УДК 519.853

А. И. Косолап, канд. физ.-мат. наук

Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара, г. Днепропетровск

ОБОБЩЕНИЕ СИМПЛЕКС-МЕТОДА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПОЛУОПРЕДЕЛЕННОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Предлагается обобщение симплекс-метода для решения задач полуопределенной оптимизации на основе последовательного представления конуса полуопределенных матриц суммой матриц ранга единица с положительными коэффициентами. Это позволяет свести решение исходной задачи к последовательности задач линейного программирования. Алгоритм реализован в виде компьютерной программы. Проведенные сравнительные численные эксперименты показали эффективность предложенного алгоритма.

Ключевые слова: *симплекс-метод, полуопределенная оптимизация, метод внутренней точки, функция Лагранжа, квадратичная регуляризация.*

Введение. В последние пятнадцать лет полуопределенная оптимизация является одной из наиболее важных тем теоретических и прикладных исследований. Многие сложные прикладные задачи вычислительной геометрии, квадратичной, комбинаторной и полиномиальной оптимизации, теории сетей и оптимального управления, могут быть эффективно решены посредством полуопределенной релаксации [1].

Область приложения полуопределенной оптимизации постоянно расширяется. Разработаны методы для решения этого класса задач. Широко используется прямо-двойственный метод внутренней точки [2, 3]. Однако поиск более эффективных методов для решения задач полуопределенной оптимизации продолжается [4, 5].

Искомой точкой минимума в задаче полуопределенной оптимизации является положительно полуопределенная матрица. Множество таких матриц образует выпуклый конус в пространстве всех матриц. Однако проверка положительной полуопределенности возможна только алгоритмически, что усложняет разработку эффективных алгоритмов полуопределенной оптимизации. Определение положительной полуопределенности матрицы требует поиска минимального собственного значения искомой матрицы либо определителей всех ее миноров, либо поиска минимума отношения Релея $z^T Xz/\|z\|^2$. Заметим, что количество миноров матрицы растет экспоненциально от размерности матрицы, и для матрицы порядка n число миноров равно $2^n - 1$.

Конус положительно определенных матриц можно аппроксимировать эллипсоидальным (для случая $n = 2$ конус положительно полуопределенных матриц является эллипсоидальным). Так как граничными лучами полуопределенного конуса являются полуопределенные матрицы ранга единица, то эти матрицы могут быть использованы для аппроксимации конуса эллипсоидальным конусом. Такая аппроксимация преобразует задачу полуопределенной оптимизации к линейной оптимизации на усеченном эллипсоиде. Однако число граничных лучей полуопределенного конуса бесконечно, причем каждые два из них являются соседними, поэтому получить его приемлемую эллипсоидальную аппроксимацию не представляется возможным.

Постановка задачи и анализ последних исследований. В задаче полуопределенного программирования требуется найти

$$\min\{C \bullet X \mid A_i \bullet X = b_i, X \succ 0, i = 1,...,m\}, \tag{1}$$

где X – полуопределенная матрица размера $(n \times n)$, а

$$C \bullet X = \sum \sum c_{ij} x_{ij}.$$

Двойственной к задаче (1) является следующая

$$\max\{b^T y \mid \sum_{i=1}^{m} A_i y + Z = C, Z \succ 0\}, \tag{2}$$

где матрица Z также положительно полуопределенная.

Необходимые условия экстремума имеют вид:

$$A_i \bullet X = b_i, i = 1,...,m, X \succ 0;$$

$$\sum_{i=1}^{m} A_i^T y + Z = C, Z \succ 0;$$

$$Z \bullet X = 0.$$

Задача (2) может быть решена прямо-двойственными методами внутренней точки. На каждой итерации этого метода решается система нелинейных уравнений

$$\begin{aligned} & A_i \bullet X = b_i, i = 1,...,m, X \succ 0; \\ & \sum_{i=1}^{m} A_i^T y + Z = C, Z \succ 0; \\ & Z \bullet X = \mu I. \end{aligned} \tag{3}$$

Система уравнений (3) решается методом Ньютона, где $\mu \to 0$. Для существования единственного решения задачи (3) предложено несколько условий [2] (заметим, что произведение положительно определенных матриц не является положительно определенной матрицей, поэтому последнее равенство системы (3) будет приближенным).

