 0$. Par ailleurs, nous pouvons également montrer que tous les éléments de la matrice $Q^{(k+1)}$ sont fonctions des mineurs principaux de la matrice de l'itération précédente et ainsi que les mineurs principaux successifs de $Q^{(k+1)}$ sont dépendants également dépendants des mineurs principaux de $Q^{(k)}$. Nous pouvons alors conclure que les mineurs principaux successifs de $Q^{(k+1)}$ sont strictement positifs ce qui implique que $Q^{(k+1)}$ soit définie positive.

Conclusion : $\forall k \leq n$, $Q^{(k)}$ est une matrice définie positive et le pivot de Gauss, $q_{kk}^{(k)}$ correspondant à cette matrice, est strictement positifs.

□

Ainsi, en faisant l'hypothèse que la matrice Q initiale est définie positive les pivots de Gauss successifs seront toujours strictement positifs. De plus, ces pivots seront les éléments de la matrice diagonale formant le terme quadratique de la nouvelle fonction économique séparable. Cette matrice diagonale sera donc définie positive et la fonction économique sera concave.

Remarque 18 *Si nous supposions la matrice Q semi-définie positive, il serait envisageable que l'élément $q_{11}^{(1)}$ soit nul. Cette difficulté pourrait être contournée en multipliant à gauche et à droite la matrice $Q^{(1)}$ par une matrice de permutation visant à échanger, dans un premier temps (multiplication à gauche), la ligne dont le pivot est nul avec une ligne dont le pivot serait non nul, et dans un second temps, les colonnes correspondantes à l'indice du pivot (initialement nul) pour conserver la symétrie de la nouvelle matrice. Toutefois, nous ne pourrions pas assurer le fait qu'aucun pivot ne soit nul. Or, comme nous l'avons précisé lors de la remarque 5.1, nous désirons, d'une part, que notre modèle soit le plus réaliste possible, et d'autre part, que nous soyons en mesure, après transformation d'utiliser notre algorithme de branch-and-bound B&BSEP, qui nécessite des élements strictement positifs sur la diagonale de la matrice D.*

Par conséquent nous ne traitons pas ici le cas où la matrice Q est semi-définie positive, qui nécessiterait des développements algorithmiques non détaillés ici.

Une fois la matrice E_1 établie, on effectue le produit $E_1 Q^{(1)} E_1^t$ qui élimine les termes croisés $x_1 x_j$ c'est-à-dire :

$$\mathbf{E_1 Q E_1^t} = \begin{pmatrix} q_{11}^{(1)} & ... & 0 & ... & 0 \\ 0 & q_{22}^{(2)} & q_{23}^{(2)} & ... & q_{2n}^{(2)} \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & ... & q_{ii}^{(2)} & ... & q_{in}^{(2)} \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & ... & q_{nj}^{(2)} & ... & q_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}$$

Remarque 19 *L'hypothèse de symétrie de la matrice Q initiale prend tout son sens ici. En effet, l'élimination des termes sur-diagonaux est effectuée en multipliant à droite la matrice Q par la transposée de la matrice d'élimination E_1. Ce qui ne serait pas possible si la matrice Q n'était pas symétrique.*

On réitère ce procédé, pour k=1,...,n-1. A la deuxième itération, le pivot éventuel est $q_{22}^{(2)}$, si ce dernier est non nul. Or, si Q est définie positive ce fait est assuré (cf. Proposition 16).

Si la matrice Q est de taille n le procédé sera renouvelé $n-1$ fois, c'est-à-dire que le nombre de matrices d'élimination sera de $n-1$.

A la fin de cet algorithme de décomposition on obtient une matrice diagonale D, formée des pivots successifs, telle que :

$$D = E_{n-1}...E_1 Q E_1^t...E_{n-1}^t = Q^{(n)} \tag{10}$$

Ainsi, la matrice Q peut être remplacée par le produit de matrices suivant :

$$Q = (E_{n-1}...E_1)^{-1} D (E_1^t...E_{n-1}^t)^{-1} \tag{11}$$

Par conséquent le terme quadratique ${}^t x Q x$ est remplacé par l'expression suivante :

$$ {}^t x E_1^{-1} \ldots E_{n-1}^{-1} \; D \; \underbrace{(E_{n-1}^t)^{-1} \ldots (E_1^t)^{-1} x}_{y} $$

3.2.2 Changement de coordonnées

Le changement de variables serait le suivant : $\mathbf{y} = \mathbf{Rx}$ où $R = (E_{n-1}^t)^{-1} \ldots (E_2^t)^{-1} (E_1^t)^{-1}$. Ce changement de coordonnées transforme le problème $(QMKP)$ en un problème séparable dont la formulation est la suivante :

$$ (QMKP_y) \begin{cases} \max \; g(y) = c^t R^{-1} y - y^t D y \\ s.c \left| \begin{array}{l} AR^{-1} y \leq b \\ 0 \leq y \leq Ru \; (\; y \in Y \;) \end{array} \right. \end{cases} $$

où

- D est une matrice diagonale constituée des pivots de Gauss.

- Y est un ensemble fini de valeurs résultant du produit de la matrice R et du vecteur u.

3.2.3 Application à notre exemple

$$ (QP_x) \begin{cases} \max \; f(x) = 69x_1 + 71x_2 - (15x_1^2 + 2x_1 x_2 + 17x_2^2) \\ s.c \left| \begin{array}{ll} 81x_1 + 50x_2 \leq 61 & \\ 17x_1 + 2x_2 \leq 105 & \\ 0 \leq x_1 \leq 3 & x_1 \; entier \\ 0 \leq x_2 \leq 2 & x_2 \; entier \end{array} \right. \end{cases} $$

Rappelons l'expression de la matrice Q :

$$ \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 15 & 1 \\ 1 & 17 \end{pmatrix} $$

Ici $n = 2$ donc nous établissons 1 (i.e. $n-1$) matrice d'élimination de Gauss notée E_1.

De plus l'élément $q_{11}^{(1)} = 15 \neq 0$ donc il constitue le premier pivot de Gauss.

