

УДК: 519.85

О проектировании нуля на линейное многообразие, многогранник и вершину многогранника. Ньютоновские методы минимизации

А. Б. Свириденко

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

E-mail: roshechka@gmail.com

Получено 02.04.2019.

Принято к публикации 30.04.2019.

Рассматривается подход к построению методов решения задачи квадратичного программирования для расчета направления спуска в ньютоновских методах минимизации гладкой функции на множестве, заданном набором линейных равенств. Подход состоит из двух этапов.

На первом этапе задача квадратичного программирования преобразуется численно устойчивым прямым мультипликативным алгоритмом в эквивалентную задачу о проектировании начала координат на линейное многообразие, что определяет новую математическую формулировку двойственной квадратичной задачи. Для этого предложен численно устойчивый прямой мультипликативный метод решения систем линейных уравнений, учитывающий разреженность матриц, представленных в упакованном виде. Преимущество подхода состоит в расчете модифицированных факторов Холесского для построения существенно 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. При этом изменения в позиции очередной обрабатываемой строки матрицы не вносятся, что позволяет использовать статические форматы хранения данных.

На втором этапе необходимые и достаточные условия оптимальности в форме Куна–Таккера определяют расчет направления спуска — решение двойственной квадратичной задачи сводится к решению системы линейных уравнений с симметричной положительно определенной матрицей коэффициентов для расчета множителей Лагранжа и к подстановке решения в формулу для расчета направления спуска.

Доказано, что предложенный подход к расчету направления спуска численно устойчивыми прямыми мультипликативными методами на одной итерации требует по кубическому закону меньше вычислений, чем одна итерация по сравнению с известным двойственным методом Гилла и Мюррея. Кроме того, предложенный метод допускает организацию вычислительного процесса с любой начальной точки, которую пользователь выберет в качестве исходного приближения решения.

Представлены варианты постановки задачи о проектировании начала координат на линейное многообразие, выпуклый многогранник и вершину выпуклого многогранника. Также описаны взаимосвязь и реализация методов решения этих задач.

Ключевые слова: ньютоновские методы, квадратичное программирование, двойственная квадратичная задача, разреженные матрицы, факторизация Холесского, прямой мультипликативный алгоритм, численная устойчивость, задача о проектировании нуля, линейное многообразие, вершина многогранника

UDC: 519.85

Designing a zero on a linear manifold, a polyhedron, and a vertex of a polyhedron. Newton methods of minimization

A. B. Sviridenko

Kuban State University, branch in Novorossiysk,
87 Geroev Desantnikov st., Novorossiysk, 353922, Russia

E-mail: roshechka@gmail.com

Received 02.04.2019.

Accepted for publication 30.04.2019.

We consider the approaches to the construction of methods for solving four-dimensional programming problems for calculating directions for multiple minimizations of smooth functions on a set of a given set of linear equalities. The approach consists of two stages.

At the first stage, the problem of quadratic programming is transformed by a numerically stable direct multiplicative algorithm into an equivalent problem of designing the origin of coordinates on a linear manifold, which defines a new mathematical formulation of the dual quadratic problem. For this, a numerically stable direct multiplicative method for solving systems of linear equations is proposed, taking into account the sparsity of matrices presented in packaged form. The advantage of this approach is to calculate the modified Cholesky factors to construct a substantially positive definite matrix of the system of equations and its solution in 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 in the position of the next processed row of the matrix, which allows the use of static data storage formats.

At the second stage, the necessary and sufficient optimality conditions in the form of Kuhn–Tucker determine the calculation of the direction of descent — the solution of the dual quadratic problem is reduced to solving a system of linear equations with symmetric positive definite matrix for calculating of Lagrange's coefficients multipliers and to substituting the solution into the formula for calculating the direction of descent.

It is proved that the proposed approach to the calculation of the direction of descent by numerically stable direct multiplicative methods at one iteration requires a cubic law less computation than one iteration compared to the well-known dual method of Gill and Murray. Besides, the proposed method allows the organization of the computational process from any starting point that the user chooses as the initial approximation of the solution.

Variants of the problem of designing the origin of coordinates on a linear manifold, a convex polyhedron and a vertex of a convex polyhedron are presented. Also the relationship and implementation of methods for solving these problems are described.

Keywords: Newton methods, quadratic programming, dual quadratic problem, sparse matrices, Cholesky factorization, direct multiplicative algorithm, numerical stability, zero design problem, linear manifold, vertex of a polyhedron

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2019, vol. 11, no. 4, pp. 563–591 (Russian).

© 2019 Anastasiya B. Sviridenko

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.

To view a copy of this license, visit <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/>
or send a letter to Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

Общая постановка проблемы

Ньютоновские методы оптимизации относятся к средствам численного моделирования (моделирования с применением вычислительных машин) [Гилл и др., 1985] и являются фундаментальными инструментами в численном анализе, исследовании операций, оптимизации и управлении [Поляк, 2006]. Там же отмечено, что большинство наиболее эффективных методов в линейном и нелинейном программировании строятся на их основе, как и множество приложений к инженерным, финансовым и статистическим задачам. При этом зачастую возникает необходимость в ньютоновских методах решения задачи минимизации гладкой функции на множестве, заданном набором линейных равенств:

$$\min_{x \in R^n} F(x), \quad Ax = a. \quad (1)$$

Здесь A есть $m \times n$ -матрица, a — вектор-столбец с m компонентами. В дальнейшем будем считать, что m не превосходит n и ранг A равен m , иными словами, ее строки линейно независимы. С практической точки зрения это предположение естественно: линейная зависимость ограничений задачи (1) означала бы, что они несовместны или среди них есть лишние, которые можно отбросить, не изменяя решения. Относительно целевой функции $F(x)$ будем предполагать, что она дважды непрерывно дифференцируема, ограничена снизу на допустимом множестве и ее минимум на нем достигается в конечной точке.

Большое внимание, уделявшееся этой задаче, объясняется, помимо ее простоты, гарантирующей положительный результат соответствующих исследований, и другими обстоятельствами [Гилл, Мюррей, 1977; Гродецкий, 2012]. Во-первых, задачи с линейными ограничениями составляют класс, существенный с прикладной точки зрения. Во-вторых, известны методы решения общих нелинейных задач, в которых искомый оптимум предлагается строить как предел последовательности решений подзадач с линейными ограничениями. В-третьих, при решении задачи, в которой есть линейные и нелинейные ограничения, может оказаться выгодным алгоритмически учитывать эти две группы ограничений отдельно, используя процедуру оптимизации при линейных ограничениях в качестве отдельного блока метода поиска оптимума исходной задачи.

Техника решения. Известные методы решения задачи (1) в полной мере используют специфику линейных ограничений, причем в основе их построения лежит комбинирование приемов безусловной минимизации и вычислительной линейной алгебры [Гилл и др., 1985]. Например, в диссертационной работе [Панферов, 2005] предложен подход, основанный на исключении ограничений в исходной задаче и последовательном использовании ньютоновских методов безусловной минимизации.

Если вопрос о выборе наиболее перспективного подхода к решению нелинейных задач общего вида до сих пор остается открытым, то споры о технике решения задачи (1) уже улеглись — в ее основе лежит адаптация ньютоновских методов решения задачи безусловной минимизации [Гилл, Мюррей, 1977]:

$$\min_{x \in R^n} F(x). \quad (2)$$

Пусть h^k , H^k — соответственно градиент (вектор-столбец с n компонентами) и гессиан (симметричная $n \times n$ -матрица), вычисленные на итерации k в точке x^k процесса безусловной минимизации гладкой функции $F = F(x)$. Тогда, в приведенных обозначениях, техника построения большинства ньютоновских методов безусловной оптимизации с регулировкой шага состоит в следующем. На каждой итерации сначала строится некоторая «связанная» с H^k существенно положительно определенная $n \times n$ -матрица \bar{H}^k , а затем направление спуска p^k вычисляется как решение системы

$$\bar{H}^k p^k = -h^k \quad (3)$$

и определяется новая точка:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k, \quad (4)$$

где α_k — длина шага, для которого $F^{k+1} < F^k$. При этом процедуру построения \bar{H}^k организуют так, чтобы \bar{H}^k совпадала с исходной матрицей H^k , если последняя сама является положительно определенной, причем выяснение определенности H^k и построение \bar{H}^k осуществляются параллельно в рамках одной процедуры на основе некоторых матричных разложений, которые позволяют выявить знаки собственных чисел H^k и приспособиться для генерации \bar{H}^k [Gill, Murray, 1974; Гилл, Мюррей, 1977; Гилл и др., 1985]. Там же отмечено, что для выяснения определенности H^k и построения \bar{H}^k наиболее приспособленными являются алгоритмы, основанные на факторизации (разложении) Холесского, которая для симметричной положительно определенной $n \times n$ -матрицы H^k имеет вид

$$H^k = (U^k)^T D^k U^k, \quad (5)$$

где U^k — верхняя треугольная $n \times n$ -матрица с диагональными элементами, равными единице, а D^k — диагональная $n \times n$ -матрица с положительными ведущими элементами по диагонали.

