

УДК: 519.85

Прямые мультипликативные методы для разреженных матриц. Квадратичное программирование

А. Б. Свириденко

ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет» филиал в г. Новороссийске,
Россия, 353922, г. Новороссийск, ул. Героев Десантников, д. 87

E-mail: roshechka@gmail.com

Получено 01.11.2017, после доработки — 07.05.2018.

Принято к публикации 08.05.2018.

Рассматривается численно устойчивый прямой мультипликативный метод решения систем линейных уравнений, учитывающий разреженность матриц, представленных в упакованном виде. Преимущество метода состоит в расчете факторов Холесского для положительно определенной матрицы системы уравнений и ее решения в рамках одной процедуры, а также в возможности минимизации заполнения главных строк мультипликаторов без потери точности результатов, причем изменения в позиции очередной обрабатываемой строки матрицы не вносятся, что позволяет использовать статические форматы хранения данных. Решение системы линейных уравнений прямым мультипликативным алгоритмом — это, как и решение с помощью LU -разложения, просто другая схема реализации метода исключения Гаусса.

Расчет факторов Холесского для положительно определенной матрицы системы и ее решение лежит в основе построения новой математической формулировки безусловной задачи квадратичного программирования и новой формы задания необходимых и достаточных условий оптимальности, которые достаточно просты и в данной работе используются для построения новой математической формулировки задачи квадратичного программирования на многогранном множестве ограничений, которая представляет собой задачу поиска минимального расстояния между началом координат и точкой границы многогранного множества ограничений средствами линейной алгебры и многомерной геометрии.

Для определения расстояния предлагается применить известный точный метод, основанный на решении систем линейных уравнений, размерность которых не выше числа переменных целевой функции. Расстояния определяются построением перпендикуляров к граням многогранника различной размерности. Для уменьшения числа исследуемых граней предлагаемый метод предусматривает специальный порядок перебора граней. Исследованию подлежат только грани, содержащие вершину, ближайшую к точке безусловного экстремума, и видимые из этой точки. В случае наличия нескольких ближайших равноудаленных вершин исследуется грань, содержащая все эти вершины, и грани меньшей размерности, имеющие с первой гранью не менее двух общих ближайших вершин.

Ключевые слова: математическое программирование, квадратичное программирование, разреженные матрицы, прямой мультипликативный алгоритм, новые математические формулировки, необходимые и достаточные условия оптимальности, квадратичная задача, линейное программирование, многомерная геометрия

UDC: 519.85

Direct multiplicative methods for sparse matrices. Quadratic programming

A. B. Sviridenko

FSEI of HPE “Kuban State University” branch in Novorossiysk,
87 Geroev Desantnikov st., Novorossiysk, 353922, Russia

E-mail: roshechka@gmail.com

Received 01.11.2017, after completion — 07.05.2018.

Accepted for publication 08.05.2018.

A numerically stable direct multiplicative method for solving systems of linear equations that takes into account the sparseness of matrices presented in a packed form is considered. The advantage of the method is the calculation of the Cholesky factors for a positive definite matrix of the system of equations and its solution within the framework of one procedure. And also in the possibility of minimizing the filling of the main rows of multipliers without losing the accuracy of the results, and no changes are made to the position of the next processed row of the matrix, which allows using static data storage formats. The solution of the system of linear equations by a direct multiplicative algorithm is, like the solution with *LU*-decomposition, just another scheme for implementing the Gaussian elimination method.

The calculation of the Cholesky factors for a positive definite matrix of the system and its solution underlies the construction of a new mathematical formulation of the unconditional problem of quadratic programming and a new form of specifying necessary and sufficient conditions for optimality that are quite simple and are used in this paper to construct a new mathematical formulation for the problem of quadratic programming on a polyhedral set of constraints, which is the problem of finding the minimum distance between the origin ordinate and polyhedral boundary by means of a set of constraints and linear algebra dimensional geometry.

To determine the distance, it is proposed to apply the known exact method based on solving systems of linear equations whose dimension is not higher than the number of variables of the objective function. The distances are determined by the construction of perpendiculars to the faces of a polyhedron of different dimensions. To reduce the number of faces examined, the proposed method involves a special order of sorting the faces. Only the faces containing the vertex closest to the point of the unconditional extremum and visible from this point are subject to investigation. In the case of the presence of several nearest equidistant vertices, we investigate a face containing all these vertices and faces of smaller dimension that have at least two common nearest vertices with the first face.

Keywords: mathematical programming, quadratic programming, sparse matrices, direct multiplicative algorithm, a new mathematical formulation, necessary and sufficient conditions of optimality, quadratic problem, linear programming, multi-dimensional geometry

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2018, vol. 10, no. 4, pp. 407–420 (Russian).

Введение

Настоящая работа является продолжением исследований [Свириденко, 2017b], в которой было доказано, что факторизация Холесского для симметричной положительно определенной матрицы H :

$$H = U^T D U, \quad (1)$$

преобразование:

$$H p + h = 0 \Rightarrow u + U p = 0 \quad (2)$$

и решение p^* системы линейных уравнений:

$$u + U p = 0 \quad (3)$$

определяют (в рамках одной процедуры) решение безусловной задачи квадратичного программирования (здесь и далее КП):

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T H p + p^T h \quad (4)$$

и построение новой математической формулировки задачи (4):

$$\min_{p, x \in R^n} f(p) = x^T D x \quad (5)$$

при условии:

$$u + U p = x, \quad (6)$$

которое с помощью техники исключения Гаусса в обратном порядке можно переписать следующим образом:

$$p = P x + p^*. \quad (7)$$

Здесь $H \in R^{n \times n}$, $U \in R^{n \times n}$ — верхняя треугольная матрица с диагональными элементами, равными единице, $D \in R^{n \times n}$ — диагональная матрица со строго положительными элементами на диагонали, $h \in R^n$, $u \in R^n$, $P \in R^{n \times n}$ — верхняя треугольная матрица с диагональными элементами, равными единице.