Nous établissons alors la matrice d'élimination E_1 par rapport au pivot, $q_{11}^{(1)}$, ainsi que sa transposée, E_1^t. Ces deux matrices sont égales à :

$$\mathbf{E_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{15} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{E_1^t} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{15} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Les matrices d'éliminations de Gauss étant des matrices identités mis à part une de leurs colonnes, les matrices inverses de E_1 et E_1^t sont faciles à déterminer, ne nécessitant pratiquement aucun calcul. Pour ce problème, E_1^{-1} et $(E_1^t)^{-1}$ sont les suivantes :

$$\mathbf{E_1^{-1}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{15} & 1 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{E_1^t})^{\mathbf{-1}} = (\mathbf{E_1^{-1}})^{\mathbf{t}} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{15} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

On obtient $E_1 Q E_1^t = D$ où D est une matrice diagonale constituée des pivots :

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 15 & 0 \\ 0 & \frac{254}{15} \end{pmatrix}$$

Ainsi $\mathbf{Q} = \mathbf{E_1^{-1} D (E_1^t)^{-1}}$. On remplace donc Q par ce produit de matrices et $\mathbf{(E_1^t)^{-1}.x}$ par $\mathbf{y}$ (de même $\mathbf{x^t E_1^{-1}}$ est remplacé par $\mathbf{y^t}$). Ce qui équivalent à

$$\mathbf{x} = \mathbf{E_1^t y} \tag{12}$$

On applique alors ce changement de variables au problème. Le changement de variables est le suivant :

$$\begin{cases} \mathbf{y_1 = x_1 + \frac{1}{15} x_2} \\ \quad \mathbf{y_2 = x_2} \end{cases}$$

Le problème (QP_x) devient alors :

$$(QP_y) \begin{cases} \max \; f(y) = 69y_1 + \frac{996}{15} y_2 - 15y_1^2 - \frac{254}{15} y_2^2 \\ s.c \left| \begin{array}{ll} 81y_1 + \frac{669}{15} y_2 \leq 61 & \\ 17y_1 + \frac{13}{15} y_2 \leq 105 & \\ x_2 = y_2 & \\ y_1 \in Y_1 & y_1 \; discret \\ 0 \leq y_2 \leq 2 & y_2 \; entier \end{array} \right. \end{cases}$$

où $Y_1 = \{0, \frac{1}{15}, \frac{2}{15}, 1\frac{16}{15}, \frac{17}{15}, 2, \frac{31}{15}, \frac{32}{15}, 3, \frac{46}{15}, \frac{47}{15}\}$ et $y_2 \in X_2$ (car $y_2 = x_2$).

Ainsi comme y_1 dépend de x_1 et x_2 alors y_1 prend $|X_1| \times |X_2| = (u_1 + 1) \times (u_2 + 1)$ valeurs rationnelles possibles.

Remarque 20 *Notre exemple comporte une particularité : $y_2 = x_2$. Ainsi, la variable y_2 reste entière et $y_2 \in X_2$, ce qui n'est pas le cas pour la variable y_1.*

Conclusions concernant cette transformation

(1) Les problèmes (QP_x) et (QP_y) sont équivalents, la résolution en continue des deux problèmes fournit la même valeur, nous ne retrouvons pas les erreurs d'arrondi que nous ne pourrions pas gérer, comme c'était le cas en utilisant le premier changement de variables. Nous ne sommes pas confrontés dans ce cas à des coefficients irrationnels.

(2) Si (QP_x) est convexe alors (QP_y) reste convexe.
En effet, la nouvelle fonction économique est séparable. Pour que cette dernière soit concave il faut que les éléments de la matrice D soient positifs ou nuls. Or les éléments qui composent cette matrice sont les pivots de Gauss successifs. Cependant, d'après la proposition 16 les pivots sont strictement positifs si la matrice Q initiale est définie positive. Donc la fonction objectif est concave.

(3) Le nombre de variables est resté le même.

(4) $Z[QP_x] = Z[QP_y]$ en théorie mais le nouveau problème (QP_y) est un problème discret et non en variables entières , or nous il nous est très délicat de mettre en œuvre un algorithme de *branch-and-bound* au cours duquel certaines variables prennent des valeurs discrètes et non entières.

3.3 Transformation 3 : décomposition de Gauss (changement de variables partiel)

Les deux transformations précédentes ne possèdent pas toutes les propriétés souhaitées. En effet, la première, effectuée à l'aide de la diagonalisation de la matrice Q, transforme le problème initial en un programme dont la fonction économique est séparable, mais discret et faisant apparaître d'importantes erreurs d'arrondi. La décomposition de Gauss, quant à elle, ne fait pas apparaître des valeurs irrationnelles mais nécessite le traitement des variables discrètes ce qui constitue un obstacle. Nous proposons dans cette sous-section une adaptation de la deuxième transformation permettant la gestion de variables discrètes.

3.3.1 Décomposition de Gauss avec changement de variables partiel

Nous proposons d'effectuer une décomposition de Gauss, comme celle présentée dans la précédente sous-section en modifiant le changement de coordonnées. Une fois la matrice diagonale obtenue, nous n'effectuons pas un changement de variables "total" ; c'est-à-dire que nous ne remplaçons pas les variables x_i partout où elles apparaissent. Le changement de coordonnées est effectué uniquement au niveau de la partie quadratique de la fonction objectif. Nous laissons intacte la partie linéaire. Ainsi, nous proposons un changement de variables "partiel" : nous conservons les variables relatives à la partie linéaire, ainsi que les contraintes initiales en x_i (où $i \in \{1, ..., n\}$) et nous remplaçons les variables relatives à la partie quadratique par des variables y_i (où $i \in \{1, ..., n\}$) tout en incorporant ce changement de coordonnées au niveau des contraintes. Bien entendu le nombre de variables (ainsi que le nombre de contraintes) augmente et est au pire des cas égale à $2n$, néanmoins cette transformation possède toutes les propriétés demandées.

3.3.2 Changement de coordonnées

Le changement de coordonnées serait alors le suivant : $\mathbf{y} = \mathbf{Rx}$ où $R = (E^t_{n-1})^{-1}...(E^t_2)^{-1}(E^t_1)^{-1}$. Nous conservons par contre les variables initiales $\mathbf{x_i}$ ($\forall i = 1, ..., n$) puisque nous gardons intacts les termes linéaires, ainsi que les contraintes dépendant de ces variables. Ce changement de variables transforme le problème $(QMKP)$ en un problème séparable équivalent dont la formulation est la suivante :

$$(QMKP_{x,y}) \begin{cases} \max \; g(x,y) = c^t x - \frac{1}{2} y^t D y \\ s.c \left| \begin{array}{l} Ax \leq b \\ Rx = y \\ 0 \leq x \leq u \quad entiers \\ 0 \leq y \leq Ru \end{array} \right. \end{cases}$$

où D est une matrice diagonale constituée des pivots de Gauss.

3.3.3 Application à notre exemple

Revenons à notre exemple et appliquons notre changement de variables partiel.