Для решения нелинейной системы (3) на каждой итерации метода Ньютона решается линейная система (скобками заменим индексы)

$$\begin{aligned} &-A(\Delta X) = -b + A(X); \\ &\Delta Z - A^T(\Delta y) = -Z - C + A^T(y); \\ &Z\Delta X + \Delta Z X = \mu I - ZX, \end{aligned} \tag{4}$$

где искомыми являются матрицы $\Delta X, \Delta Z$ и вектор Δy .

Найдем сначала вектор Δy из второго уравнения системы (4)

$$A^T(\Delta y) = F_2 + \Delta Z (F_2 = Z + C - A^T y). \tag{5}$$

Умножим обе части уравнения (5) слева на Z^{-1} и справа на X и умножим результат слева на матрицу A, получим

$$A \bullet (Z^{-1} A^T \Delta y X) = A \bullet (Z^{-1} F_2 X) + A \bullet (Z^{-1} \Delta Z X). \tag{6}$$

Из последнего уравнения системы (4) находим $\Delta Z X = -ZX - Z\Delta X$, которое подставим в уравнение (6), откуда получим

$$A \bullet (Z^{-1} A^T \Delta y X) = A \bullet (Z^{-1} F_2 X) + A \bullet (Z^{-1}(-ZX - Z\Delta X))$$

или

$$A \bullet (Z^{-1} A^T \Delta y X) = A \bullet (Z^{-1} F_2 X) + A \bullet (-X) + A \bullet (\Delta X).$$

Учитывая, что $A(-\Delta X) = A(X) - b,$ последнее уравнение равносильно следующему

$$A \bullet (Z^{-1} A^T \Delta y X) = A \bullet (Z^{-1} F_2 X) + b. \tag{7}$$

Уравнение (7) содержит только один неизвестный вектор $\Delta y.$ После определения этого вектора из системы (4) находим искомые матрицы

$\Delta Z = F_2 - A^T(\Delta y)$ и $\Delta X = Z^{-1} \Delta Z X - X.$

Результатом проведенных операций может быть несимметрическая матрица $\Delta X.$ Ее необходимо преобразовать к симметрической следующим образом: $\Delta X = (\Delta X + \Delta X^T)/2.$

Переход в новую точку осуществляется следующей итерационной процедурой

$$X = X + \alpha_p \Delta X; y = y + \alpha_d \Delta y; Z = Z + \alpha_d \Delta Z, \tag{8}$$

где константы α_p и α_d выбираются так, чтобы матрицы X и Z оставались положительно полуопределенными.

Рассмотренная формула симметризации матрицы X может нарушить сходимость метода Ньютона, поэтому были предложены различные модификации уравнения $ZX = \mu I$. В работе [6] предложен оператор

$$H_P(XZ) = \frac{1}{2}[PXZP^{-1} + P^{-T}Z^TX^TP^T] = \mu I,$$

который изменяет третье уравнение системы Ньютона (3) на

$$H_p(\Delta XZ + X\Delta Z) = \mu I - H_P(XZ),$$

или

$$P(\Delta XZ + X\Delta Z)P^{-1} + P^{-T}(Z\Delta X + \Delta ZX)P^T =$$
$$= \mu I - P(XZ)P^{-1} - P^{-T}(ZX)P^T.$$

Предложены различные виды матрицы P. Наиболее эффективной является матрица P, определяемая формулой NT [3]

$$P = (X^{1/2}(X^{1/2}ZX^{1/2})^{-1/2}X^{1/2})^{-1/2}$$

для которой оценка числа итераций метода внутренней точки равна $3mn^3 + 0.5m^2n^2$.