Также была сформулирована гипотеза, которую опишем следующим образом [Свириденко, 2017b]. Преобразование задачи (4) в эквивалентную задачу (5), (7) достаточно просто и может быть использовано для построения линейного решения задачи КП с целевой функцией от n переменных и замкнутой областью ограничений из m линейных неравенств:

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T H p + p^T h, \quad (8)$$

$$A p + a \geq 0, \quad p = (p_1 \quad p_2 \quad \dots \quad p_n)^T \geq 0, \quad (9)$$

основанного на решении систем линейных уравнений, размерность которых не выше числа переменных целевой функции. Здесь $A \in R^{m \times n}$, $a = (a_1 \quad a_2 \quad \dots \quad a_m)^T \in R^m$.

Здесь и далее:

Запись $p \geq 0$ означает, что $p_i \geq 0$ ($i = 1, \dots, n$).

$a_{v \bullet} = (a_{v1} \quad a_{v2} \quad \dots \quad a_{vn})$ — v -ая строка матрицы A .

Запись $A p + a \geq 0$ означает, что $a_{v \bullet} p + a_v \geq 0$ ($v = 1, \dots, m$).

В данной работе подтверждаются сделанные в [Свириденко, 2017b] выводы путем преобразования задачи (8), (9) в эквивалентную задачу поиска минимального расстояния между началом координат и границей многогранного множества ограничений методами линейной алгебры и многомерной геометрии [Розендорн, Ефимов, 2005]. В результате решение задачи (8), (9) сводится к решению систем линейных уравнений, размерность которых не превышает числа переменных n [Татаренко, 2014].

Также представлена вычислительная схема прямого мультипликативного метода расчета элементов p^* , D , U с перестановками в рамках одной процедуры для преобразования задачи (4) в эквивалентную задачу (5), (7).

Постановка проблемы

Методы решения задачи КП «относятся к средствам численного моделирования (моделирования с применением вычислительных машин)» [Гилл и др., 1985] и являются фундаментальными инструментами численного анализа, исследования операций, оптимизации и управления.

Общий недостаток известных вариантов квадратичного симплекс-метода, основанных на методе Лагранжа, и приближенных методов решения задачи КП, например, рассмотренных в [Леонов, Жолобов, 2004; Климова и др., 2008; Даугавет, 2004; Куцкий, Осипова, 2010] состоит в том, что в случае большой размерности решение такого класса задач существенно усложняется. Кроме того, для приближенных методов возникает проблема с оценкой качества таких решений, а симплекс-метод требует введения дополнительных переменных и учета нелинейных условий дополнительной нежесткости, что усложняет задачу и увеличивает ее размерность.

В [Поляк, 1983] предложен метод, заключающийся в последовательном решении квадратичной задачи на различных гранях множества ограничений, при этом требуется решать системы линейных уравнений меньшей размерности, чем при использовании симплекс-метода, но большей, чем число переменных целевой функции.

В [Татаренко, 2014] предложен метод решения задачи (8), (9), основанный на решениях систем линейных уравнений, размерность которых не выше числа переменных целевой функции. Вначале путем ортогональных преобразований [Ильин, Позняк, 2010; Новиков, 2010] и масштабирования матрица квадратичной формы приводится к нормальному виду. Затем с помощью замены переменных задача (8), (9) сводится к задаче поиска минимального расстояния между точкой безусловного экстремума и многогранным множеством ограничений. Для определения расстояния строятся перпендикуляры к граням многогранника различной размерности. Для уменьшения числа исследуемых граней Татаренко разработан специальный порядок перебора граней. Исследованию подлежат только грани, содержащие вершину, ближайшую к точке безусловного экстремума, и видимые из этой точки. В случае наличия нескольких ближайших равноудаленных вершин исследуются грань, содержащая все эти вершины, и грани меньшей размерности, имеющие с первой гранью не менее двух общих ближайших вершин. Недостатки подхода Татаренко к решению задачи (8), (9) опишем следующим образом. Основной ортогональных преобразований является спектральное разложение матрицы квадратичной формы H вида:

$$H = SAS^T = \sum_{i=1}^n \lambda_i s^i (s^i)^T, \quad (10)$$

где A — диагональная матрица, а S — ортонормальная матрица, составленные из собственных чисел λ_i и собственных векторов s^i соответственно. Спектральные задачи — вычислительно наиболее трудоемкие в прикладной линейной алгебре [Воеводин, 1977; Аристова и др., 2014]. Известны прямые и итерационные методы решения проблемы собственных значений.

Прямые методы [Алексеев, Чеснокова, 2006] применимы только для совсем небольших матриц [Горбаченко, 2011]. Одна из причин неприменимости прямых методов заключается в плохой обусловленности многочленов высокой степени [Кетков, Шульц, 2005]. Из-за плохой обусловленности коэффициенты характеристического уравнения вычисляются с большими ошибками, что приводит к полному искажению информации о собственных значениях. Поэтому в настоящее время для решения реальных задач применяются только итерационные методы, одним из них является *QR*-алгоритм [Горбаченко, 2011]. При этом возникает проблема с оценкой качества таких решений, а следовательно, и с оценкой качества решения задачи (8), (9).

Актуальность. Построение прямых методов решения задачи (8), (9) большой размерности, основанных на ее преобразовании в задачу поиска минимального расстояния между началом координат и границей многогранного множества ограничений, свободных от перечисленных выше недостатков, относится к актуальным проблемам вычислительной математики.

Цель и задачи исследования. Пусть точка p^* решения безусловной задачи (8) находится вне области ограничений (9), тогда решение задачи (8), (9) следует искать на границе области ограничений [Сухарев и др., 2011].