Le déroulement de cette transformation est identique à la deuxième transformation jusqu'à l'étape concernant le changement de variables.

Ainsi, nous effectuons toujours une décomposition de Gauss sur la partie quadratique $x^t Q x$ où Q est égale à :

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 15 & 1 \\ 1 & 17 \end{pmatrix}$$

Après application de l'algorithme de décomposition de Gauss sur la matrice Q on remplace le terme quadratique comme précédemment par :

$${}^t x E_1^{-1} ... E_{n-1}^{-1} \; D \; \underbrace{(E^t_{n-1})^{-1} ... (E^t_1)^{-1} x}_{y}$$

Nous posons alors $y_1 = x_1 + \frac{1}{15} x_2$ et $y_2 = x_2$.

Par contre, cette fois-ci nous faisons apparaître la nouvelle variable y_1 relative à la transformation du terme quadratique mais nous conservons les variables initiales correspondantes au terme linéaire. Nous insérons également le changement de coordonnées au niveau de l'ensemble des contraintes. Ainsi, dans le pire des cas, cette transformation voit apparaître n variables et n contraintes supplémentaires.

Le nouveau problème est alors le suivant :

$$(QP_{xy}) \begin{cases} \max \; g(x,y) = 69x_1 + 71x_2 - 15y_1^2 - \frac{254}{15}x_2^2 \\ s.c \left| \begin{array}{ll} 81x_1 + 50x_2 \leq 61 & \\ 17x_1 + 2x_2 \leq 105 & \\ x_1 + \frac{1}{15}x_2 - y_1 = 0 & \\ 0 \leq x_1 \leq 3 & x_1 \textit{ entier} \\ 0 \leq x_2 \leq 2 & x_2 \textit{ entier} \\ 0 \leq y_1 \leq \frac{47}{7} & \end{array} \right. \end{cases}$$

La variable y_1, comme chaque variable y_i, peut prendre un nombre fini de valeurs déterminées par le domaine des variables x_i et de la contrainte $x_1 + \frac{1}{15}x_2 - y_1 = 0$. Le nombre de valeurs possibles, est en particulier pour y_1, égale à $|X_1| \times |X_2|$. En général, chaque variable y_i peut prendre $\prod_i |X_i|$ valeurs possibles. Ce nombre peut être très grand. Néanmoins, lorsque nous résoudrons le problème (QP_{xy}) au moyen d'une méthode énumérative, l'énumération implicite ne portera que sur les variables x et non sur les variables y qui resteront libres.

De plus, cet exemple comporte une particularité $y_2 = x_2$. Ainsi, nous conservons la variable initiale x_2 et nous ne rajoutons pas une deuxième nouvelle variable y_2.

Ici, les valeurs $Z[QP_{xy}]$ et $Z[QP_x]$ sont égales à 54 et les valeurs optimales des problèmes relâché continûment sont égales aussi.

3.3.4 Conclusion concernant cette transformation

(1) *Si* (QP_x) est convexe *alors* (QP_{xy}) est convexe (cf. raisonnement transformation 2).

(2) Les problèmes (QP_x) et (QP_{xy}) sont équivalents

   (a) Leurs valeurs optimales sont égales, le problème d'erreur d'arrondi n'apparaît pas.

   (b) *Si* (QP_x) est un problème en variables entières *alors* (QP_{xy}) gère également des variables entières et non discrètes.

Nous avons ainsi éliminé les difficultés liées aux deux premières transformations. Il reste néanmoins une dernière propriété très importante à laquelle doit répondre la transformation choisie : la possibilité d'appliquer la méthode de calcul de notre majorant développée dans [QST06] sur laquelle repose notre algorithme de *branch-and-bound*, $B\&BSEP$.

Reprenons brièvement les étapes nécessaires au calcul de notre majorant :

(1) linéarisation par morceaux de la fonction objectif du problème initial $(QMKP)$ afin d'obtenir un problème linéarisé en variables 0-1 (MKP) ;

(2) résolution de la relaxation continue de (MKP) et récupération de la solution duale optimale w^* ;

(3) agrégation des m contraintes initiales de (MKP) à l'aide de w^* ;

(4) résolution en variables 0-1 (et non en continu) du problème agrégé afin d'obtenir notre majorant $Z[KP, w^*]$.

Revenons à notre exemple (le problème (QP_{xy}) obtenu à l'aide de la transformation 3) et effectuons les étapes successives nécessaires au calcul du majorant afin de lever le voile sur notre interrogation.

Etape 1 : Le problème linéarisé

Le problème (QP_{xy}) est donc un problème quadratique convexe séparable en variables entières. Il se présente sous la forme suivante :

$$(QP_{xy}) \left\{ \begin{array}{l} \max \ g(x,y) = \sum_{i_x=1}^{n} g_i(x_i) + \sum_{i=1}^{n} h_i(y_i) \\ = \max g_1(x_1) + g_2(x_1) + h_1(y_1) \\ s.c \left| \begin{array}{ll} 81x_1 + 50x_2 \leq 61 & \\ 17x_1 + 2x_2 \leq 105 & \\ x_1 + \frac{1}{15}x_2 - y_1 = 0 & \\ 0 \leq x_1 \leq 3 & x_1 \ entier \\ 0 \leq x_2 \leq 2 & x_2 \ entier \\ 0 \leq y_1 \leq \frac{47}{7} & \end{array} \right. \end{array} \right.$$

où $g_1(x_1) = 69x_1$, $g_2(x_2) = 71x_2 - \frac{254}{15}x_2^2$ et $h_1(y_1) = -15y_1^2$. Chaque fonction $g_i(x_i)$ et $h_i(y_i)$ $(i = 1, ..., n)$ est soit une fonction linéaire (i.e. variable relative au terme linéaire conservée, ici x_1) soit quadratique en termes carrés (i.e. relative à une nouvelle variable, ici y_1, ou bien à une ancienne variable dont le terme carré ne disparaît pas en fonction d'une particularité du problème, ici x_2). Les variables prennent leurs valeurs dans les ensembles suivants :

$x_1 \in X_1 = \{0, 1, 2, 3\}$, $x_2 \in X_2 = \{0, 1, 2\}$, $y_1 \in Y_1 = \{0, \frac{1}{15}, \frac{2}{15}, 1, \frac{16}{15}, \frac{17}{15}, 2, \frac{31}{15}, \frac{32}{15}, 3, \frac{46}{15}, \frac{47}{15}\}$.