Факторизация (5) неприменима к знаконеопределенной симметричной матрице H^k . В этом случае нужно воспользоваться модифицированной факторизацией. Процедура с модифицированным разложением Холесского разработана Гиллом и Мюрреем [Gill, Murray, 1974]. Матрицы U^k и D^k , полученные по окончании этой процедуры, будут факторами Холесского для положительно определенной матрицы \bar{H}^k , связанной с H^k следующим образом:

$$\bar{H}^k = (U^k)^T D^k U^k = H^k + E^k, \quad (6)$$

где E^k — неотрицательная диагональная $n \times n$ -матрица. Таким образом, положительно определенная матрица \bar{H}^k может отличаться от исходной матрицы H^k только диагональными элементами.

Построение модифицированных факторов Холесского требует выполнения около $\frac{1}{6}n^3$ арифметических операций, примерно столько же, сколько требует обычное разложение для положительно определенной матрицы, а направление спуска p^k определяется последовательным решением двух систем линейных уравнений с треугольными матрицами:

$$(U^k)^T z^k = -h^k, \quad D^k U^k p^k = z^k. \quad (7)$$

Принцип организации алгоритмов. Если направление спуска p^k в ньютоновских методах безусловной минимизации доставляет наименьшее в R^n значение квадратичной форме специального вида, то при решении задачи с линейными ограничениями направление спуска можно выбирать, минимизируя ту же квадратичную форму, но на множестве векторов, удовлетворяющих условиям типа линейных равенств. Потребовав, чтобы в точке $x^{k+1} = x^k + \alpha_k p^k$ были сохранены равенства $Ax = a$, направление спуска надо искать в подпространстве, ортогональном их нормальям.

Рассмотрим квадратичную аппроксимацию $f(p)$ типа

$$f(p) = F^k + \frac{1}{2} p^T H^k p + p^T h^k \quad (8)$$

и задачу квадратичного программирования (здесь и далее — КП):

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T H^k p + p^T h^k, \quad Ap = 0, \quad (9)$$

которую ради простоты обозначений перепишем следующим образом:

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T H p + p^T h, \quad Ap = 0. \quad (10)$$

В отличие от (9) в новой целевой функции нет зависимости параметров задачи от номера итерации, но она никак не влияет на решение, и поэтому ее отсутствие несущественно. Существуют два метода решения задачи (10), которые, следуя Гиллу и Мюррею [Гилл, Мюррей, 1977; Гилл и др., 1985], опишем так.

Решение прямой квадратичной задачи. Рассмотрим множество ортогональных матрице A векторов:

$$M_0 = \{y : Ay = 0\}. \quad (11)$$

Это — линейное векторное подпространство в R^n , параллельное многообразию

$$M = \{x : Ax = a\}. \quad (12)$$

Ранг матрицы A равен m , поэтому размерность подпространства M_0 равна $n - m$. Каждый вектор из M_0 можно представить в виде линейной комбинации $n - m$ базисных векторов $\{z^j\}_{j=1}^{n-m}$. Иными словами, если Z — матрица со столбцами z^j , то для любого $y \in M_0$ найдется такой $(n - m)$ -мерный вектор v , что

$$y = Zv. \quad (13)$$

Поскольку допустимое множество задачи (10) совпадает с M_0 , то путем замены в (10) вектора p его разложением по базису $\{z^j\}_{j=1}^{n-m}$ перейдем к эквивалентной ей задаче безусловной минимизации по $n - m$ переменным v_j вида

$$\min_{v \in R^{n-m}} f(v) = \frac{1}{2} v^T Z^T H Z v + v^T Z^T h. \quad (14)$$

Если матрица $Z^T H Z$ положительно определена, то оптимальный вектор v^* существует, единствен и является решением уравнения

$$Z^T H Z v^* + Z^T h = 0. \quad (15)$$

В этом случае минимум задачи (10) достигается при $p = p_A^k$, где

$$p_A^k = Z v^*. \quad (16)$$

Таким образом, направление спуска p_A^k — это n -мерный вектор из подпространства R^n размерности $n - m$, в то время как v , по определению, является $(n - m)$ -мерным вектором.

Матрица $H_A = Z^T H Z$, определяющая вторые производные функции F вдоль направлений, лежащих в пространстве M_0 , называется спроектированной матрицей вторых производных, а вектор $h_A = Z^T h$ — спроектированным градиентом функции F в x .

Характерная особенность решения прямой квадратичной задачи для расчета направления спуска p_A^k в том, что чем больше ограничений в задаче (1), тем меньше размерность системы, определяющей вектор p_A^k . Обратным свойством обладает метод, рассмотренный ниже. В нем чем меньше ограничений, тем меньше уравнений требуется решить, чтобы найти p_A^k .

Решение двойственной квадратичной задачи. Решение задачи (10) фактически определяет два вектора: собственно решение p_A^k и вектор ω^* множителей Лагранжа ограничений задачи, удовлетворяющий уравнению

$$A^T \omega^* = h + H p_A^k. \quad (17)$$

Пара (p_A^k, ω^*) называется разрешающей. В основе метода, рассмотренного ниже, лежит замена (10) двойственной задачей КП, которая обладает тем свойством, что при определенных условиях ее решение (y^*, λ^*) будет разрешающей парой для задачи (10). Двойственная задача выглядит так:

$$\min_{y \in R^n, \lambda \in R^m} Q(y, \lambda) = \frac{1}{2} y^T H y, \quad A^T \lambda - H y = h. \quad (18)$$

Здесь обозначение $Q(y, \lambda)$ отражает неявную зависимость целевой функции от переменной λ .

Утверждение 1. Решение задачи (18) единственно только тогда, когда H невырождена.

Доказательство. Допустим, что матрица H имеет ранг $r < n$, тогда найдется такой ненулевой вектор y^0 , что $H y^0 = 0$. При этом если (y^*, λ^*) — решение задачи (18), то ее решением будет и пара $(y^* + y^0, \lambda^*)$.

Утверждение доказано.

Утверждение 2. Если H не вырождена, а матрица $AH^{-1}A^T$ положительно определена, то задача (18) допускает единственное решение (y^*, λ^*) . При этом, если положительно определена матрица $Z^T H Z$, где Z составлена из векторов базиса в M_0 , и (p_A^k, ω^*) — разрешающая пара задачи (10), то $p_A^k = y^*$, $\omega^* = \lambda^*$.

Доказательство. По предположению, матрица H не вырождена, поэтому ограничения задачи (18) можно разрешить относительно y :

$$y = H^{-1}(A^T \lambda - h). \quad (19)$$

Подставив это в целевую функцию задачи (18), перейдем к эквивалентной ей задаче КП:

$$\min_{\lambda \in R^m} Q(\lambda) = \frac{1}{2} \lambda^T A H^{-1} A^T \lambda - \lambda^T A H^{-1} h + \frac{1}{2} h^T H^{-1} h. \quad (20)$$

В силу положительной определенности матрицы $AH^{-1}A^T$ эта задача имеет единственное решение λ^* , которое можно найти, решив систему

$$A H^{-1} A^T \lambda^* = A H^{-1} h. \quad (21)$$

Вектор y^* находится подстановкой λ^* в (19) по формуле

$$y^* = H^{-1} \left(A^T \left(A H^{-1} A^T \right)^{-1} A H^{-1} - I \right) h, \quad (22)$$

где I — диагональная $n \times n$ -матрица с диагональными элементами, равными единице. Умножая правую и левую части этого равенства на A , приходим к соотношению

$$Ay^* = 0, \quad (23)$$

которое означает, что y^* можно представить в виде

$$y^* = Zv^0, \quad (24)$$

где v^0 — некоторый вектор. Умножая это равенство на $Z^T H$, получим

$$Z^T H y^* = Z^T H Z v^0. \quad (25)$$

Здесь замена y^* его выражением через λ^* по формуле (19) дает

$$Z^T H Z v^0 = Z^T A^T \lambda^* - Z^T h = -Z^T h, \quad (26)$$

поскольку по построению $Z^T A^T = 0$. Если матрица $Z^T H Z$ положительно определена, то это уравнение имеет единственное решение: $v^0 = v^*$, и, следовательно, $y^* = p_A^k$. Для завершения доказательства утверждения осталось установить, что λ^* совпадает с ω^* . По определению,

$$A^T \lambda^* - H y^* = h. \quad (27)$$

Уже доказано, что $y^* = p_A^k$, и поэтому

$$A^T \lambda^* - H p_A^k = h. \quad (28)$$

Очевидно,

$$A^T \lambda^* = h + H p_A^k = A^T \omega^*. \quad (29)$$

Таким образом, λ^* удовлетворяет уравнению для вектора множителей Лагранжа в задаче (18), причем это уравнение допускает единственное решение, так как столбцы матрицы A^T линейно независимы. Следовательно, $\omega^* = \lambda^*$.