Первый этап решения опишем следующим образом. Очевидно, что в силу (7) ограничения (9) могут быть переписаны так:

$$A(Px + p^*) + a \geq 0, \quad p = Px + p^* \geq 0 \quad (11)$$

или

$$\begin{pmatrix} AP \\ P \end{pmatrix} x + \begin{pmatrix} Ap^* + a \\ p^* \end{pmatrix} \geq 0. \quad (12)$$

Тогда замена переменных:

$$x = Wy \quad (13)$$

с помощью масштабирующей диагональной матрицы:

$$w_{ij} = \begin{cases} 1/\sqrt{d_{ij}}, & \text{если } i = j; \\ 0, & \text{если } i \neq j; \end{cases} \quad (14)$$

определяет преобразование задачи (8), (9) в задачу отыскания минимального расстояния между началом координат и границей многогранного множества ограничений:

$$\min_{y \in R^n} f(y) = y^T y, \quad (15)$$

$$Gy + g \geq 0. \quad (16)$$

В процессе преобразования задачи (8), (9) в задачу (15), (16) участвуют следующие вспомогательные величины:

d_{ij} — элементы диагонального фактора D .

$$G = \begin{pmatrix} APW \\ PW \end{pmatrix} \in R^{(n+m) \times n}, \quad g = \begin{pmatrix} Ap^* + a \\ p^* \end{pmatrix} \in R^{n+m}, \quad W \in R^{n \times n}.$$

В данной работе для определения расстояния на втором этапе решения предлагается применить разработанный в [Татаренко, 2014] точный метод решения задачи (15), (16), основанный на решениях систем линейных уравнений, размерность которых не выше числа переменных задачи (8). Вычислительные эксперименты, проведенные Татаренко на модельных примерах, показали эффективность метода и возможность его применения для решения задач

оптимизации. В частности, «для решения задачи с целевой функцией от 3 переменных и областью ограничений, имеющей форму восьмигранной пирамиды, образованной пересечением 9 ограничений, для определения вершин потребовалось решить 25 систем из 3 уравнений, а для проведения перпендикуляров к граням и ребрам необходимо решить 12 систем из 3 уравнений и 7 систем из 2 уравнений» [Татаренко, 2014]. При решении этой задачи симплексным методом «потребуется неоднократно решать систему из 12 уравнений с 24 неизвестными, чтобы выполнить 12 нелинейных условий дополняющей нежесткости» [Татаренко, 2014].

Целью данной работы является построение прямого мультипликативного алгоритма расчета элементов p^* , D , U в рамках одной процедуры для преобразования задачи (8), (9) большой размерности в задачу (15), (16).

В работе принято:

- определение разреженной матрицы, которое утверждает, что приписывание матрице свойства разреженности эквивалентно утверждению о существовании алгоритма, который, используя ее разреженность, приводит к сокращению временной и емкостной сложности реализации по сравнению со стандартными алгоритмами [Писсанецки, 1988; Григорьева, Дмитриева, 2011; Дмитриева, 2014];
- использование формата хранения разреженных матриц, допускающего возможность параллельного выполнения любых матричных или матрично-векторных операций без распаковывания [Свириденко, 2016].

Замечание. QR -алгоритм — это численный метод в линейной алгебре, предназначенный для решения полной проблемы собственных значений, то есть отыскания всех собственных чисел матрицы. При этом алгоритм позволяет найти и собственные вектора матрицы. Он был разработан в конце 1950-х годов независимо Кублановской (Россия) [Кублановская, 1961] и Фрэнсисом (Англия) [Francis, 1961]. Открытию QR -алгоритма предшествовал LR -алгоритм, который использовал LU -разложение вместо QR -разложения. В настоящее время LR -алгоритм используется очень редко ввиду своей меньшей эффективности, однако он был важным шагом на пути к открытию QR -алгоритма.

Построение новой математической формулировки безусловной задачи (4) и ее применение для задания направления спуска в ньютоновских методах безусловной оптимизации можно найти в [Хакимова, Хакимов, 2003].

Расчет элементов p^* , D , U для преобразования задачи (8), (9)

В основе подхода к увеличению численной устойчивости расчета элементов p^* , D , U для построения новой математической формулировки задачи (8), (9) лежит интеграция прямого мультипликативного метода решения системы линейных уравнений и техники выбора ведущего элемента в алгоритме линейного программирования [Свириденко, 2017a].

Ниже приводится детальное описание всех операций, выполняемых по ходу расчета элементов p^* , D , U прямым мультипликативным алгоритмом с перестановками. Если в процессе вычислений элементы становятся меньше по абсолютной величине, так называемого критического значения ϵ_0 , то их предлагается приравнять к нулю.

В процессе вычисления p^* , D , U участвуют следующие вспомогательные величины:

$\gamma = 1, \dots, n$ — номер итерации,

$h_{\gamma \bullet} = (h_{\gamma 1} \quad h_{\gamma 2} \quad \dots \quad h_{\gamma n})$ — γ -ая строка матрицы H ,

$h_{\gamma}^{\gamma} + (h_{\gamma \gamma}^{\gamma} \quad h_{\gamma \gamma+1}^{\gamma} \quad \dots \quad h_{\gamma n}^{\gamma})(p_{\gamma} \quad p_{\gamma+1} \quad \dots \quad p_n)^T = 0$ — уравнение связи γ -ой строки,

$u_{\gamma \bullet} = (1 \quad -e_{1 \gamma \gamma+1}^{\gamma} \quad -e_{1 \gamma \gamma+2}^{\gamma} \quad \dots \quad -e_{1 \gamma n}^{\gamma})$ — γ -ая строка верхнего треугольного фактора U ,

p^{γ} — решение системы линейных уравнений $h_{i \bullet} p = -h_i$, $i = 1, \dots, \gamma$,

$e_{1_\gamma \bullet}^\gamma = (e_{1_\gamma \gamma+1}^\gamma \ e_{1_\gamma \gamma+2}^\gamma \ \dots \ e_{1_\gamma n}^\gamma)$ — главная строка мультипликатора:

$$E_{1_\gamma}^\gamma = \begin{pmatrix} e_{1_\gamma \gamma+1}^\gamma & e_{1_\gamma \gamma+2}^\gamma & \dots & e_{1_\gamma n}^\gamma \\ 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Замечание. $E_{1_\gamma}^\gamma$ — это матрица размера $(n-\gamma) \times (n-\gamma-1)$, первая строка которой произвольная, обозначим ее через $e_{1_\gamma \bullet}^\gamma$, а остальные — строки единичной матрицы размера $(n-\gamma-1) \times (n-\gamma-1)$. $E_{r_q}^\gamma$ с точностью до знака транспонирования совпадает с мультипликатором в линейном программировании (для ограничений-неравенств) [Хакимова и др., 2010; Свириденко, 2015; Свириденко, 2017а], за исключением удаления q -го столбца, все элементы которого равны нулю.