Remarque 21 *Ici la nouvelle variable y_1 peut prendre $|X_1| \times |X_2| = 12$ valeurs discrètes. De plus, comme $x_2 = y_2$ alors $h_2(y_2) = 0$, ce qui est bien entendu un cas particulier.*

Traitement des variables initiales. Nous traitons les **variables initiales**, c'est-à-dire les x_i dans un premier temps. Ces dernières sont des variables entières ainsi nous pouvons les traiter comme dans [QST07] :

- nous effectuons un développement direct des variables x_i,c'est-à-dire que nous remplaçons chaque variables entières par une somme de variables 0-1 de la manière suivante : $\mathbf{x_i = \sum_{k=1}^{u_i} z_{ik}}$ avec $z_{ik} \in \{0, 1\}$ et u_i est la borne correspondante à la variable entière x_i.
- nous ne procédons pas à une interpolation des parties du type $c_i x_i$ puisqu'elles sont déjà linéaires, seules une ré-écriture des variables entières en variables 0-1 est nécessaire.
- les parties quadratiques fonctions des x_i sont de la forme $c_i x_i - d_i x_i^2$, bien connues. Ainsi, nous établissons la linéarisation par morceaux, entre chaque point de rupture entier, $1, 2, ..., u_i$, comme auparavant (cf. [QST06]). Notons qu'ici l'exemple présente un cas particulier du fait que $y_2 = x_2$ d'où l'apparition d'une forme quadratique diagonale dépendant de x_2. En pratique, les fonctions $g_i(x_i)$ seront déjà linéaires de la forme $c_i x_i$, seul un développement direct des variables sera nécessaire.

La fonction $\mathbf{g_1(x_1)}$ est alors remplacée par $\mathbf{l_1(z_{1k})} = \sum_{k=1}^{u_1} s_{1k} z_{1k} = \mathbf{69z_{11} + 69z_{12} + 69z_{13}}$.
On a bien $g_1(k) = l_1(k)$ pour tout $k_x \in \{0, 1, 2, 3\}$.
Il en est de même pour $\mathbf{g_2(x_2)}$ qui est remplacée par $\mathbf{l_2(z_{2k})} = \sum_{k=1}^{u_2} s_{2k} z_{2k}$ où $s_{2k} = g_2(k - 1) - g_2(k)$ et $g_2(k) = l_2(k)$ pour tout $k \in \{0, 1, 2\}$.
On obtient alors $\mathbf{l_2(z_{2k}) = 54.06z_{21} + 20.2z_{22}}$.

Traitement des nouvelles variables y_i pour $i = 1, ...n$ dans le pire des cas. Les **nouvelles variables** y_i issues du changement de variables sont gérées différemment en raison de leur caractère discret. En effet, le développement direct utilisé pour les variables x_i dépend du caractère entier de ces variables.

Nous utilisons alors le développement suivant :

$$y_i = \sum_{q=1}^{|X_1| \times |X_2| - 1} t v_{iq} \tag{13}$$

avec $t \in Y_1$ et $q = \{1, 2, ..., |X_1| \times |X_2| - 1\}$, $\mathbf{v_{iq} \in \{0, 1\}}$ et l'ajout de la contrainte :

$$\sum_{q=1}^{|X_1| \times |X_2| - 1} v_{iq} \leq 1 \tag{14}$$

Ainsi, y_1 est remplacée par

$$\sum_{q=1}^{|X_1|\times|X_2|-1} tv_{1q},\ t \in Y_1 \tag{15}$$

et $h_1(y_1)$ est alors remplacée par

$$\sum_{q=1}^{|X_1|\times|X_2|-1} \overline{s}_{1q}v_{1q} \tag{16}$$

où $\overline{s}_{1q} = h_1(t)$ pour tout $t \in Y_1$ et $q \in \{1, 2, ..., |X_1| \times |X_2| - 1\}$.

Remarque 22 *Nous pouvons également appliquer cette linéarisation aux variables initiales entières x_i. En effet, les valeurs entières prises par les variables x_i sont des valeurs discrètes particulières. Cependant, lorsque toutes les variables sont entières, il est plus avantageux d'utiliser un développement direct des variables ne nécessitant alors aucun ajout de contraintes.*

Ainsi, $\mathbf{h_1(y_1)}$ est remplacée par $\bar{l}_1(v_{1q}) = -0.066667v_{11} - 0.26667v_{12} - 15v_{13} - 17.06667v_{14} - 19.26667v_{15} - 60v_{16} - 64.06667v_{17} - 68.26667v_{18} - 68.266667v_{19} - 135v_{1,10} - 141.06667v_{1,11}$.

Nous illustrons ce développement direct avec ajout de contraintes, de la variable y_1 à l'aide de la figure 5.1.

Le problème linéarisé équivalent (en variables 0-1) est alors le suivant :

$$(LINEA)\left\{\begin{array}{l} \max\ L(z,v) = 9z_{11} + 69z_{12} + 69z_{13} + 54.06z_{21} + 20.2z_{22} \\ -0.066667v_{11} - 0.26667v_{12} - 15v_{13} - 17.06667v_{14} - 19.26667v_{15} \\ -60v_{16} - 64.06667v_{17} - 68.26667v_{18} - 68.266667v_{19} - 135v_{1,10} \\ s.c \left| \begin{array}{l} c1 : 81(z_{11} + z_{12}) + 50(z_{21} + z_{22}) \leq 61 \\ c2 : 17(z_{11} + z_{12}) + 2(z_{21} + z_{22}) \leq 105 \\ c3 : (z_{11} + z_{12}) + \frac{1}{15}(z_{21} + z_{22}) - (\frac{1}{15}v_{11} + \frac{2}{15}v_{12} + 1v_{13} + \frac{16}{15}v_{14} + \frac{17}{15}v_{15} + 2v_{16} \\ +\frac{31}{15}v_{17} + \frac{32}{15}v_{18} + 3v_{19} + \frac{46}{15}v_{1,10} + \frac{47}{15}v_{1,11}) = 0 \\ c4 : v_{11} + v_{12} + v_{13} + v_{14} + v_{15} + v_{16} + v_{17} + v_{18} + v_{19} + v_{1,10} + v_{1,11} - 1 \leq 0 \\ \textit{toutes les variables sont binaires} \end{array} \right. \end{array}\right.$$