Утверждение доказано.

Итак, чтобы на k -й итерации процесса минимизации при линейных ограничениях-равенствах построить ньютоновское направление спуска двойственным методом, надо:

- 1) вычислить матрицы H^{-1} , $AH^{-1}A^T$;
- 2) вычислить ω^* , решив уравнение

$$AH^{-1}A^T \omega^* = AH^{-1}h; \quad (30)$$

- 3) вычислить p_A^k по формуле

$$p_A^k = H^{-1}(A^T \omega^* - h). \quad (31)$$

Подведем итог. В задачах с ограничениями на положительную определенность матрицы вторых производных не приходится рассчитывать даже в точках строгого локального минимума [Гилл, Мюррей, 1977]. Этим задачи условной оптимизации качественно отличаются от задач безусловной минимизации, в которых матрица вторых производных, как правило, положительно определена вблизи строгого локального минимума. Однако и здесь, модифицируя ньютоновскую схему выбора направления спуска, надо сделать это так, чтобы изменения не затрагивали окрестностей точек строгих локальных минимумов, иначе сверхлинейной скорости не получить [Гилл, Мюррей, 1977]. Трудно удовлетворить этому требованию, отталкиваясь от

двойственного метода расчета p_A^k , поскольку, оставляя неизменным вид соответствующих формул, придется подправлять матрицу H , а сделать это, не ухудшая сходимость, совсем не просто. Кроме того, при реализации этого метода могут возникнуть неприятности, связанные с неопределенностью матрицы $AH^{-1}A^T$. Последняя не фигурирует ни в одном из условий строгого локального минимума, и поэтому интерпретация оценок множителей Лагранжа, получающихся при переходе от этой матрицы к ее положительно определенному аналогу, совершенно не очевидна.

Подобные проблемы не возникают, если в основу модификации положить прямой метод расчета направления спуска, поскольку для существования в точке x^* строгого локального минимума достаточно равенства $h_A(x^*) = 0$ и положительной определенности матрицы $H_A(x^*)$.

Следовательно, алгоритм, в котором $H_A(x^*)$ при необходимости преобразуется в положительно определенную матрицу, будет иметь идеальную скорость сходимости в регулярных случаях, а этого преобразования достаточно, чтобы сделать прямой метод работоспособным [Гилл, Мюррей, 1977]. Итак, чтобы на k -й итерации процесса минимизации при линейных ограничениях-равенствах построить ньютоновское направление спуска прямым методом, требуется:

1) построить матрицу \bar{H}_A , равную $H_A = Z^T H Z$, если последняя существенно положительно определена, и вычислить $h_A = Z^T h$;

2) вычислить v^* , решив уравнение

$$\bar{H}_A v^* + h_A = 0; \quad (32)$$

3) вычислить p_A^k по формуле

$$p_A^k = Z v^*. \quad (33)$$

Таким образом, схема расчета p_A^k предполагает модификацию H_A , если она плохо обусловлена. Обусловленность H_A можно измерять величиной $\chi(H_A)$ по формуле

$$\chi(H_A) = \|H_A\| \|H_A^+\|, \quad (34)$$

где H_A^+ — матрица, псевдообратная к H_A . Значение $\chi(H_A)$ зависит от числа обусловленности H_A и квадрата того же числа матрицы Z , причем если H положительно определена, то выполнено неравенство $\chi(H_A) \leq \chi(H)(\chi(Z))^2$. Отсюда видно, что, неудачно построив Z , можно получить очень плохо обусловленную матрицу $\chi(H_A)$, даже если матрица H обусловлена хорошо. Это приведет к модификации $\chi(H_A)$, без чего надо было бы обойтись, так как тогда замедляется сходимость. От выбора Z также зависит точность расчета направления спуска. При решении уравнения (32) на ЭВМ неизбежны ошибки округления, в результате которых численное решение \bar{v}^* может отклоняться от истинного v^* в пределах, установленных неравенством [Гилл, Мюррей, 1977]

$$\|\bar{v}^* - v^*\|_2 / \|v^*\|_2 \leq C_\chi \chi(H_A). \quad (35)$$

Здесь C_χ — постоянная, зависящая от относительной точности записи числа в ЭВМ. Если число обусловленности матрицы H_A равно 10^q и уравнение (32) решается на ЭВМ, в которой мантисса рационального числа содержит t десятичных разрядов, то в среднем только $t - q$

значащих цифр каждой компоненты вектора \bar{v}^* будут верными. Даже при умеренно больших значениях $\chi(Z)$ и $\chi(H)$ эта точность будет весьма скромной. Описанные неприятности связаны с плохим выбором матрицы Z , которую следовало бы строить так, чтобы число обусловленности матрицы H_A было минимальным.

Все описанные алгоритмы решения задачи (1) начинают поиск минимума, исходя из допустимой точки x^0 . Заранее такая точка может быть неизвестна, и поэтому нужен метод ее построения. В общем случае ньютоновский процесс решения задачи минимизации с линейными ограничениями проходит две фазы. На первой определяется допустимое начальное приближение, а на второй — собственно решение.

Актуальность. В данной работе исследуются следующие актуальные проблемы вычислительной математики.

1. Построение численно устойчивых прямых мультипликативных методов преобразования задачи КП большой размерности на множестве, заданном набором линейных равенств, в задачу о проектировании начала координат на линейное многообразие — новая математическая формулировка двойственной квадратичной задачи для расчета направления спуска.
2. Построение численно устойчивых прямых мультипликативных методов, для которых одна итерация расчета направления спуска требует по кубическому закону меньше вычислений, чем одна итерация с известным двойственным методом Гилла и Мюррея.
3. Организация вычислительного процесса с любой начальной точки, которую пользователю удобно будет задать в качестве исходного приближения решения.
4. Описание взаимосвязи и реализации методов решения задачи о проектировании начала координат на линейное многообразие, выпуклый многогранник и вершину выпуклого многогранника.

Основной целью данной работы является построение численно устойчивых прямых мультипликативных методов решения перечисленных выше актуальных проблем вычислительной математики.

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].

1. Расчет p^k , p_A^k , x^k

В данной работе предлагается численно устойчивый мультипликативный алгоритм решения следующих задач КП специального вида:

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T \bar{H}^k p + p^T h^k, \quad (1.1)$$

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T \bar{H}^k p + p^T h^k, \quad Ap = 0, \quad (1.2)$$

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T \bar{H}^k p + p^T h^k, \quad Ap = a, \quad (1.3)$$

для расчета p^k , p_A^k , x^k соответственно в рамках одной процедуры. Ради простоты обозначений в дальнейшем будем рассматривать следующие задачи:

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T \bar{H} p + p^T h, \quad (1.4)$$

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T \bar{H} p + p^T h, \quad Ap = 0, \quad (1.5)$$

$$\min_{p \in R^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T \bar{H} p + p^T h, \quad Ap = a. \quad (1.6)$$

В отличие от (1.1), (1.2), (1.3) в новой целевой функции задач (1.4), (1.5), (1.6) нет зависимости от номера итерации, но она никак не влияет на решение, поэтому ее отсутствие несущественно.

Расчет p^k . Исследования ньютоновских методов безусловной оптимизации с регулировкой шага, основанных на разложении Холесского [Gill, Murray, 1974; Гилл, Мюррей, 1977; Гилл и др., 1985], продолжены в [Зеленков, Хакимова, 2013]. Доказано, что интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холесского определяет и решение проблемы масштабирования шагов при спуске, и аппроксимацию неквадратичными функциями, и интеграцию с методом доверительной окрестности.

Исследования [Зеленков, Хакимова, 2013] продолжены в [Свириденко, 2015; Свириденко, 2016]. Доказано, что интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холесского определяет и подход к заданию направления спуска, более подходящий для задач большой размерности, и подход к уменьшению нормы априорной поправки E^k .