Вычислительная схема прямого мультипликативного метода расчета элементов p^* , D , U с перестановками

Шаг 0 (инициализация). Положить:

$$\gamma = 1, \\ c^{\gamma-1} = (h_{11} \ h_{22} \ \dots \ h_{nn}).$$

Вычислить номер r ведущей строки:

$$\theta_r = \max_i |h_i| (i = \gamma, \dots, n).$$

Поменять местами элементы r -ой и γ -ой строк матрицы H и вектор-столбца h , перенумеровать и запомнить порядок строк. Положить:

$$h_\gamma^\gamma = h_\gamma, \ (h_{\gamma\gamma}^\gamma \ h_{\gamma\gamma+1}^\gamma \ \dots \ h_{\gamma n}^\gamma) = (h_{\gamma\gamma} \ h_{\gamma\gamma+1} \ \dots \ h_{\gamma n}).$$

Вычислить номер q ведущего столбца:

$$\theta_q = \min_j |c_j^{\gamma-1} / h_{\gamma j}| (j = \gamma, \dots, n).$$

Поменять местами элементы q -го и γ -го столбцов матрицы H и вектор-строки c^0 , перенумеровать и запомнить порядок неизвестных. Положить:

$$d_{\gamma\gamma} = h_{\gamma\gamma}^\gamma.$$

Переписать уравнение связи γ -ой строки:

$$p_\gamma = p_\gamma^\gamma + e_{1_\gamma \bullet}^\gamma (p_{\gamma+1} \ p_{\gamma+2} \ \dots \ p_n), \\ p_\gamma^\gamma = -h_\gamma^\gamma / d_{\gamma\gamma}, \ e_{1_\gamma \bullet}^\gamma = -(h_{\gamma\gamma+1}^\gamma \ h_{\gamma\gamma+2}^\gamma \ \dots \ h_{\gamma n}^\gamma) / d_{\gamma\gamma}.$$

Положить:

$$u_{\gamma \bullet} = (1 \ -e_{1_\gamma \gamma+1}^\gamma \ -e_{1_\gamma \gamma+2}^\gamma \ \dots \ -e_{1_\gamma n}^\gamma), \\ p^\gamma = (p_1^\gamma \ p_2^\gamma = 0 \ p_3^\gamma = 0 \ \dots \ p_n^\gamma = 0)^T.$$

Пересчитать $c_{\gamma+1}^{\gamma-1}, \dots, c_n^{\gamma-1}$:

$$c^\gamma = (c_{\gamma+1}^\gamma \quad c_{\gamma+2}^\gamma \quad \dots \quad c_n^\gamma) = c^{\gamma-1} E_{1_\gamma}^\gamma$$

и перейти к шагу 4.

Шаг 1 (расчет $h_\gamma^\gamma, h_{\gamma j}^\gamma$). Вычислить номер r ведущей строки:

$$\theta_r = \max_i |h_i + h_{\gamma \bullet} p^{\gamma-1}| (i = \gamma, \dots, n).$$

Поменять местами элементы r -ой и γ -ой строк матрицы H и вектор-столбца h , перенумеровать и запомнить порядок строк. Вычислить:

$$h_\gamma^\gamma = h_\gamma + \sum_{j=1}^{\gamma-1} h_{\gamma j} p_j^\gamma, \quad (h_{\gamma \gamma}^\gamma \quad h_{\gamma \gamma+1}^\gamma \quad \dots \quad h_{\gamma n}^\gamma) = h_{\gamma \bullet} \prod_{i=1}^{\gamma-1} E_{1_i}^\gamma.$$

Шаг 2 (расчет $d_{\gamma \gamma}, e_{1_\gamma \bullet}^\gamma, u_{\gamma \bullet}, c^\gamma, p^\gamma$). Вычислить номер q ведущего столбца:

$$\theta_q = \min_j |c_j^{\gamma-1} / h_{\gamma j}| (j = \gamma, \dots, n).$$

Поменять местами элементы q -го и γ -го столбцов матрицы H и вектор-строки c^0 , перенумеровать и запомнить порядок неизвестных. Положить:

$$d_{\gamma \gamma} = h_{\gamma \gamma}^\gamma.$$

Вычислить:

$$p_\gamma^\gamma = -h_\gamma^\gamma / d_{\gamma \gamma}, \quad e_{1_\gamma \bullet}^\gamma = -(h_{\gamma \gamma+1}^\gamma \quad h_{\gamma \gamma+2}^\gamma \quad \dots \quad h_{\gamma n}^\gamma) / d_{\gamma \gamma},$$

$$p_i^\gamma = p_i^\gamma + p_\gamma^\gamma e_{1_{\gamma-1} \gamma}^i \quad (i = 1, \dots, \gamma-1).$$

Положить:

$$u_{\gamma \bullet} = (1 \quad -e_{1_\gamma \gamma+1}^\gamma \quad -e_{1_\gamma \gamma+2}^\gamma \quad \dots \quad -e_{1_\gamma n}^\gamma),$$

$$p^\gamma = (p_1^\gamma \quad p_2^\gamma \quad \dots \quad p_\gamma^\gamma \quad p_{\gamma+1}^\gamma = 0 \quad p_{\gamma+2}^\gamma = 0 \quad \dots \quad p_n^\gamma = 0).$$

Пересчитать $c_{\gamma+1}^{\gamma-1}, \dots, c_n^{\gamma-1}$:

$$c^\gamma = (c_{\gamma+1}^\gamma \quad c_{\gamma+2}^\gamma \quad \dots \quad c_n^\gamma) = c^{\gamma-1} E_{1_\gamma}^\gamma.$$