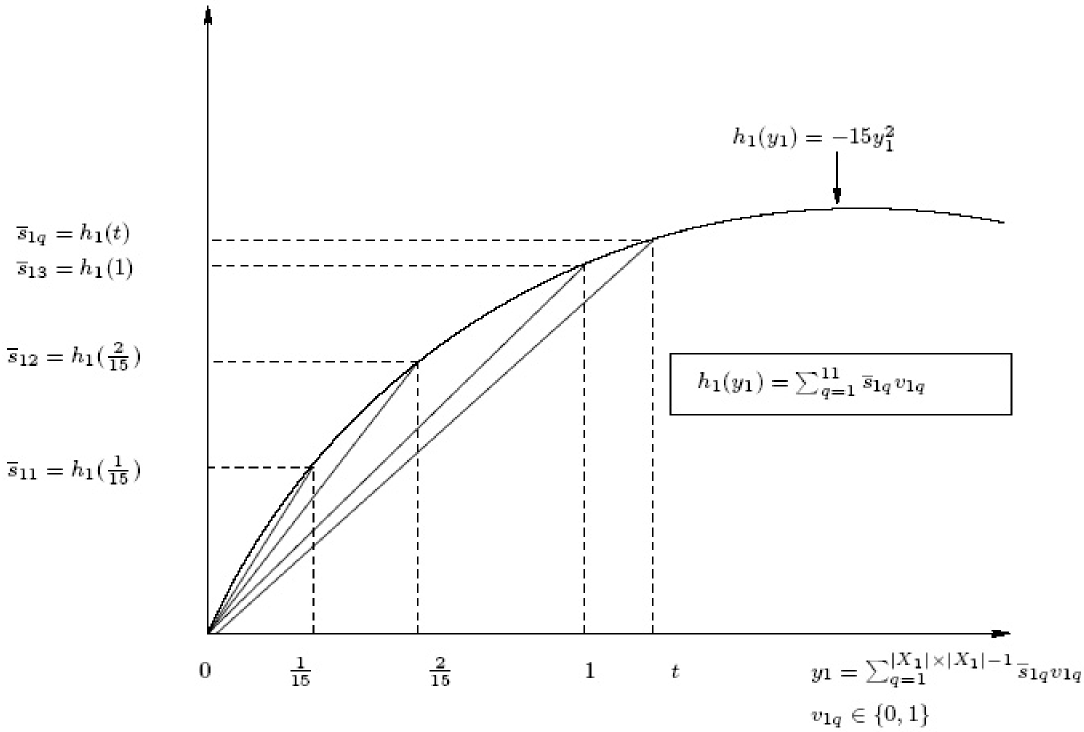

FIG. 1. Linéarisation de la fonction $h_1(y_1)$

On obtient alors $Z[LINEA] = Z[QP_{xy}] = 54 = Z[QP_x]$ et $Z[\overline{LINEA}] = 61.98 \leq Z[\overline{QP_x}] = 62.87$.

Nous remarquons que dans le contexte de cet exemple, la valeur optimale du problème linéarisé relâché continûment est plus proche de l'optimum du problème équivalent et par conséquent du problème initial (QP_x) que ne l'est la valeur optimale de la relaxation continue de ce dernier. Nous pouvons généraliser ce résultat en remarquant que la solution optimale du problème $(\overline{LINEA})$ est réalisable pour le problème $(\overline{QP_x})$.

Etape 2 : le problème agrégé

Cette deuxième étape consistait anciennement à résoudre la relaxation du problème linéarisé afin d'obtenir la solution duale optimale. Celle-ci constituait alors le vecteur d'agrégation optimale w^* (cf. proposition 3.1) nécessaire à la combinaison des contraintes initiales. Dans ce contexte nous pouvons montrer qu'un vecteur d'agrégation est obtenu en ne considérons que les contraintes de sac-à-dos initiales (ici ce sont les contraintes c_1 et c_2).

Dans ce contexte, une manière heuristique de déterminer un vecteur d'agrégation consiste à résoudre le dual du problème relâché continûment $(\overline{LINEA})$. Notons w^* comme solution optimale. Puis, comme nous l'avons précisé précédemment nous n'agrégeons que les contraintes de sac-à-dos, par conséquent nous ne conservons que les deux premières coordonnées du vecteur w^* pour former notre vecteur d'agrégation $\overline{w}^*$ dont la valeur est ici égale à $\overline{w}^* = (0.641975, 0)$. On obtient alors un autre programme linéaire continu dont la valeur optimale est supérieure ou égale à celle du problème $(\overline{LINEA})$. Il faut noter que le nouveau problème agrégé n'est plus un sac-à-dos toutefois il reste linéaire soumis à des contraintes linéaires de type égalité simples à gérer.

La dernière étape consiste à résoudre le nouveau problème agrégé en variables 0-1 et non plus en continu afin d'obtenir notre majorant dont la valeur, concernant notre exemple, est égale à 54. Cette valeur dans ce cas particulier est exactement égale à la valeur optimale du problème transformé (QP_{xy}). Cette égalité, heureuse ici, est une conséquence de la valeur de $\overline{w}^*$ qui a sa deuxième composante nulle.

En conclusion, nous pouvons appliquer notre méthode de calcul de majorant au problème obtenu après la transformation choisie. Toutefois, nous avons été contraints d'adapter cette méthode suivant les particularités induites par notre transformation, à savoir le caractère discret des nouvelles variables et l'ajout de contraintes d'égalité.

4 Un algorithme exact pour $(QMKP)$ non séparable

Nous présentons dans cette section un algorithme de *branch-and-bound* pour résoudre le problème $(QMKP)$ dont la fonction économique est non séparable. Ce dernier repose en particulier sur une transformation du problème initial en un problème séparable équivalent. Comme nous l'avons présenté sur un simple exemple dans la section précédente, ce changement de coordonnées utilise la méthode du pivot de Gauss pour rendre diagonale la matrice représentant le terme quadratique de la fonction économique. Une fois notre problème équivalent obtenu, nous lui appliquons notre algorithme de *branch-and-bound*, développé dans [QST07], moyennant bien entendu quelques adaptations.

Nous présentons dans cette section successivement la transformation du problème initial non séparable en un problème séparable et l'adaptation que nous suggérons afin d'être en mesure d'utiliser notre méthode de calcul de majorant. Enfin, nous présentons notre algorithme de résolution exacte.

Rappelons la forme du problème du multi-sac-à-dos quadratique en variables entières que nous souhaitons résoudre à l'optimum :

$$(QMKP)\quad \begin{cases} \max\ \ f(x) = c^t x - \frac{1}{2} x^t Q x \\ s.c \left| \begin{array}{l} Ax \leq b \\ 0 \leq x \leq u\ x\ entier \end{array} \right. \end{cases}$$

où

- Le vecteur c est de dimension n et ses coefficients c_i sont positifs ou nuls.
- La matrice Q est *symétrique définie positive* de dimension (n, n).
- La matrice des contraintes A est de dimension (m, n) et ses coefficients a_{ji} sont positifs ou nuls. On appelle ces contraintes des *contraintes de capacité.*
- Le vecteur b, de dimension m, est à coordonnées, b_j, positives ou nulles. Ce vecteur est appelé *membre de droite des contraintes.*
- Le vecteur x est de dimension n et ses coordonnées x_i sont entières et bornées supérieurement par un entier u_i $(i = 1, .., n)$.