Исследования [Зеленков, Хакимова, 2013; Свириденко, 2015; Свириденко, 2016] продолжены в [Свириденко, 2017b]. Предложен алгоритм решения задачи (1.4) большой размерности. Приводится детальное описание всех операций, выполняемых по ходу расчета факторов Холесского для матрицы \bar{H} :

$$\bar{H} = U^T D U, \quad (1.7)$$

преобразования

$$\bar{H} p + h = 0 \Rightarrow u + U p = 0 \quad (1.8)$$

и решения системы

$$u + U p = 0 \quad (1.9)$$

для расчета направления спуска p^k в рамках одной процедуры прямым мультипликативным алгоритмом с перестановками.

Аспекты алгоритма расчета p^k . Прямой мультипликативный алгоритм расчета p^k , основанный на интеграции техники исключения Гаусса и факторизации Холесского, обманчиво прост. Однако имеются два аспекта, которые значительно глубже, чем простая техника расчета направления спуска p^k , и которые (вместе с самим алгоритмом) обсуждаются в этом разделе. Перечислим эти аспекты.

Аспект 1. Интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холесского определяет и новую математическую формулировку задачи (1.4), которую опишем следующим образом. В [Хакимова, Хакимов, 2003] выделением полного квадрата доказано, что целевую функцию задач (1.4), (1.5), (1.6) можно переписать так:

$$f(p) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (u_j)^2 d_{jj} + \frac{1}{2} (u + U p)^T D (u + U p). \quad (1.10)$$

Отсюда следует, что (1.4) сводится к эквивалентной задаче:

$$\min_{p, y \in \mathbb{R}^n} f(y) = \frac{1}{2} y^T D y \quad (1.11)$$

при условии

$$y = u + U p, \quad (1.12)$$

которое с помощью техники исключения Гаусса в обратном порядке можно записать в виде

$$p = p^k + U^{-1} y. \quad (1.13)$$

Здесь $p^k = -U^{-1}u$, U^{-1} — верхняя треугольная $n \times n$ -матрица с диагональными элементами, равными единице. В отличие от (1.10) в новой целевой функции нет постоянного слагаемого, но оно никак не влияет на решение, и поэтому его отсутствие несущественно, точно так же как зависимость задач (1.1), (1.2), (1.3) от номера итерации. Ниже приводится детальное описание всех операций, выполняемых по ходу расчета p^k , D , U прямым мультипликативным алгоритмом с перестановками. Для упрощения описания принята техника построения \bar{H} , предложенная Гиллом и Мюрреем [Гилл и др., 1985].

Вычислительная схема расчета p^k , D , U . В процессе вычисления p^k , 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 -я строка матрицы H ;

$h_{\gamma}^{\gamma} + h_{\gamma \gamma}^{\gamma} p_{\gamma} + h_{\gamma \gamma+1}^{\gamma} + \dots + h_{\gamma n}^{\gamma} p_n = 0$ — уравнение связи γ -й 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 -я строка верхнего треугольного фактора U ;

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

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

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

Здесь $E_{1_{\gamma}}^{\gamma}$ — 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, 2017b], за исключением удаления q -го столбца, все элементы которого равны нулю.

Шаг 0 (инициализация). Положить:

$$\begin{aligned} \gamma &= 1, \\ p^0 &= (0 \quad 0 \quad \dots \quad 0)^T, \\ c^0 &= (|h_{11}| \quad |h_{22}| \quad \dots \quad |h_{nn}|). \end{aligned}$$

Вычислить:

$$\beta^2 = \max \left\{ \zeta, \xi / \sqrt{n^2 - 1}, \varepsilon_M \right\},$$

$$\delta = \max \left\{ 2^{-t} \|H\|_{\infty}, 2^{-t} \right\}.$$

Здесь ξ — максимальный модуль недиагонального элемента H , ζ — значение максимального из диагональных элементов H , ε_M — машинная точность, t — число битов, которые отводятся под запись мантиссы при реализации алгоритма на конкретной ЭВМ.

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

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

и поменять местами элементы r -й и γ -й строк матриц H , h . Если $\gamma = 1$, то вычислить:

$$h_{\gamma}^{\gamma} = h_{\gamma}, \quad \left(h_{\gamma\gamma}^{\gamma} \quad h_{\gamma\gamma+1}^{\gamma} \quad \dots \quad h_{\gamma n}^{\gamma} \right) = \left(h_{\gamma\gamma} \quad h_{\gamma\gamma+1} \quad \dots \quad h_{\gamma n} \right)$$

и перейти к шагу 2; иначе вычислить:

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

Шаг 2 (расчет γ -го диагонального элемента фактора D , расчет главной строки $e_{1_{\gamma}}^{\gamma}$, мультипликатора $E_{1_{\gamma}}^{\gamma}$, строки $u_{\gamma\bullet}$ верхнего треугольного фактора U). Вычислить номер q ведущего столбца:

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

Поменять местами элементы q -го и γ -го столбцов матриц H , c^0 , запомнить порядок неизвестных. Вычислить:

$$\theta_{\gamma} = \max_{\gamma+1 \leq i \leq n} |h_{\gamma i}^{\gamma}|,$$

$$d_{\gamma\gamma} = \max \left\{ \delta, |h_{\gamma\gamma}^{\gamma}|, \theta_{\gamma}^2 / \beta^2 \right\}.$$

Переписать уравнение связи γ -й строки:

$$p_{\gamma} = p_{\gamma}^{\gamma} + e_{1_{\gamma\gamma+1}}^{\gamma} p_{\gamma+1} + e_{1_{\gamma\gamma+2}}^{\gamma} p_{\gamma+2} + p_{\gamma+2} + \dots + e_{1_{\gamma n}}^{\gamma} p_n,$$

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

Положить:

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

Шаг 3 (расчет c^{γ} , решения p^{γ} системы линейных уравнений $h_{i\bullet} p = -h_i$, $i = 1, \dots, \gamma$). Вычислить:

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

Если $\gamma = 1$, то положить:

$$p^{\gamma} = \left(p_1^{\gamma} \quad p_2^{\gamma} = 0 \quad p_3^{\gamma} = 0 \quad \dots \quad p_n^{\gamma} = 0 \right)^T$$

и перейти к шагу 5; иначе вычислить:

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

и положить:

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

Шаг 4 (минимизация заполнения главных строк мультипликаторов). Вычислить:

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

Шаг 5 (расчет d_{nn} , p^k). Положить:

$$\gamma = \gamma + 1.$$

Если $\gamma \neq n$, то перейти к шагу 1; иначе вычислить:

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

$$d_{nn} = \max \left\{ \delta, |h_{nn}^n| \right\},$$

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

$$p^n \Rightarrow p^k.$$

Аспект 2. Интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холесского определяет и варианты новых математических формулировок задач (1.5), (1.6). Перечислим эти варианты.

Первый вариант определяется подстановкой (1.13) в условия

$$Ap = 0, \quad Ap - a = 0. \tag{1.14}$$

В результате задачи (1.5), (1.6) можно записать в виде

$$\min_{y \in R^n} f(y) = \frac{1}{2} y^T D y, \quad Ap^k + AU^{-1}y = 0, \tag{1.15}$$

$$\min_{y \in R^n} f(y) = \frac{1}{2} y^T D y, \quad Ap^k - a + AU^{-1}y = 0. \tag{1.16}$$

Второй вариант определяется заменой y в (1.15), (1.16) по формуле

$$y = Ws. \tag{1.17}$$

Здесь W — масштабирующая диагональная $n \times n$ -матрица:

$$w_{ij} = \begin{cases} 1/\sqrt{d_{ij}}, & \text{если } i = j; \\ 0, & \text{если } i \neq j. \end{cases} \tag{1.18}$$

В результате перейдем от (1.15), (1.16) к эквивалентным задачам:

$$\min_{s \in R^n} f(s) = \frac{1}{2} s^T s, \quad Ap^k + AU^{-1}Ws = 0, \tag{1.19}$$

$$\min_{s \in R^n} f(s) = \frac{1}{2} s^T s, \quad Ap^k - a + AU^{-1}Ws = 0. \tag{1.20}$$

Рассмотрим:

$$\min_{s \in L} f(s) = \frac{1}{2} s^T s \tag{1.21}$$

— экстремальную задачу проектирования начала координат на линейное многообразие, задаваемое в виде множества решений системы линейных уравнений:

$$L = \{s : Ap^k + AU^{-1}Ws = 0\} \text{ или } L = \{s : Ap^k - a + AU^{-1}Ws = 0\}. \quad (1.22)$$

Утверждение 1.1. Решение задачи (1.21) существует и единственно.

Доказательство. Обозначим решение s^* . Точка s^* имеет наименьшую евклидову норму среди всех точек из L и называется проекцией нуля на линейное многообразие L .