Рассмотренный алгоритм внутренней точки является эффективным для решения задач полуопределенного программирования средней размерности. Для решения задач большой размерности в последнее время предлагаются методы решения двойственной задачи с использованием расширенного лагранжиана.

Расширенный лагранжиан строится в виде [4]

$$L_r(y, X, Z) = b^Ty + X \bullet (Z + C - A^T(y)) + 0.5r \| Z + C - A^T(y) \|^2,$$

минимум которого ищется по y и Z (положительно полуопределенная матрица) при фиксированном X, затем новое значение X пересчитывается по формуле $X^{k+1} = X^k + r(Z^k + C - A^T(y^k))$. Поиск минимума лагранжиана не является простой задачей.

Метод решения и анализ полученных результатов. Рассмотрим прямую задачу полуопределенного программирования (1). Любая полуопределенная матрица может быть представлена суммой положительно определенных матриц ранга единица. Полуопределенные матрицы ранга единица образуются векторами $x^i = (x^1, \ldots, x^n)$, где первоначально компоненты вектора x^i достаточно взять равными −1, 0, 1. Тогда матрица ранга единица равна xx^T. Число всех матриц ранга единица, образованных данными векторами, достаточно большое. Обозначим эти матрицы через X_j. Будем искать решение задачи (1) в виде $X = \sum \alpha_j X_j$, где число слагаемых больше m и $\alpha \geq 0$. Тогда задача (1) преобразуется к виду

$$\min\{C \bullet \sum \alpha_j X_j \mid A_i \bullet \sum \alpha_j X_j = b_i, i = 1,\ldots,m, \alpha \geq 0\}$$

или

$$\min\{\sum \alpha_j C \bullet X_j \mid \sum \alpha_j A_i \bullet X_j = b_i, i = 1,\ldots,m, \alpha \geq 0\}. \quad (9)$$

Задача (9) является задачей линейного программирования, которая может быть решена симплекс-методом. Ее решение α^* определяет приближенное решение задачи (1) в виде

$$X = \sum \alpha_j^* X_j .$$

Для продолжения процесса минимизации необходимо в базис ввести новую положительно полуопределенную матрицу ранга единица, для которой оценка в преобразованной строке целевой функции будет отрицательной. Если такой положительно полуопределенной матрицы ранга единица нет, то будем искать поправку ранга 2 и т.д. Если не существует поправки с отрицательным значением в строке целевой функции, то текущее решение задачи (9) определяет решение задачи (1).

Обозначим через B – матрицу базисных элементов оптимального решения задачи (9). Тогда элементы нового k-го столбца матрицы условий задачи (9) будут равны $B^{-1}A_i \bullet x_k x_k^T$, а строка целевой функции будет равна $C \bullet x_k x_k^T - \sum C \bullet x_k x_k^T B^{-1} A_j \bullet x_k x_k^T$ или $(C - \sum C \bullet x_k x_k^T B^{-1} A_j) \bullet x_k x_k^T$.

Обозначим $Q = C - \sum C \bullet x_k x_k^T B^{-1} A_j$, тогда $Q \bullet x_k x_k^T = x_k^T Q x_k$ и это выражение должно быть минимальным. Если матрица Q – положительно определенная, то значение целевой функции задачи (9) не может быть уменьшено и текущее решение является оптимальным для задачи (1). Для нахождения минимума $x_k^T Q x_k$ необходимо решить задачу квадратичной оптимизации

$$\min\{x^T Qx \,|\, \| x \|^2 = q\}, \tag{10}$$

для произвольного $q > 0$. Хорошо известно, что задача (10) эффективно разрешима [6]. Воспользуемся для ее решения методом квадратичной регуляризации. Преобразуем задачу (10) к виду

$$\min\{x_{n+1} \,|\, x^T Qx + s \le x_{n+1}, \| x \|^2 = q\}, \tag{11}$$

где s выбираем таким, чтобы $x^T Qx + s \ge 0$. Далее, используя преобразование $z = Px$, где P – матрица размера $(n+1 \times n+1)$ равна