4.1 Transformation du problème non séparable en un problème séparable

Comme nous l'avons présenté précédemment sur un simple exemple, la première étape de la transformation consiste en l'application de l'algorithme du pivot de Gauss sur la matrice Q.

A la fin de cet algorithme, nous pouvons remplacer la matrice Q par le produit de matrices suivant :

$$Q = (E_{n-1}...E_1)^{-1} D (E_1^t...E_{n-1}^t)^{-1} \tag{17}$$

Ainsi le terme quadratique initial $x^t Q x$ est remplacé par :

$$x^t (E_{n-1}...E_1)^{-1} D (E_1^t...E_{n-1}^t)^{-1} x \tag{18}$$

Nous effectuons alors le changement de coordonnées suivant :

$$y = (E_1^t...E_{n-1}^t)^{-1} x \tag{19}$$

Cependant nous conservons les variables x initiales relatives au terme linéaire $c^t x$. Par conséquent nous gardons également les contraintes du type $Ax \leq b$ et $0 \leq x \leq u$.

Nous ajoutons par contre des contraintes supplémentaires, fonction des nouvelles variables y, qui sont de la forme :

$$y = (E_1^t ... E_{n-1}^t)^{-1} x \tag{20}$$

Ainsi, le problème que nous souhaitons résoudre à l'optimum, se présente maintenant sous la forme d'un programme quadratique en variables entières, qui est le suivant :

$$(QMKP_{x,y}) \begin{cases} \max \ f(x,y) = c^t x - y^t D y = \sum_{i=1}^n c_i x_i + h_i(y_i) \\ s.c \left| \begin{array}{l} Ax \leq b \\ Rx = y \\ 0 \leq x \leq u \quad entiers \\ 0 \leq y \leq Ru \end{array} \right. \end{cases}$$

où D est une matrice diagonale constituée des pivots de Gauss et $R = (E_{n-1}^t)^{-1} ... (E_2^t)^{-1} (E_1^t)^{-1}$.

Remarque 23 *Le nombre de variables de $(QMKP_{xy})$ est, au pire des cas, égale à $2n$. En effet, nous conservons les n variables initiales x_i auxquelles nous ajoutons n nouvelles variables y_i. De plus, le nombre de contraintes augmente également, il est au pire des cas, égale à $m + n$.*

Nous remarquons que le problème équivalent que nous traitons maintenant n'est pas exactement un problème de multi-sac-à-dos quadratique en variables entières. En effet, les contraintes ne sont plus uniquement des contraintes de sac-à-dos mais aussi des contraintes d'égalité. Il est néanmoins possible d'adapter notre algorithme de *branch-and-bound*, $B\&BSEP$, développé dans [QST07] pour résoudre le nouveau problème $(QMKP_{xy})$.

Notre méthode $B\&BSEP$ (cf. [QST07]) repose essentiellement sur le calcul d'un bon majorant de la valeur optimale de la fonction économique de $(QMKP)$ séparable. Ce dernier nécessite plusieurs étapes : la linéarisation par morceaux de la fonction objectif, l'agrégation des contraintes initiales et la résolution du problème agrégé résultant en variables 0-1. Nous reprenons ces étapes, en mettant en relief les adaptations nécessaires pour le calcul de ce majorant pour notre nouveau problème, dans le paragraphe suivant.

4.2 Calcul du majorant

Comme nous venons de le préciser, notre calcul de majorant nécessite trois étapes successives : la linéarisation par morceaux de la fonction objectif, l'agrégation des contraintes initiales et la résolution du problème agrégé résultant en variables 0-1. Établissons chacune de ces étapes par rapport au problème $(QMKP_{xy})$.

4.2.1 Linéarisation par morceaux

Initialement (cf. [QST06]) la linéarisation d'une fonction quadratique séparable à variables entières consiste à écrire chaque variable entière, x_i $\forall i = 1, ..., n$, comme une somme de variables 0-1 puis à remplacer chaque partie quadratique de la fonction économique, de la forme $c_i x_i - d_i x_i^2$ par une somme de fonctions linéaires.

Dans le cas où le problème traité est $(QMKP_{xy})$, les variables de ce dernier ne sont pas toutes entières. En effet, les variables initiales, x_i, sont **entières** (variable x) mais les variables supplémentaires, y_i sont **discrètes**. Le caractère discret de ces nouvelles variables n'est pas un obstacle lorsque l'on résout directement le problème quadratique $(QMKP_{xy})$. Par contre, pour être en mesure de ré-écrire les variables y_i en variables 0-1 ce fait ne peut être ignoré. Par conséquent, nous traitons la linéarisation des variables suivant leurs natures.

Les **variables entières**, x_i, relatives au terme linéaire de la fonction économique, sont traitées de la même manière que lorsque le problème initial est séparable en variables entières (cf. [QST06]). Il suffit d'effectuer un développement direct des variables entières puisque comme nous venons de le préciser les termes $c_i x_i$ sont déjà linéaires. On remplace alors les variables x_i par l'expression : $\sum_{k=1}^{u_i} z_{ik}$, $\forall i = 1, ..., n$ où $z_{ik} \in \{0, 1\}$. Ainsi, les termes linéaires $c_i x_i$ sont remplacés par $c_i \sum_{k=1}^{u_i} z_{ik}$, $\forall i = 1, ..., n$.

Remarque 24 *Il est possible qu'au cours de la mise en œuvre de cette transformation, certaines nouvelles variables y_i soient égales à l'une des variables initiale x_i. Dans ce cas, nous conservons la variable x_i et la partie de la fonction objective dépendante de x_i sera alors de la forme $c_i x_i$. Une fois le développement direct des variables x_i établi, on effectue alors une interpolation linéaire des parties quadratiques $c_i x_i - d_i x_i^2$, de façon similaire à celle effectuée dans [QST06].*

Concernant les **variables discrètes**, nous ne pouvons pas utiliser le développement direct des variables qui nécessite que ces dernières soient entières. Afin de contourner cette difficulté nous proposons d'employer un autre développement appelé *développement direct avec ajout de contraintes*. Les variables y_i, $\forall i = 1, ..., n$, sont remplacées par l'expression suivante :

$$y_i = \sum_{t \in Y_i, q}^{\prod_{i \in I_i} |X_i| - 1} t v_{iq} \; \forall i = 1, ..., n \tag{21}$$

où Y_i correspond à un ensemble fini de valeurs discrètes résultant du produit de la matrice R, produit des matrices d'élimination de Gauss successives, et du vecteur x. Le cardinal de cet ensemble correspond au produit des bornes sur les variables initiales x_i dont est fonction la nouvelle variable y_i. L'indice q prend ses valeurs dans un ensemble fini de valeurs entières de la forme $\{1, 2, ..., \prod_i |X_i| - 1\}$. L'ensemble d'indices I_i correspond aux indices des variables dont dépend chaque nouvelle variable y_i.