Шаг 3 (минимизация заполнения главных строк мультипликаторов). Вычислить:

$$e_{1_\gamma \bullet}^i = e_{1_{\gamma-1} \bullet}^i E_{1_\gamma}^\gamma \quad (i = 1, \dots, \gamma-1).$$

Шаг 4 (расчет d_{nn}, p^n, p^*). Положить $\gamma = \gamma + 1$. Если $\gamma \neq n$, то перейти к шагу 1; иначе вычислить:

$$h_n^n = h_n + h_{n1} p_1^1 + h_{n2} p_2^2 + \dots + h_{n n-1} p_{n-1}^{n-1}, \quad h_{n \bullet}^n = h_{n \bullet} \prod_{i=1}^{n-1} E_{1_i}^i,$$

Положить:

$$d_{nn} = h_{nn}^n.$$

Вычислить:

$$p^n = (p_1^{n-1} - e_{1_{n-1} n}^1 h_n^n / d_{nn} \quad p_2^{n-1} - e_{1_{n-1} n}^2 h_n^n / d_{nn} \quad \dots \quad p_{n-1}^{n-1} - e_{1_{n-1} n}^{n-1} h_n^n / d_{nn} \quad -h_n^n / d_{nn}),$$

$$p^n \Rightarrow p^*.$$

Примеры, иллюстрирующие применение разработанного метода

Экономика. Подход к построению численно устойчивых прямых мультипликативных методов линейного решения задач КП большой размерности, предложенный в данной работе, является основой для дальнейших исследований, результаты которых могут быть использованы и для математического моделирования оптимального портфеля ценных бумаг, и для разработки алгоритма решения задачи по его формированию с учетом ограничений на размеры инвестиций в отдельные активы, например, по методике, предложенной в [Климова и др., 2008].

Под портфелем понимаются размеры вложений в различные виды ценных бумаг: обычные облигации, облигации краткосрочных государственных займов, банковские депозитные сертификаты, акции и т. д.

Следует отметить, что Российская Федерация относится к категории стран с развивающейся рыночной экономикой. Рынки ценных бумаг в таких условиях характеризуются как высокой доходностью, так и значительными рисками в сравнении с рынками развитых экономик. Одним из основных способов уменьшения риска инвестиций в финансовые инструменты является диверсификация активов, что приводит к формированию портфелей ценных бумаг.

Вопрос ограничений на вложения в отдельные активы для физических лиц регулируется индивидуальными предпочтениями инвестора. Для юридических лиц, кроме того, существуют и законодательные ограничения [Климова и др., 2008]. Таким образом, проблема моделирования оптимального портфеля ценных бумаг с учетом ограничений инвестиций в отдельные активы на российском финансовом рынке приобретает особую актуальность.

Электроэнергетика. Результаты, полученные в данной работе, могут быть использованы и для исследования распределения нагрузок в электрических сетях. Все элементы электрической системы (станции, подстанции, линии электропередач, сети, приемники энергии) взаимосвязаны непрерывным процессом генерирования, передачи, распределения и потребления электрической энергии. Момент производства электроэнергии практически совпадает с моментом ее потребления, поэтому в любой момент времени мощность, отдаваемая генерирующими установками, должна быть точно равна мощности суммарной нагрузки системы, иными словами, должен соблюдаться баланс генерируемых и потребляемых мощностей в системе.

Баланс мощностей в электрических сетях описывается системами квадратичных алгебраических уравнений [Анциферов, Тарасов, 1994], моделирующих распределение нагрузок в электрических сетях, а такие системы, как правило, имеют множество решений, поэтому в практических ситуациях большой интерес представляют методы построения всех решений системы [Pardalos, 1993; Pardalos, 1991; Floudas, Pardalos, 1992]. Таким образом, исследование подходов к построению описания всего множества решений квадратичного алгебраического уравнения приобретает особую актуальность. Предлагаемый подход рассмотрим в феноменологическом плане в смысле понимания феномена [Лачинов, Поляков, 1999] и конструктивном плане, в том смысле «как определяемое устроено, и как с ним работать» [Лачинов, Поляков, 1999], на примере построения описания всего множества решений квадратичного алгебраического уравнения:

$$f(p) = 2p_1^2 - 2p_1p_2 + 2p_2^2 - 4p_1 - p_2 - 9/2 = 0. \quad (17)$$

Построение описания всего множества решений квадратичного алгебраического уравнения начнем с выделения полного квадрата:

$$f(p) = 2(p_1 - 1/2 p_2 - 1)^2 + 3/2(p_2 - 1)^2 - 1 = 0. \quad (18)$$

Затем путем преобразования:

$$x_1 = -1 + p_1 - 1/2 p_2, \quad x_2 = -1 + p_2 \Rightarrow p_1 = 3/2 + x_1 + 1/2 x_2, \quad p_2 = 1 + x_2 \quad (19)$$

с помощью техники исключения Гаусса в обратном порядке перейдем к новой форме записи квадратичного алгебраического уравнения:

$$f(p) = 2x_1^2 + 3/2x_2^2 - 1 = 0 \quad (20)$$

при условии:

$$p_1 = 3/2 + x_1 + 1/2x_2, \quad p_2 = 1 + x_2. \quad (21)$$

Очевидно, что преобразование:

$$x_1 = 1/\sqrt{2} \sin \alpha, \quad x_2 = \sqrt{2}/\sqrt{3} \cos \alpha \quad (22)$$

позволяет записать выражение:

$$p_1 = 3/2 + 1/\sqrt{2} \sin \alpha + 1/\sqrt{6} \cos \alpha, \quad p_2 = 1 + \sqrt{2}/\sqrt{3} \cos \alpha \quad (23)$$

для описания всего множества решений квадратичного алгебраического уравнения.