Отметим, что

$$s^T s^* \geq (s^*)^T s^* \quad \forall s \in L. \quad (1.23)$$

Действительно, возьмем произвольную точку s из L . Множество L выпуклое, поэтому при любом $\alpha \in (0,1)$ точка $s^* + \alpha(s - s^*)$ принадлежит L . По определению s^* , имеем

$$(s^* + \alpha(s - s^*))^T (s^* + \alpha(s - s^*)) \geq (s^*)^T s^*, \quad (1.24)$$

что равносильно неравенству

$$2\alpha(s^*)^T (s - s^*) + \alpha^2(s - s^*)^T (s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in L. \quad (1.25)$$

Поделив на $\alpha > 0$ и перейдя к пределу при $\alpha \rightarrow 0_+$, получим неравенство, эквивалентное неравенству (1.23).

Утверждение доказано.

Из (1.23), в частности, следуют существование и единственность решений задач (1.5), (1.6), (1.15), (1.16).

Расчет p_A^k . Если в основе построения новых математических формулировок задачи (1.5) лежит интеграция с методом выделения полного квадрата, то в основе их решения лежит интеграция с методом решения задачи КП на основе критерия оптимальности в форме Куна–Таккера.

Рассмотрим экстремальную задачу (1.19). Необходимые и достаточные условия оптимальности в форме Куна–Таккера можно записать в виде [Зангвилл, 1985; Малозёмов, 2017а]

$$s = (AU^{-1}W)^T \lambda, \quad (1.26)$$

$$Ap^k + AU^{-1}Ws = 0. \quad (1.27)$$

Здесь условие (1.26) — условие Лагранжа, λ — вектор-столбец множителей Лагранжа с m компонентами. Отсюда следует, что решение этой задачи (обозначим его как s^*) определяется по формуле (1.26):

$$s^* = (AU^{-1}W)^T \lambda^* \quad (1.28)$$

при $s = s^*$, $\lambda = \lambda^*$, где λ^* — решение системы линейных уравнений

$$Ap^k + AU^{-1}W(AU^{-1}W)^T \lambda^* = Ap^k + AU^{-1}D^{-1}(AU^{-1})^T \lambda^* = 0, \quad (1.29)$$

а решение задачи (1.5), эквивалентной (1.19), — по формуле (1.13):

$$p_A^k = p^k + U^{-1}Ws^* = p^k + U^{-1}D^{-1}(U^{-1})^T A^T \lambda^* \quad (1.30)$$

при $p = p_A^k$, $y = Ws^*$.

Расчет x^k . Если в основе построения новых математических формулировок задачи (1.6) лежит интеграция с методом выделения полного квадрата, то в основе их решения лежит интеграция с методом решения задачи КП на основе критерия оптимальности в форме Куна–Таккера.

Рассмотрим экстремальную задачу (1.20). Необходимые и достаточные условия оптимальности в форме Куна–Таккера можно записать в виде

$$s = (AU^{-1}W)^T \omega, \quad (1.31)$$

$$Ap^k - a + AU^{-1}Ws = 0. \quad (1.32)$$

Здесь ω — вектор-столбец множителей Лагранжа с m компонентами. Отсюда следует, что решение этой задачи (обозначим его как x^*) задается формулой (1.31):

$$x^* = (AU^{-1}W)^T \omega^* \quad (1.33)$$

при $s = x^*$, $\omega = \omega^*$, где ω^* — решение системы линейных уравнений

$$Ap^k - a + AU^{-1}D^{-1}(AU^{-1})^T \omega^* = 0, \quad (1.34)$$

а решение задачи (1.6), эквивалентной (1.20), — формулой (1.13):

$$x^k = p^k + U^{-1}Wx^* = p^k + U^{-1}D^{-1}(U^{-1})^T A^T \omega^* \quad (1.35)$$

при $p = x^k$, $y = Wx^*$.

Обозначим:

$$B = AU^{-1}W. \quad (1.36)$$

Утверждение 1.2. $m \times m$ -матрица BB^T обратима.

Доказательство. Для этого достаточно проверить, что однородная система $BB^T \lambda = 0$ имеет только нулевое решение. Возьмем произвольное решение λ^0 этой системы. Запишем:

$$0 = (\lambda^0)^T BB^T \lambda^0 = (\lambda^0)^T B \left((\lambda^0)^T B \right)^T = \left\| (\lambda^0)^T B \right\|^2. \quad (1.37)$$

Значит, $(\lambda^0)^T B = 0$. Строки матрицы A линейно независимы по условию задачи (1), а строки матриц P , W — по определению. Это гарантирует линейную независимость строк матрицы B . Из линейной независимости и условия $(\lambda^0)^T B = 0$ следует, что $\lambda^0 = 0$. Тем самым установлено, что матрица BB^T имеет обратную.

Утверждение доказано.

Умножим уравнение (1.29) слева на матрицу $(BB^T)^{-1}$. Получим

$$\lambda^* = -(BB^T)^{-1} Ap^k. \quad (1.38)$$

Подставив λ^* в (1.30), придем к решению задачи (1.5):

$$p_A^k = p^k - U^{-1}WB^T (BB^T)^{-1} Ap^k = p^k - U^{-1}W(U^{-1}W)^T A^T (BB^T)^{-1} Ap^k. \quad (1.39)$$

Умножим уравнение (1.34) слева на матрицу $(BB^T)^{-1}$. Получим

$$\omega^* = \lambda^* + (BB^T)^{-1} a. \quad (1.40)$$

Подставив это в (1.35), придем к решению задачи (1.6):

$$x^k = p_A^k + U^{-1}WB^T (BB^T)^{-1} a. \quad (1.41)$$

Обозначим:

$$P = I - U^{-1}WB^T (BB^T)^{-1} A. \quad (1.42)$$

Тогда формулу (1.39) можно переписать так:

$$p_A^k = Pp^k. \quad (1.43)$$

Матрица P называется матрицей ортогонального проектирования начала координат на линейное многообразие, задаваемое в виде множества решений системы линейных уравнений:

$$Ap^k + AU^{-1}Ws = 0. \quad (1.44)$$

Остановимся на основных свойствах матрицы ортогонального проектирования.

Утверждение 1.3. Матрица P вида (1.42) обладает следующими свойствами:

- 1) $PU^{-1}WB^T = 0$;
- 2) $PP = P$;
- 3) матрица P симметрична и неотрицательно определена;
- 4) ранг матрицы P равен $n - m$.

Доказательство. Согласно (1.42) имеем

$$PU^{-1}WB^T = U^{-1}WB^T - U^{-1}WB^T (BB^T)^{-1} BB^T = 0. \quad (1.45)$$

Учитывая это равенство, получаем также

$$PP = P \left(I - U^{-1}WB^T (BB^T)^{-1} A \right) = P - PU^{-1}WB^T (BB^T)^{-1} A = P. \quad (1.46)$$

Симметричность матрицы P следует из ее определения. Неотрицательная определенность проверяется так:

$$s^T Ps = s^T PPs = (Ps)^T Ps = \|Ps\|^2 \geq 0. \quad (1.47)$$

Чтобы найти ранг матрицы P , введем подпространство

$$\bar{P} = \{s \in R^n \mid Ps = 0\}. \quad (1.48)$$

Как известно, для размерности этого подпространства справедлива формула [Малозёмов, 1997]

$$\dim \bar{P} = n - \text{rank } P. \quad (1.49)$$

Согласно свойству 1 столбцы матрицы $U^{-1}WB^T = U^{-1}W(AU^{-1}W)^T$ принадлежат \bar{P} , и они линейно независимы, так как строки матрицы A линейно независимы по условию задачи (1), а строки матриц U^{-1} , W — по определению. Покажем, что любой вектор из \bar{P} можно представить в виде линейной комбинации столбцов матрицы $U^{-1}WB^T$.

Пусть $s^0 \in \bar{P}$. Согласно (1.42) имеем

$$0 = Ps^0 = s^0 - U^{-1}WB^T(BB^T)^{-1}As^0. \quad (1.50)$$

Обозначим $v^0 = (BB^T)^{-1}As^0$. Тогда $s^0 = U^{-1}WB^T v^0$. Это и означает, что s^0 есть линейная комбинация столбцов матрицы $U^{-1}WB^T$.

Установлено, что m линейно независимых столбцов матрицы $U^{-1}WB^T$ являются базисом подпространства \bar{P} . По определению размерности линейного множества, получаем $\dim \bar{P} = m$.

Теперь свойство 4 следует из формулы (1.49).

Утверждение доказано.