Ce développement des variables y_i nécessite l'ajout des n contraintes suivantes :

$$\sum_{q=1}^{\prod_{i\in I_i}|X_i|-1} v_{iq} \leq 1,\ i = 1, ...n \tag{22}$$

Une fois la procédure de ré-écriture des variables y_i effectuée, nous remplaçons chaque partie quadratique, $h_i(y_i)$, de la fonction économique, dépendant de ces variables, par une fonction linéaire, $\bar{l}_i(v_{iq})$, de la forme :

$$\bar{l}_i(v_{iq}) = \sum_{q=1}^{\prod_{i\in I_i}|X_i|} \overline{s}_{iq} v_{iq},\ t \in Y_1 \tag{23}$$

avec $\overline{s}_{iq} = h_i(t)$ et I_i est un ensemble fini d'indices. Ces indices correspondent aux indices des variables dont dépend chaque nouvelle variable y_i.

Le problème $(QMKP_{xy})$ est alors équivalent au problème linéaire en variables 0-1 qui se présente sous la forme suivante :

$$(LINEA) \begin{cases} \max\ L(z,v) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{u_i} s_{ik}z_{ik} + \sum_{i=1}^{n}\sum_{q=1}^{\prod_{i\in I_i}|X_i|} \overline{s}_{iq}v_{iq} \\ s.c \left| \begin{array}{ll} A\sum_{k=1}^{u_i} z_{ik} \leq b & i = 1, ..., n \\ R\sum_{k=1}^{u_i} z_{ik} = \sum_{q=1}^{\prod|X_i|-1} tv_{iq} & t \in Y_i \\ \sum_{q=1}^{\prod|X_i|-1} v_{iq} \leq 1 & i = 1, ...n \\ z_{ik}, v_{iq} \in \{0,1\} & \end{array} \right. \end{cases}$$

où $s_{ik} = c_i$, $\forall k = 1, ..., u_i$ et $\overline{s}_{iq} = h_i(t)$, $\forall t \in Y_i$.

Remarque 25 *Le nombre de variables du problème linéarisé augmente considérablement par rapport au problème linéarisé que nous obtenions dans le cadre séparable. En effet, ici le nombre de variables du problème $(LINEA)$ sera au pire des cas égale à $\sum_i^n u_i + n\prod_i |X_i|$. Or lorsque le le problème $(QMKP)$ était initialement séparable le nombre de variables du problème linéarisé était égale à $\sum_{i=1}^n u_i$. Il est toutefois possible de réduire le nombre de variables y_i en remarquant que chacune d'entre elles ne peut pas dépasser la valeur $\frac{c_i}{2d_i}$ (que l'on peut facilement calculer). D'autre part, lorsque l'on applique notre branch-and-bound au problème $(QMKP_{xy})$, l'énumération implicite ne porte que sur les n variables x_i. Néanmoins, la taille des problèmes* *linéarisés permettant de calculer notre majorant reste très importante et constituera en pratique une limite à la taille des instances pouvant être résolues.*

Le problème $(LINEA)$ est équivalent, lorsqu'on le résout en variables 0-1, au problème $(QMKP_{xy})$ (issu de la transformation) qui est lui même équivalent au problème initial $(QMKP)$. Ainsi l'égalité suivante est vérifiée :

$$Z[QMKP] = Z[QMKP_{xy}] = Z[LINEA] \tag{24}$$

Nous pouvons également établir l'inégalité suivante :

$$Z[\overline{LINEA}] \leq Z[\overline{QMKP_{xy}}] = Z[\overline{QMKP}] \tag{25}$$

Ainsi à ce stade du raisonnement nous avons un majorant de la valeur optimale de $(QMKP_{xy})$ et par conséquent de $(QMKP)$, plus proche de celle-ci que la valeur optimale de $(\overline{QMKP_{xy}})$ et $(\overline{QMKP})$.

D'autre part, nous disposons d'une première voie de résolution du problème $(QMKP)$ initial via la résolution du problème linéarisé équivalent au problème $(QMKP_{xy})$ qui est lui même équivalent à $(QMKP)$.

4.2.2 Le problème agrégé

Dans [QST06], nous procédions à l'agrégation des m contraintes du problème linéarisé à l'aide du vecteur correspondant à la solution optimale du dual de ce problème relâché continûment. Nous avons montré que ce vecteur était optimal.

Dans ce nouveau contexte, nous proposons pour le moment une procédure heuristique de calcul d'un vecteur d'agrégation. Nous suggérons d'agréger uniquement les m contraintes initiales, de type inférieur ou égale, et de conserver les contraintes d'égalité. Pour ce faire, nous récupérons les m premières coordonnées du vecteur formé par les composantes de la solution optimale du problème dual de $(\overline{LINEA})$ pour constituer un vecteur d'agrégation $\overline{w}^*$.

Le problème agrégé est alors de la forme suivante :

$$(AGREG)\begin{cases}\max\ L(z,v) & \\ s.c & \left|\begin{array}{l}\overline{w}^* Az \leq \overline{w}^* b\\ Rz - v = 0_{\mathbb{R}^n}\\ \sum_{q=1}^{\prod_i |X_i|-1} v_{iq} \leq 1\ i=1,...n\\ z,v\in\{0,1\}^n\end{array}\right.\end{cases}$$

Le problème $(\overline{AGREG})$ constitue une relaxation du problème $(\overline{LINEA})$, ainsi l'inégalité suivante est vérifiée :

$$Z[\overline{LINEA}] \leq Z[\overline{AGREG}] \tag{26}$$

Une fois, ce vecteur d'agrégation obtenu, nous résolvons le problème $(AGREG)$ en variables 0-1 et non plus en continu. La valeur optimale de ce problème constitue alors un majorant du problème $(QMKP_{xy})$.