Линейная алгебра. Результаты, полученные в данной работе, могут быть использованы и в линейной алгебре для описания связи разложения $H = U^T D U$ с собственными векторами и собственными числами матрицы H . В основе этой связи лежит геометрия определенности матрицы H , которую, следуя Стренгу [Стренг, 1980], опишем следующим образом. В линейной алгебре основным шагом вычисления собственных векторов и собственных чисел всегда является диагонализация матрицы H путем ортогональных преобразований, основой которых является спектральное разложение вида (10):

$$H = S A S^T. \quad (24)$$

Пусть столбцами матрицы S являются единичные собственные векторы матрицы H , тогда преобразование

$$x = S^T p \quad (25)$$

позволяет записать выражение

$$p^T H p \quad (26)$$

в виде суммы квадратов:

$$p^T H p = p^T S A S^T p = x^T A x = \lambda_1 x_1^2 + \lambda_2 x_2^2 + \dots + \lambda_n x_n^2. \quad (27)$$

При этом уравнение

$$p^T H p = 1 \quad (28)$$

описывает эллипсоид, конец i -ой оси которого находится в точке с координатами:

$$x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_m, \quad (29)$$

где i -ая координата определяется условием:

$$\lambda_i x_i^2 = 1, \quad (30)$$

а остальные координаты равны нулю. Эти точки лежат на прямых, задаваемых собственными векторами матрицы H , а половина длины i -ой оси связана с i -ым собственным значением соотношением:

$$1/\sqrt{\lambda_i}. \quad (31)$$

Таким образом, геометрия положительной определенности полностью связана с собственными числами и векторами матрицы H .

Теперь рассмотрим применение разложения Холецкого $H = U^T D U$ для вычисления собственных векторов и собственных чисел в феноменологическом и конструктивном планах на примере матрицы $H = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$.

В отличие от подхода линейной алгебры к вычислению собственных векторов и собственных чисел, начнем с выделения полного квадрата выражения (26):

$$p^T H p = 2p_1^2 - 2p_1 p_2 + 2p_2^2 = 2(p_1 - 1/2 p_2)^2 + 3/2 p_2^2. \quad (32)$$

Очевидно,

$$U = \begin{pmatrix} 1 & -1/2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3/2 \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Затем путем преобразования

$$x = U p \Rightarrow p = \bar{U} x = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} x \quad (34)$$

с помощью техники исключения Гаусса в обратном порядке перейдем к новой форме записи уравнения (28)

$$p^T H p = (U p)^T D U p = x^T D x = 1 \quad (35)$$

при условии

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} x. \quad (36)$$

Очевидно, что преобразование

$$x = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \sin \alpha \\ \sqrt{2}/\sqrt{3} \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (37)$$

позволяет записать выражение

$$p = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \sin \alpha + 1/\sqrt{6} \cos \alpha \\ \sqrt{2}/\sqrt{3} \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (38)$$

для описания всего множества решений уравнения (35). Пусть p^i — одно из решений задачи:

$$\text{extr} F(p) = p^T p = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \sin \alpha + 1/\sqrt{6} \cos \alpha \\ \sqrt{2}/\sqrt{3} \cos \alpha \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \sin \alpha + 1/\sqrt{6} \cos \alpha \\ \sqrt{2}/\sqrt{3} \cos \alpha \end{pmatrix}, \quad (39)$$

тогда p^i — точка конца i -ой оси, в данном случае, обычного эллипса и задает направление i -го собственного вектора матрицы H , а половина длины i -ой оси связана с i -ым собственным значением соотношением:

$$(s^i)^T s^i = 1/\lambda_i. \quad (40)$$

Первые два экстремума задачи (39) достигаются при следующих значениях $\sin \alpha$, $\cos \alpha$:

$$\sin \alpha = \sqrt{3}/2, \cos \alpha = -1/2 \text{ и } \sin \alpha = 1/2, \cos \alpha = \sqrt{3}/2. \quad (41)$$

Отсюда, используя (38), (40), можно вычислить собственные векторы и собственные значения матрицы H :

$$s^1 = \left(1/\sqrt{6} \quad -1/\sqrt{6}\right)^T, \lambda_1 = 3, s^2 = \left(1/\sqrt{2} \quad 1/\sqrt{2}\right)^T, \lambda_2 = 1. \quad (42)$$

Заключение

Расчет элементов p^* , D , U определяет решение безусловной задачи (4) и построение ее новой математической формулировки (5), (7), которая достаточно проста и может быть использована для преобразования задачи (8), (9) большой размерности к задаче (15), (16), которая представляет собой задачу поиска минимального расстояния между началом координат и точкой границы многогранного множества ограничений (16) методами линейной алгебры и многомерной геометрии. Для определения расстояния предлагается применить разработанный в [Татаренко, 2014] точный метод решения задачи (15), (16), основанный на решениях систем линейных уравнений, размерность которых не выше числа переменных задачи (4).

Список литературы (References)