Пример 1.1. Предлагаемый подход к расчету p^k , p_A^k , x^k рассмотрим на примере решения (1.4), (1.5), (1.6) с данными, взятыми из [Малозёмов, 2017a]:

$$H = \begin{pmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}, h = \begin{pmatrix} -4 \\ 3 \end{pmatrix}, A = (-1 \ 2), a = 1 \quad (1.51)$$

в феноменологическом плане (в смысле понимания феномена) и конструктивном плане (как определяемое устроено и как с ним работать) [Лачинов и др., 1999].

Расчет p^k начнем с выделения полного квадрата:

$$f(p) = \frac{1}{2} p^T H p + p^T h = -19/8 + 3(-2/3 + p_1 - 1/3 p_2)^2 + 2/3(5/4 + p_2)^2. \quad (1.52)$$

Очевидно, (1.4) эквивалентна задаче

$$\min_{y \in R^2, p \in R^2} f(y) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 (u_j)^2 d_{jj} + \frac{1}{2} y^T D y \quad (1.53)$$

при условии

$$y = u + U p, u = \begin{pmatrix} -2/3 \\ 5/4 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 1 & -1/3 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2/3 \end{pmatrix}, \quad (1.54)$$

которое с помощью техники исключения Гаусса в обратном порядке запишем в виде

$$p = p^k + U^{-1} y, \quad p^k = \begin{pmatrix} 1/4 \\ -5/4 \end{pmatrix}, \quad U^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1/3 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.55)$$

Расчет p_A^k начнем с подстановки (1.55) в $A p = 0$ и перехода от (1.5) к эквивалентной задаче:

$$\min_{y \in R^n} f(y) = \frac{1}{2} y^T D y, \quad A p^k + A U^{-1} y = -11/4 - y_1 + 5/3 y_2 = 0, \quad (1.56)$$

для которой система линейных уравнений в виде необходимых и достаточных условий оптимальности в форме Куна–Таккера примет вид

$$y = \begin{pmatrix} -1/3 \\ 5/2 \end{pmatrix} \lambda, \quad -11/4 - y_1 + 5/3 y_2 = 0. \quad (1.57)$$

Ее решение: $\lambda^* = 11/18$, $y^* = (-11/54 \quad 55/36)^T$. Подстановкой y^* в (1.55) при $p = p_A^k$ получим $p_A^k = (5/9 \quad 5/18)^T$.

Расчет x^k начнем с подстановки (1.55) в $Ap - a = 0$ и перехода от (1.6) к эквивалентной задаче:

$$\min_{y \in R^n} f(y) = \frac{1}{2} y^T D y, \quad Ap^k - a + AU^{-1}y = -15/4 - y_1 + 5/3 y_2 = 0, \quad (1.58)$$

для которой система линейных уравнений в виде необходимых и достаточных условий оптимальности в форме Куна–Таккера примет вид

$$y = \begin{pmatrix} -1/3 \\ 5/2 \end{pmatrix} \omega, \quad -15/4 - y_1 + 5/3 y_2 = 0. \quad (1.59)$$

Ее решение: $\omega^* = 5/6$, $y^* = (-5/18 \quad 25/12)^T$. Подстановкой y^* в (1.55) при $p = x^k$ получим $x^k = (2/3 \quad 5/6)^T$.

Подведем итог. Следует отметить, что в приведенных выше аналитических выкладках множители Лагранжа λ^* и ω^* определялись формулами (1.38), (1.40). Однако в алгоритмах данные формулы лучше не применять: число обусловленности матрицы BB^T равно квадрату числа обусловленности B , что чревато большими ошибками вычислений. Значительно надежнее строить λ^* и ω^* следующим образом. Из формул (1.29), (1.34) следует: если λ^* и ω^* вычислять на каждой итерации спуска, то для расчета p_A^k и x^k , в расчете на одну итерацию, приходится решать систему линейных уравнений с неизменной симметричной положительно определенной $m \times m$ -матрицей BB^T и вектор-столбцами Ap^k и $(Ap^k - a)$ свободных членов с m компонентами. В этом случае факторизация Холецкого для матрицы BB^T численно устойчива без каких-либо перестановок [Гилл и др., 1985]. Ее можно положить в основу построения λ^* и ω^* . В этом случае ошибки вычисления в окрестности стационарной точки не превысят величины, пропорциональной величине обусловленности B .

Расчет λ^* и ω^* требует выполнения около $\frac{1}{6}m^3$ арифметических операций, примерно столько же, сколько требует разложение Холецкого для матрицы BB^T , а расчет p_A^k и x^k — около $\frac{1}{6}(n^3 + m^3) + \frac{1}{2}n^2m + \frac{1}{2}nm^2 = \frac{1}{6}(n+m)^3$.

Сравнение с двойственным методом. Для построения на k -й итерации процесса минимизации при линейных ограничениях-равенствах ньютоновского направления спуска предлагаемым методом надо:

1) вычислить p^k . Методы расчета факторов Холецкого U , D для матрицы $\bar{H} = U^T D U$ и направления спуска p^k в рамках одной процедуры рассматриваются в [Зеленков, Хакимова, 2013; Свириденко, 2015; Свириденко, 2016; Свириденко, 2017b]. Их построение требует выполнения около $\frac{1}{6}n^3$ арифметических операций, примерно столько же, сколько требует обычное разложение Холецкого для положительно определенной матрицы;

2) вычислить λ^* , решив уравнение

$$Ap^k + AU^{-1}D^{-1}(U^{-1})^T A^T \lambda^* = 0; \quad (1.60)$$

3) вычислить p_A^k по формуле

$$p_A^k = p^k + U^{-1}D^{-1}(U^{-1})^T A^T \lambda^*. \quad (1.61)$$

Утверждение 1.4. Если H — существенно положительно определенная матрица, то оба метода при построении направления спуска p_A^k генерируют одинаковую последовательность точек:

$$p_A^k = H^{-1}(A^T \omega^* - h) = p^k + U^{-1}D^{-1}(U^{-1})^T A^T \lambda^*, \quad (1.62)$$

$$AH^{-1}A^T \omega^* = AH^{-1}h, \quad Ap^k + AU^{-1}D^{-1}(U^{-1})^T A^T \lambda^* = 0. \quad (1.63)$$

Доказательство. По предположению, $H = \bar{H}$, поэтому

$$AH^{-1}A^T = A\bar{H}^{-1}A^T = AU^{-1}D^{-1}(U^{-1})^T A^T = AU^{-1}WW(U^{-1})^T A^T = BB^T. \quad (1.64)$$

Согласно утверждению 1.2 матрица BB^T обратима. Отсюда, в частности, следует обратимость матриц $AH^{-1}A^T$ и $AU^{-1}D^{-1}(U^{-1})^T A^T = AH^{-1}A^T$, поэтому уравнения (1.63) можно разрешить относительно ω^* и λ^* :

$$\omega^* = (AH^{-1}A^T)^{-1} AH^{-1}h, \quad \lambda^* = -(AH^{-1}A^T)^{-1} Ap^k \quad (1.65)$$

и заменить ω^* и λ^* в (1.62) по формуле (1.65). Остается доказать, что

$$p_A^k = H^{-1} \left(A^T (AH^{-1}A^T)^{-1} AH^{-1} - I \right) h = p^k - H^{-1}A^T (AH^{-1}A^T)^{-1} Ap^k. \quad (1.66)$$

Поскольку $p^k = -\bar{H}^{-1}h = -H^{-1}h$, то

$$p^k - H^{-1}A^T (AH^{-1}A^T)^{-1} Ap^k = H^{-1} \left(A^T (AH^{-1}A^T)^{-1} AH^{-1} - I \right) h. \quad (1.67)$$

Утверждение доказано.

Отсюда, в частности, следуют новые математические формулировки задач:

$$\min_{y \in R^n, p \in R^n} f(y, p) = \frac{1}{2} y^T D y, \quad Ap^k + AU^{-1}y = 0, \quad p = p^k + U^{-1}y, \quad (1.68)$$

$$\min_{y \in R^n, p \in R^n} f(y, p) = \frac{1}{2} y^T D y, \quad Ap^k - a + AU^{-1}y = 0, \quad p = p^k + U^{-1}y, \quad (1.69)$$

двойственных квадратичным задачам (1.5), (1.6). Здесь обозначение $f(y, p)$ отражает неявную зависимость целевой функции от переменной p .

Докажем, что одна итерация с предлагаемым методом расчета направления спуска p_A^k требует меньше вычислений, чем одна итерация с двойственным. Очевидно, что различие

в числе арифметических операций возникает при вычислении матрицы H^{-1} (около $\frac{1}{2}n^3$ [Стренг, 1980]) двойственным методом и при расчете направления спуска p^k (около $\frac{1}{6}n^3$ [Свириденко, 2017b]) предлагаемым алгоритмом. Отсюда следует, что выигрыш в числе арифметических операций равен $\frac{1}{2}n^3 - \frac{1}{6}n^3 = \frac{1}{3}n^3$.