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ z_1 & z_2 & \dots & z_{n+1} \end{pmatrix},$$

задача (11) преобразуется к виду

$$\min\{\| z \|^2 \,|\, z^T Qz + s \le \| z \|^2, \| z \|^2 = q\}. \tag{12}$$

Метод квадратичной регуляризации заключается в преобразовании задачи (12) к однопараметрическому семейству задач

$$\min\{\| z \|^2 | \, z^T Qz + (r-1)\| z \|^2 + s \le d, r\| z \|^2 = d, \| z \|^2 = q\}, \quad (13)$$

где параметр $r > 0$ выбирается минимальным, при котором матрица $Q^* = z^T Qz + (r-1)I$ будет положительно определенной, а значение d необходимо определить. Решение задачи (13) может быть найдено из решения задачи

$$\max\{\| x \|^2 | \, x^T Q^* x = 1\}, \quad (14)$$

что равносильно поиску минимального собственного вектора матрицы Q^* и соответствующего собственного вектора. Заметим, что решение задачи (14) линейно зависит от правой части уравнения эллипсоида (если x – собственный вектор, то и αx – собственный вектор).

Для решения задачи (14) используем следующую итерационную процедуру.

1. Найдем точки пересечения эллипсоида задачи (14) с осями координат. Выберем из этих точек наиболее удаленную от начала координат, которую обозначим через x^0 (только одна компонента вектора x^0 отлична от нуля, например i-я).
2. Решим вспомогательную задачу

$$\max\{(x^0)^T x \,|\, x^T Q^* x = 1\}.$$

Ее решение равно

$$x = \frac{(Q^*)^{-1} x^0}{\sqrt{x^0 (Q^*)^{-1} x^0}},$$

которое обозначим через x^0. Вернемся к шагу 2.

После k итераций алгоритма будет найдено следующее решение

$$x^k = \frac{(Q^*)^{-2k} e^i}{\sqrt{q_{ii}^{-(2k-1)}}}.$$

Решение x^k будет сходиться к собственному вектору матрицы Q^*, соответствующему ее минимальному собственному значению. Это следует из того, что последовательность $\|x^k\|$ возрастает и ограничена сверху (точка x^k принадлежит границе эллипсоида).

Если выполняется условие $x^T Qx < 0,$ то значение целевой функции задачи линейного программирования (9) может быть уменьшено. В противном случае, текущее решение задачи (9) является оптимальным для задачи (1).

При неудачном выборе начальных лучей полуопределенного конуса для задачи линейного программирования может не существовать такого следующего луча, для которого решение задачи (9) будет допустимым для задачи (1). В таком случае, в качестве нового слагаемого выбираем произвольную матрицу S, для которой матрица $X = \sum \alpha_j X_j + S$ будет допустимой для задачи (1). Заменим целевую функцию задачи (9) на $E \bullet S$, где $e_{ij} = 1$, если $s_{ij} > 0$ и $e_{ij} = -1$, если $s_{ij} < 0$.

Продолжим решение задачи (9) рассмотренным симплекс-методом, дополнив ее ограничение условием $s_{ij} > 0$. Очевидно, что если решение задачи (1) не пусто, то целевая функция $E \bullet S$ обратится в нуль и будет найдено допустимое решение задачи (1). Это есть реализация метода искусственного базиса для поиска допустимого решения.

Перечислим преимущества рассмотренного симплекс-метода перед прямо-двойственными методами внутренней точки:

1. Размерность задачи, решаемой симплекс-методом равна $(n + 1)n/2$, а для внутренней точки $m + (n + 1)n$.
2. Область задач, решаемых симплекс-методом шире, так как не требуется равенства целевых функций прямой и двойственной задачи.
3. Симплекс-метод сходится за конечное число итераций, а методы внутренней точки сходятся на бесконечности.