- Анциферов Е. Г., Тарасов В. И. К решению систем квадратичных уравнений, моделирующих распределение нагрузок в электрических сетях // Изв. высших учебных заведений. Математика. — 1994. — № 12. — С. 8–19.
Anciferov E. G., Tarasov V. I. K resheniju sistem kvadraticnyh uravnenij, modelirujushhij raspredelenie nagruzok v jelektricheskijh setjah [To the solution of systems of quadratic equations, modeling the distribution of loads in electrical networks] // *News of higher educational institutions. Mathematics.* — 1994. — No. 12. — P. 8–19 (in Russian).
- Алексеев Е. Р., Чеснокова О. В. MATLAB 7. — М.: НТ Пресс, 2006.
Alekseev E. R., Chesnokova O. V. MATLAB 7. — Moscow: NT Press, 2006 (in Russian).
- Аристова Е. Н., Завьялова Н. А., Лобанов А. И. Практические занятия по вычислительной математике. Часть 1. — М.: МФТИ, 2014.
Aristova E. N., Zav'jalova N. A., Lobanov A. I. Prakticheskie zanjatija po vychislitel'noj matematike. Chast' 1 [Practical classes on computational mathematics. Part 1]. — Moscow: MFTI, 2014 (in Russian).
- Воеводин В. В. Вычислительные основы линейной алгебры. — М.: Наука, 1977.
Voievodin V. V. Vychislitel'nye osnovy linejnoj algebry [Computational fundamentals of linear algebra]. — Moscow: Nauka, 1977 (in Russian).
- Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. — М.: Мир, 1985.
Gill Ph. E., Murray W., Wright M. H. Practical optimization. — System Optimization Laboratory Department of Operations Research Stanford University California, USA // Academic Press, 1981. (Russ. ed.: *Gill F., Mjurrej U., Rajt M. Prakticheskaja optimizacija.* — Moscow: Mir, 1985.)
- Горбаченко В. И. Вычислительная линейная алгебра с примерами на MATLAB. — СПб.: БХВ-Петербург, 2011.
Gorbachenko V. I. Vychislitel'naja linejnaja algebra s primerami na MATLAB [Computational linear algebra with examples in MATLAB]. — Saint-Petersburg: BHV-Peterburg, 2011 (in Russian).
- Григорьева О. Н., Дмитриева О. А. Моделирование линейных динамических систем большой размерности с разреженными матрицами коэффициентов // «Информатика и компьютерные технологии–2011». — Донецк: Донецкий национальный технический университет, 2011. — С. 199–203.
Grigor'eva O. N., Dmitrieva O. A. Modelirovanie linejnyh dinamicheskijh sistem bol'shoj razmernosti s razrezhennymi matricami koeficientov // «Informatics and computer technologies–2011». — Donetsk: Donetsk national technical University, 2011. — P. 199–203 (in Russian).
- Даугавет В. А. Численные методы квадратичного программирования. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 2004.
Daugavet V. A. Chislennye metody kvadraticnogo programmirovanija [Numerical methods of quadratic programming]. — Saint-Petersburg: SPbGU, 2004 (in Russian).
- Дмитриева О. А. Оптимизация выполнения матрично-векторных операций при параллельном моделировании динамических процессов // Наукові праці ДонНТУ. Серія: обчислювальна техніка та автоматизація. — 2014. — № 1 (26). — С. 94–100.
Dmitrieva O. A. Optimizacija vypolnenija matrichno-vektornyh operacij pri parallel'nom modelirovanii dinamicheskijh processov. [Optimization of performance of matrix and vector operations at parallel simulation of dynamic processes] // *Donetsk National Technical University.* — 2014. — No. 1 (26). — P. 94–100 (in Russian).

- Ильин В. А., Позняк Э. Г.* Линейная алгебра: учеб. для вузов. — М.: Физматлит, 2010.
Il'in V. A., Poznyak Je. G. Linejnaja algebra: ucheb. dlja vuzov [Linear algebra: proc. for higher education institutions]. — Moscow: Fizmatlit, 2010 (in Russian).
- Кетков А. Ю., Шульц М. М.* MATLAB 7. Программирование, численные методы. — СПб.: БХВ-Петербург, 2005.
Ketkov A. Ju., Shul'c M. M. MATLAB 7. Programirovanie, chislennye metody [MATLAB 7. Programming, numerical methods]. — Saint-Petersburg: BHV-Peterburg, 2005 (in Russian).
- Климова Е. Н., Шур В. Л., Москалец О. В.* Математическое моделирование оптимального портфеля ценных бумаг с ограничениями на отдельные активы // Вестн. СамГУ: Естественно-научная сер. — Самара, 2008. — № 8/2 (67). — С. 263–275.
Klimova E. N., Shur V. L., Moskalec O. V. Matematicheskoe modelirovanie optimal'nogo portfelja cennyh bumag s ogranichenijami na otdel'nye aktivy [Mathematical modeling of an optimal portfolio of securities with restrictions on individual assets] // Vestn. Samara state University: natural Science series. — Samara, 2008. — No. 8/2 (67). — P. 263–275 (in Russian).
- Кублановская В. Н.* О некоторых алгоритмах для решения полной проблемы собственных значений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1961. — Т. 1, № 4. — С. 555–570.
Kublanovskaja V. N. O nekotoryh algoritmah dlja reshenija polnoj problemy sobstvennyh znachenij [On some algorithms for the solution of the complete problem of eigenvalues] // Computational mathematics and mathematical physics. — 1961. — Vol. 1, No. 4. — P. 555–570 (in Russian).
- Куций Н. Н., Осипова Е. А.* Проблема начального допустимого базиса при решении задач линейного программирования // Вестн. ТГТУ. Тамбов, 2010. — Т. 16, № 4. — С. 780–788.
Kucyj N. N., Osipova E. A. Problema nachal'nogo dopustimogo bazisa pri reshenii zadach linejnogo programirovanija [The problem is a valid initial basis in the solution of linear programming problems] // Vestn. TGTU. Tambov, 2010. — Vol. 16, No. 4. — P. 780–788 (in Russian).
- Лачинов В. М., Поляков А. О.* Информодинамика или Путь к Миру открытых систем. — СПб.: Изд-во СПбГТУ, 1999.
Lachinov V. M., Poljakov A. O. Informodinamika ili Put' k Miru otkrytyh sistem [Informodynamics or the way to the world of open systems]. — Saint-Petersburg: Izd-vo SPbGTU, 1999 (in Russian).
- Леонов А. А., Жолобов Д. А.* Расширение симплекс-метода для решения задач квадратичного программирования // Науч. сессия МИФИ–2004. — М.: МИФИ, 2004. — Т. 13. — С. 82–83.
Leonov A. A., Zholobov D. A. Rasshirenie simpleks-metoda dlja reshenija zadach kvadraticnogo programirovanija [Extension of the simplex method for solving quadratic programming problems] // Scientific. session MIFI–2004. — Moscow: MIFI, 2004. — Vol. 13. — P. 82–83 (in Russian).
- Новиков М. А.* О приведении матриц квадратичных форм к взаимно упрощенным // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование. — 2010. — № 2 (26). — С. 181–187.
Novikov M. A. O privedenii matric kvadraticnyh form k vzaimno uproshhennym [On the approximation of the matrices of quadratic forms to the mutually simplified] // The Modern technologies. System analysis. Modeling. — 2010. — No. 2(26). — P. 181–187 (in Russian).
- Писсанецки С.* Технология разреженных матриц: Пер. с англ. — М.: Мир, 1988. — 410 с.
Pissanetzky S. Sparse matrix technology / Centro Atamico Bariloche, Bariloche, Argentina. — Academic Press Inc., 1984. (Russ. ed.: *Pissanecki S.* Tehnologija razrezhenykh matric. — Moscow: Mir, 1988.)
- Поляк В. Т.* Введение в оптимизацию. — М.: Наука, 1983. — 384 с.
Poljak V. T. Vvedenie v optimizaciju [Introduction to optimization]. — Moscow: Nauka, 1983. — 384 p. (in Russian).
- Розендорн Э. Р., Ефимов Н. В.* Линейная алгебра и многомерная геометрия: учебник. — М.: Физматлит, 2005.
Rozendorn Je. R., Efimov N. V. Linejnaja algebra i mnogomernaja geometrija: uchebnik [Linear algebra and multidimensional geometry]. — Moscow: Fizmatlit, 2005 (in Russian).
- Свириденко А. Б.* Априорная поправка в ньютоновских методах оптимизации // Компьютерные исследования и моделирование. — 2015. — Т. 7, № 4. — С. 835–863.
Sviridenko A. B. Apriornaja popravka v n'jutonovskih metodah optimizacii [The correction to Newton's methods of optimization] // Computer Research and Modeling. — 2015. — Vol. 7, No. 4. — P. 835–863 (in Russian).
- Свириденко А. Б.* Прямые мультипликативные методы для разреженных матриц. Несимметричные линейные системы // Компьютерные исследования и моделирование. — 2016. — Т. 8, № 6. — С. 833–860.