Сравнение с прямым методом. При известной матрице Z для расчета p_A^k прямым методом на каждой итерации процесса минимизации при линейных ограничениях-равенствах требуется около $\frac{1}{6}(n-m)^3 + \frac{1}{2}n^2(n-m) + \frac{1}{2}n(n-m)^2 = \frac{1}{6}(n+n-m)^3 - \frac{1}{6}n^3$ арифметических операций. Отсюда следует, что одна итерация с предлагаемым методом построения направления спуска требует меньшего числа вычислений, чем одна итерация с прямым:

$$\frac{1}{6}(n+n-m)^3 - \frac{1}{6}n^3 - \frac{1}{6}(n+m)^3 > 0, 1 \leq m \leq \lfloor 0.426075841n \rfloor. \quad (1.70)$$

2. О проектировании нуля на многогранник и близкие вопросы

Малозёмов в [Малозёмов, 2017b] представил варианты постановки задачи о проектировании начала координат на выпуклый многогранник. Подобные варианты возникают при решении некоторых задач науки и техники, например численного анализа, исследования операций, оптимизации и управления [Поляк, 2006], электроэнергетики [Гродецкий, 2012], вычислительной геометрии, распознавания образов [Ангелов, Сукач, 2012], недифференцируемой оптимизации [Габидуллина, 2006; Ангелов, Сукач, 2012]. Таким образом, работа [Малозёмов, 2017b] приобретает особую актуальность.

Исследования [Малозёмов, 2017b] продолжены в [Свириденко, 2018]. Предложен алгоритм преобразования задачи минимизации квадратичной функции с положительно определенной матрицей вторых производных на множестве, заданном набором линейных неравенств, в эквивалентную задачу о проектировании начала координат на выпуклый многогранник. В частности, описанная выше модификация этого подхода реализована в алгоритме решения задачи о проектировании начала координат на линейное многообразие. Подобные алгоритмы возникают при построении некоторых методов решения задачи о проектировании начала координат на выпуклый многогранник [Малозёмов, 2017a; Козлов, 2011].

В данной работе представлен вариант постановки задачи о проектировании начала координат на вершину выпуклого многогранника.

О проектировании нуля на вершину многогранника. Интеграция техники исключения Гаусса и факторизации Холецкого определяет и подход к построению непрерывного аналога задачи минимизации псевдобулевой функции:

$$\min_{p \in B^n} f(p) = \frac{1}{2} p^T H p + p^T h. \quad (2.1)$$

Под псевдобулевой функцией понимается произвольное отображение множества бинарных наборов длины n на вещественную прямую. Такого рода функции являются естественным обобщением классических булевых функций и находят применение в разного рода прикладных исследованиях [Crama, Hammer, 2011].

В основе построения непрерывного аналога лежит аппроксимация псевдобулевой функции строго выпуклой квадратичной функцией от вещественных переменных таким образом, чтобы их значения совпадали на множестве вершин B^n единичного n -мерного куба. Учитывая тождество

$$p_\gamma^2 \equiv p_\gamma, p_\gamma \in \{0, 1\}, \gamma = 1, \dots, n, \quad (2.2)$$

для этого достаточно на каждой итерации γ вычислительной схемы расчета $p^* = p^k$, D , U прямым мультипликативным алгоритмом потребовать

$$h_\gamma = h_\gamma + h_{\gamma\gamma} - 1, \quad d_{\gamma\gamma} = h_{\gamma\gamma} = 1. \quad (2.3)$$

В результате перейдем от (2.1) к эквивалентной задаче:

$$\min_{y \in R^n, p \in B^n} Q(y, p) = \frac{1}{2} y^T y, \quad p = p^k + U^{-1} y. \quad (2.4)$$

Детальное описание всех операций, выполняемых по ходу расчета p^* , U , обсуждается ниже.

Обозначение $Q(y, p)$ целевой функции отражает неявную зависимость от переменной p . Прежде чем выписать формулы, получающиеся из (2.4), необходимо исключить эту зависимость из дальнейшего рассмотрения.

Отметим, что условие задачи (2.4) определяет взаимно однозначное соответствие [Стренг, 1980] между множеством вершин единичного n -мерного куба и множеством S значений переменной y . Другими словами, каждому $p \in B^n$ соответствует единственное значение $y \in S$ и, наоборот, каждому $y \in S$ соответствует единственная вершина единичного n -мерного куба.

Обозначим как $\{\bar{u}_{ij}\}$ элементы верхней треугольной $n \times n$ -матрицы U^{-1} с диагональными элементами равными единице и перейдем от матричной формы записи условия задачи (2.4) к системе уравнений

$$p_i = p_i^* + y_i + \sum_{j=i+1}^n \bar{u}_{ij} y_j, \quad i=1, \dots, n. \quad (2.5)$$

Очевидно, что S — множество угловых точек выпуклого многогранника — полиэдра:

$$-p_i^* \leq y_i + \sum_{j=i+1}^n \bar{u}_{ij} y_j \leq 1 - p_i^*, \quad i=1, \dots, n, \quad (2.6)$$

граница которого состоит из вершин и граней различных размерностей от 1 до $n-1$ [Циглер, 2014]. Полиэдр является возмущением n -мерного куба (или n -гиперкуба), имеет $2n$ граней и 2^n вершин [Пападимитриу, Стайглиц, 1985]. Каждая грань имеет $2n-2$ соседние грани и одну симметричную грань-антипод [Казанцев, 2012].

Таким образом, построение непрерывного аналога сводится к варианту постановки задачи о проектировании начала координат на вершину выпуклого многогранника:

$$\min_{y \in S \subset R^n} Q(y) = \frac{1}{2} y^T y. \quad (2.7)$$

Вычислительная схема расчета p^* , U .

В процессе вычисления p^k , 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 -я строка матрицы H ;

$h_\gamma^\gamma + h_{\gamma\gamma}^\gamma p_\gamma + h_{\gamma\gamma+1}^\gamma + \dots + h_{\gamma n}^\gamma p_n = 0$ — уравнение связи γ -й 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 -я строка верхнего треугольного фактора U ;

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

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

Шаг 0 (инициализация). Положить:

$$\gamma = 1.$$

Рассчитать элементы уравнения связи γ -й строки:

$$h_\gamma^\gamma = h_\gamma, \left(h_{\gamma\gamma}^\gamma \quad h_{\gamma\gamma+1}^\gamma \quad \cdots \quad h_{\gamma n}^\gamma \right) = \left(h_{\gamma\gamma} \quad h_{\gamma\gamma+1} \quad \cdots \quad h_{\gamma n} \right).$$

Положить:

$$h_\gamma^\gamma = h_\gamma^\gamma + h_{\gamma\gamma}^\gamma - 1, \quad h_{\gamma\gamma}^\gamma = 1.$$

Переписать уравнение связи γ -й строки:

$$p_\gamma = p_\gamma^\gamma + e_{1_\gamma\gamma+1}^\gamma p_{\gamma+1} + e_{1_\gamma\gamma+2}^\gamma p_{\gamma+2} + p_{\gamma+2} + \cdots + e_{1_\gamma n}^\gamma p_n,$$

$$p_\gamma^\gamma = -h_\gamma^\gamma, \quad e_{1_\gamma \bullet}^\gamma = -\left(h_{\gamma\gamma+1}^\gamma \quad h_{\gamma\gamma+2}^\gamma \quad \cdots \quad h_{\gamma n}^\gamma \right).$$

Положить:

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

$$p^\gamma = \left(p_1^\gamma \quad p_2^\gamma = 0 \quad p_3^\gamma = 0 \quad \cdots \quad p_n^\gamma = 0 \right)^T$$

и перейти к шагу 4.