Выводы. В работе предложен эффективный алгоритм поиска решения задач полуопределенной оптимизации, а также приведен анализ его преимуществ перед используемым прямо-двойственным алгоритмом внутренней точки. Предложенный алгоритм реализован программно. Проведены многочисленные численные эксперименты, подтверждающие полученные теоретические результаты.

Список использованной литературы:

1. Vandenberghe L. Semidefinite programming / L. Vandenberghe, S. Boyd // SIAM Review. – 1996. – Vol. 38. – P. 49–95.
2. Todd M. J. Semidefinite optimization / M. J. Todd // Acta Numerica. – 2001. – Vol. 10. – P. 515–560.
3. Todd M. J. On the Nesterov-Todd direction semidefinite programming / M. J. Todd, K. C. Toh, R. H. Tutuncu // SIAM J. on Optim. – 1998. – Vol. 8. – P. 769–796.
4. Malick J. Regularization methods for semidefinite programming / J. Malick, J. Povh, F. Rendl, A. Wiegele // SIAM J. on Optim. – 2009. – Vol. 20, 1. – P. 336–356.
5. Helmberg C. A spectral bundle method for semidefinite programming / C. Helmberg, F. Rendl // SIAM J. Optim. – 2000. – Vol.10. – P. 673–696.
6. Zhang Y. On extending some primal-dual interior-point algorithms from linear programming to semidefinite programming / Y. Zhang // SIAM J. Optim. – 1998. – Vol. 8. – P. 365–386.

7. Fortin C. Computing the local minimizers of a large and sparse trust-region subproblem / C. Fortin. – Montreal : McGill University. – 2004. – 149 p.

The author proposes generalization the simplex-method for solving the problem of semidefinite optimization. Approximation of a cone of positively semidefinite matrixes of sum matrixes of a rank unit with positive coefficients is used. It allows to reduce the solution of an initial problem to sequence of problems of linear programming. The algorithm is realised in computer software. The numerical experiments have shown the efficiency of the offered algorithm.

Key words: *simplex-method, semidefinite optimization, interior point method, function Lagrange, quadratic regularization.*

Отримано: 17.05.2010

УДК 517.443

О. М. Ленюк, канд. фіз.-мат. наук
Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, м. Чернівці

ОБЧИСЛЕННЯ НЕВЛАСНИХ ІНТЕГРАЛІВ ЗА ВЛАСНИМИ ЕЛЕМЕНТАМИ ГІБРИДНОГО ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА ФУР'Є–ЕЙЛЕРА–(КОНТОРОВИЧА–ЛЄБЄДЄВА) НА ОБМЕЖЕНІЙ СПРАВА ДЕКАРТОВІЙ ПІВПРЯМІЙ

Методом порівняння розв'язку крайової задачі для системи диференціальних рівнянь Фур'є, Ейлера та (Конторовича-Лєбєдєва) на обмеженій справа декартовій півпрямій з двома точками спряження, побудованого, з одного боку, методом функцій Коші, а, з другого боку, методом відповідного гібридного інтегрального перетворення, обчислено поліпараметричну сім'ю невласних інтегралів за власними елементами відповідного гібридного диференціального оператора.

Ключові слова: *невласні інтеграли, функції Коші, головні розв'язки, гібридне інтегральне перетворення, основна тотожність, умова однозначної розв'язності, логічна схема.*

Постановка проблеми та її аналіз. Тонкостінні елементи конструкцій композитного типу, як правило, знаходяться в короткочасовому стаціонарному режимі, на який вони виходять після стрибкоподібного температурного або силового навантаження. Вивчення їх фізико-технічних характеристик приводить до задач термомеханіки (механіки) кусково-однорідних середовищ. Практика показує, що навіть в найпростіших випадках величини, які характеризують стаці-