- Sviridenko A. B.* Prjamyje mul'tiplikativnye metody dlja razrezhennyh matric. Nesimmetrichnye linejnye sistemy [Direct multiplicative methods for sparse matrices. Unbalanced linear systems] // Computer research and modeling. — 2016. — Vol. 8, No. 6. — P. 833–860 (in Russian).
- Свириденко А. Б.* Прямые мультипликативные методы для разреженных матриц. Линейное программирование // Компьютерные исследования и моделирование. — 2017а. — Т. 9, № 2. — С. 143–165.
- Sviridenko A. B.* Prjamyje mul'tiplikativnye metody dlja razrezhennyh matric. Nesimmetrichnye linejnye sistemy [Direct multiplicative methods for sparse matrices. Linear Programming] // Computer research and modeling. — 2017а. — Vol. 9, No. 2. — P. 143–165 (in Russian).
- Свириденко А. Б.* Прямые мультипликативные методы для разреженных матриц. Ньютоновские методы // Компьютерные исследования и моделирование. — 2017б. — Т. 9, № 5. — С. 679–703.
- Sviridenko A. B.* Prjamyje mul'tiplikativnye metody dlja razrezhennyh matric. N'jutonovskie metody [Direct multiplicative methods for sparse matrices. Newton methods] // Computer research and modeling. — 2017б. — Vol. 9, No. 5. — P. 679–703 (in Russian).
- Стренг Г.* Линейная алгебра и ее применения. — М.: Мир, 1980.
- Streng G.* Lineynaya algebra i yeye primeneniya [Linear Algebra and its Applications]. — Moscow: Mir, 1980 (in Russian).
- Сухарев А. Г., Тимохов А. В., Федоров В. В.* Курс методов оптимизации. — М.: Физматлит, 2011. — 384 с.
- Sukharev A. G., Timokhov A. V., Fedorov V. V.* Kurs metodov optimizatsii [Course of optimization methods]. — Moscow: Fizmatlit, 2011. — 509 p.
- Татаренко С. И.* Линейное решение задачи квадратичного программирования // Программные продукты и системы. — 2014. — № 3 (107). — С. 36–40.
- Tatarenko S. I.* Linejnoe reshenie zadachi kvadratichnogo programmirovaniya [Linear solution for quadratic programming problems] // Software & Systems. — 2014. — No. 3 (107). — P. 36–40 (in Russian).
- Хакимова А. Б., Хакимов Б. Б.* Единый подход к решению задач математического программирования гуманитарной компьютерной клиники // Сборник статей I-й международной конференции «Системные, информационные и технические средства и технологии в профессиональной деятельности, образовании, оздоровлении и профилактике». — СПб., 2003. — С. 88–92.
- Khakimova A. B., Khakimov B. B.* Edinyj podhod k resheniju zadach matematicheskogo programmirovaniya gumanitarnoj komp'yuternoj kliniki [A unified approach to the solution of problems of mathematical programming Humanities computer clinic] // A collection of articles I international conference “System, information and technical tools and technologies in their professional activities, education, rehabilitation and prevention”. — Saint-Petersburg, 2003. — P. 88–92 (in Russian).
- Хакимова А. Б., Зеленков Г. А., Рзун И. Г.* Подход к увеличению эффективности мультипликативного алгоритма симплекс-метода // Труды ИСА РАН «Динамика неоднородных систем». — Выпуск 14, Том 53 (2). — М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. — С. 245–251.
- Khakimova A. B., Zelenkov G. A., Rzun I. G.* Podhod k uvelicheniju jeffektivnosti mul'tiplikativnogo algoritma simpleks-metoda [Approach to increase the efficiency of the multiplicative algorithm of the simplex method] // The works of ISA Russian Academy of Sciences “Dynamics of heterogeneous systems”. — 2010. — The issue 14, Vol. 53 (2). — P. 245–251 (in Russian).
- Francis J. G. F.* The QR Transformation, I // The Computer Journal. — 1961. — Vol. 4, No. 3. — P. 265–271.
- Floudas C. A., Pardalos P. M.* Recent Advances in Global Optimization. — Princeton University Press, 1992.
- Pardalos P. M.* Construction of test problems in quadratic bivalent programming // ACM Transactions on Mathematical Software. — 1991. — Vol. 17, No. 1. — P. 74–87.
- Pardalos P. M.* Generation of Large-Scale Quadratic Programs // ACM Transactions on Mathematical Software. — 1993. — Vol. 13, No. 2. — P. 133.