4.3 Une méthode exacte pour résoudre $(QMKP)$ non séparable

Résumons les étapes que nous effectuons afin de résoudre à l'optimum le problème de multi-sac-à-dos quadratique en variables entières dont la fonction économique est non séparable $(QMKP)$.

(1) Nous transformons le problème $(QMKP)$ en un problème séparable $(QMKP_{xy})$, à l'aide de l'algorithme du pivot de Gauss.
(2) Nous traitons en définitive le problème $(QMKP_{xy})$.
(3) Nous appliquons alors une adaptation de notre algorithme $B\&BSEP$ au problème $(QMKP_{xy})$ pour obtenir l'optimum entier du problème initial $(QMKP)$ (non séparable).

Nous avons établi un calcul de majorant de la valeur optimale de la fonction économique de $(QMKP_{xy})$, dans la section précédente. D'autre part, nous avons besoin d'une solution admissible pour débuter notre algorithme de *branch-and-bound*. Or, nous proposions une heuristique dans [QST06] pour calculer une solution admissible de $(QMKP)$ (séparable). Cette dernière peut également être employée dans ce nouveau contexte.

Ainsi, nous proposons d'insérer ces deux méthodes dans une procédure de type *branch-and-bound* afin de résoudre à l'optimum le problème $(QMKP)$ (non séparable) via le problème séparable équivalent $(QMKP_{xy})$. Nous résumons cette formulation à l'aide de la figure 5.2.

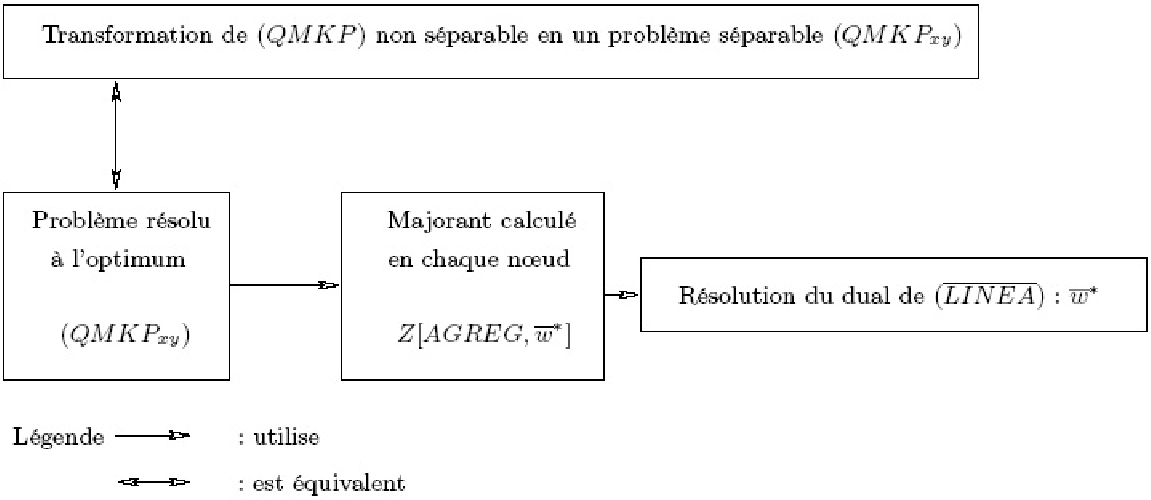

FIG. 2. Notre approche pour résoudre $(QMKP)$ non séparable

5 Conclusion et perspectives

Nous avons proposons dans ce rapport une approche théorique pour résoudre un problème de multi-sac-à-dos quadratique non séparable en variables entières $(QMKP)$. Celle-ci est basée sur le traitement d'un nouveau problème qui est équivalent à $(QMKP)$, noté $(QMKP_{xy})$. Nous avons établi le problème $(QMKP_{xy})$ à l'aide de l'algorithme du pivot de Gauss appliqué au problème initial suivi d'un changement de coordonnées. L'intérêt de cette transformation réside dans le fait que nous traitons en définitive un problème séparable. Or, nous avons élaboré dans [QST07] une méthode exacte pour résoudre $(QMKP)$ dont la fonction économique est séparable. Nous avons alors naturellement adapté notre approche pour résoudre $(QMKP_{xy})$ et par conséquent $(QMKP)$.

Notre approche s'avère originale du fait qu'aucune méthode existante ne propose la résolution du problème $(QMKP)$ (non séparable) à l'aide d'un problème séparable équivalent. En effet, les méthodes proposées dans la littérature pour ce problème contournent la difficulté liée à la non séparabilité de la fonction objectif en fournissant un majorant de la valeur optimale du problème initial, calculé via un problème de multi-sac-à-dos quadratique séparable en variables entières (cf. [Dje97]).

Par ailleurs, comme le problème $(QMKP_{xy})$ est séparable, il est possible de le transformer en un programme linéaire en variables 0-1 $(LINEA)$, à l'aide d'un développement direct des variables discrètes avec ajout de contraintes. Le problème $(LINEA)$ est équivalent au problème $(QMKP_{xy})$ et par conséquent il est équivalent au problème initial $(QMKP)$.

De plus, le problème séparable $(QMKP_{xy})$ équivalent au problème initial $(QMKP)$, est convexe ce qui rend possible l'utilisation d'un logiciel commercial tel que ILOG-Cplex9.0 pour le résoudre de façon optimale.

En conclusion, nous disposons alors de quatre voies de résolution du problème initial $(QMKP)$: notre algorithme $B\&BSEP$ adapté à $(QMKP_{xy})$, la résolution du problème $LINEA$, la résolution du problème $(QMKP_{xy})$ à l'aide d'un logiciel commercial et enfin a résolution du problème $(QMKP)$ à l'aide d'un logiciel commercial.

Il sera très intéressant de mettre en œuvre ces différentes voies de résolution du problème $(QMKP)$ afin de déterminer, en s'appuyant sur des résultats numériques, l'approche la plus adéquate pour déterminer l'optimum du problème initial $(QMKP)$.

Références

[Dje97] M. Djerdjour. An enumerative algorithm framework for a class of nonlinear intger programming problems. *European Journal of Operational Research*, 101 :104–121, 1997.

[QST06] D. Quadri, E. Soutif, and P. Tolla. Uppers bounds for large scale integer quadratic multidimensional knapsack problems. *submited to International Journal of Operations Research*, 2006.

[QST07] D. Quadri, E. Soutif, and P. Tolla. A branch-and-bound algorithm to solve large scale integer quadratic multi-knapsack problems. *SOFSEM 2007*, LNCS 4362 :456–464, 2007.