Шаг 1 (расчет элементов $h_\gamma^\gamma, h_{\gamma j}^\gamma$ уравнение связи γ -й строки). Вычислить:

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

Положить:

$$h_\gamma^\gamma = h_\gamma^\gamma + h_{\gamma\gamma}^\gamma - 1, \quad h_{\gamma\gamma}^\gamma = 1.$$

Шаг 2 (расчет главной строки $e_{1_\gamma \bullet}^\gamma$ мультипликатора $E_{1_\gamma}^\gamma$, строки $u_{\gamma \bullet}$ верхнего треугольного фактора U , решения p^γ системы линейных уравнений $h_{i \bullet} p = -h_i, i = 1, \dots, \gamma$). Переписать уравнение связи γ -й строки:

$$p_\gamma = p_\gamma^\gamma + e_{1_\gamma\gamma+1}^\gamma p_{\gamma+1} + e_{1_\gamma\gamma+2}^\gamma p_{\gamma+2} + p_{\gamma+2} + \cdots + e_{1_\gamma n}^\gamma p_n,$$

$$p_\gamma^\gamma = -h_\gamma^\gamma, \quad e_{1_\gamma \bullet}^\gamma = -\left(h_{\gamma\gamma+1}^\gamma \quad h_{\gamma\gamma+2}^\gamma \quad \cdots \quad h_{\gamma n}^\gamma \right).$$

Вычислить:

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

Положить:

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

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

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

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

Шаг 4 (расчет p^*). Положить:

$$\gamma = \gamma + 1.$$

Если $\gamma \neq n$, то перейти к шагу 1; иначе вычислить:

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

Положить:

$$h_n^n = h_n^n + h_{n-n}^n - 1, \quad h_{n-n}^n = 1, \\ p^* = p^n = \left(p_1^{n-1} - e_{1_{n-1} n}^1 h_n^n \quad p_2^{n-1} - e_{1_{n-1} n}^2 h_n^n \quad \dots \quad p_{n-1}^{n-1} - e_{1_{n-1} n}^{n-1} h_n^n \quad -h_n^n \right)^T.$$

Подведем итог. Возможно, наиболее прямой подход к решению задачи КП:

$$\min_{y \in R^n} Q(y) = \frac{1}{2} y^T y, \quad -p_i^* \leq y_i + \sum_{j=i+1}^n \bar{u}_{ij} y_j \leq 1 - p_i^*, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.8)$$

заключается в линейной аппроксимации [Зангвилл, 1985]. Для заданной допустимой точки y^k , точка y^{k*} будет решением задачи линейного программирования (здесь и далее — ЛП), которая имеет такие же ограничения, что и задача (2.8), и целевая функция которой представляет линейную аппроксимацию $Q(y)$ в y^k . Тогда направление $d^k = y^{k*} - y^k$ является хорошим направлением для поиска меньшего значения $Q(y)$.

В любой допустимой точке y^k линейной аппроксимацией $Q(y)$ является $Q_L(y)$, где

$$Q_L(y) = Q(y^k) + (y^k)^T (y - y^k). \quad (2.9)$$

Алгоритм при данной $Q_L(y)$ и фиксированной y^k находит решение следующей подзадачи:

$$\min_{y \in R^n} Q_L(y) = Q(y^k) + (y^k)^T (y - y^k), \quad -p_i^* \leq y_i + \sum_{j=i+1}^n \bar{u}_{ij} y_j \leq 1 - p_i^*, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.10)$$

Но так как некоторые члены целевой функции постоянны, то алгоритм фактически решает более простую, но эквивалентную подзадачу ЛП:

$$\min_{y \in R^n} Q_L(y) = (y^k)^T y, \quad -p_i^* \leq y_i + \sum_{j=i+1}^n \bar{u}_{ij} y_j \leq 1 - p_i^*, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.11)$$

где y^k — фиксированная допустимая точка, а y — переменная. Далее, используя направление

$$d^k = y^{k*} - y^k, \quad (2.12)$$

построим следующую точку y^{k+1} по правилу:

$$y^{k+1} = y^k + \tau_k d^k, \quad Q(y^{k+1}) = \min Q(y^k + \tau_k d^k), \quad 0 \leq \tau_k \leq 1. \quad (2.13)$$

Доказано, что метод линейной аппроксимации сходится к решению задачи (2.8) [Зангвилл, 1985], поэтому его можно положить в основу поиска минимального расстояния между началом

координат и угловой точкой выпуклого многогранника (2.6). Для этого достаточно потребовать построения следующей точки y^{k+1} по правилу:

$$y^{k+1} = y^k + \tau_k d^k, \quad Q(y^{k+1}) = \min Q(y^k + \tau_k d^k), \quad \tau_k \in \{0, 1\}. \quad (2.14)$$

Таким образом, задача о проектировании начала координат на вершину выпуклого многогранника — полиэдра — (2.6) существенно проще задачи поиска минимального расстояния между началом координат и границей многогранного множества ограничений, поскольку сводится только к решению подзадач ЛП, размерность которых не превышает числа переменных n .

Кли и Минти [Klee, Minty, 1972] показали, что симплекс-метод решения подзадач вида (2.11) с правилом Данцига не полиномиален. Они построили специальный класс ЛП-задач, на которых число итераций алгоритма растет экспоненциально быстро. Допустимая область этих задач, как и полиэдр (2.6), является деформированным n -мерным кубом, так что симплекс-метод последовательно проходит все его 2^n вершин.

Пример Кли и Минти легко модифицировать и получить принадлежащий Авису и Хваталу [Avis, Chvátal, 1978] результат о том, что и с правилом Блэнда метод не будет полиномиальным.

Аналогично в работах Джерослоу [Jeroslow, 1973], Голдфарба и Сита [Goldfarb, Sit, 1979] показано, что соответственно правило наибольшего улучшения, наискорейший спуск по ребру и правило выбора ведущего элемента (Schattenecken-algorithmus) Боргвардта не приводят к полиномиальным версиям симплекс-метода.

«Плохие» линейные программы получаются путем дальнейшей деформации куба типа скашивания ребер, заставляющих симплекс-метод «проглядеть» короткий путь к оптимальной вершине. Основным препятствием тут является определенная «близорукость» симплекс-метода: процедура не отсеивает все неперспективные варианты и не выделяет локально плохие, но глобально хорошие пути [Схрейвер, 1991]. Поэтому в данной работе для решения подзадач (2.11) предлагается численно устойчивый прямой мультипликативный метод решения задач ЛП, учитывающий разреженность матриц, представленных в упакованном виде [Свириденко, 2017a]. Преимущество подхода состоит в возможности уменьшения размерности и 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. Кроме того, в [Хакимова и др., 2010] доказано, что предлагаемый метод позволяет уменьшить по кубическому закону число арифметических операций, необходимых для решения задачи ЛП, по сравнению с известным мультипликативным алгоритмом симплекс-метода Малкова [Малков, 1977].

3. Заключение

Боргвардт [Borgwardt, 1982] был первый, кто в рамках некоторой естественной вероятностной модели и правила выбора ведущего элемента (метод тневых вершин) показал, что в среднем время работы симплекс-метода полиномиально ограничено. Более точно, Боргвардт установил, что среднее число итераций (этап 2) при решении задачи ЛП:

$$\min_{x \in R^n} L(x) = cx, \quad Ax \leq b \quad (3.1)$$

равно

$$O\left(n^3 m^{1/(n-1)}\right). \quad (3.2)$$

Здесь A есть $m \times n$ -матрица, c — вектор-строка с m компонентами, а b — вектор-столбец с m компонентами. Боргвардт при этом предполагал положительность b .

Независимо, используя другую вероятностную модель и другое правило ведущего элемента, Смейл [Smale, 1983] получил для любого фиксированного m верхнюю границу:

$$O\left(n^3 m^{1/(n-1)}\right) \quad (3.3)$$

числа итераций для решения задачи ЛП:

$$\min_{x \in R^n} L(x) = cx, \quad Ax \leq b, \quad x \geq 0. \quad (3.4)$$

Граница Смейла не является полиномиально ограниченной, но иногда лучше, чем граница Боргвардта (например, если m фиксировано, а $n \rightarrow \infty$).

Хаймович [Haimovich, 1983] совместил правило Боргвардта и более общую, чем у Смейла, вероятностную модель и показал, что среднее число итераций линейно и не превосходит

$$\min\left\{\frac{1}{2}n, \frac{1}{2}(m-n+1), \frac{1}{8}(m+1)\right\}, \quad (3.5)$$

$$\min\left\{\frac{1}{2}n, \frac{1}{2}(m+1), \frac{1}{8}(m+n+1)\right\} \quad (3.6)$$

для задач вида (3.1) и (3.4) соответственно. Здесь уже условие Боргвардта $b > 0$ не предполагается, что согласуется с почти линейным ростом числа итераций симплекс-метода на практике.

Схрейвер [Схрейвер, 1991] в рамках естественной вероятностной модели и правила выбора ведущего элемента (Schattenecken-algorithmus) Боргвардта повторил результат Хаймовича и вывел границу $\frac{1}{2}n$ для задач вида (3.1).

Для повторения результата Схрейвера, исключая условия построения естественной вероятностной модели [Схрейвер, 1991], прежде всего требуются постановка и решение следующих задач исследования.

- *Постановка первой задачи исследования.* Ангелов и Сукач [Ангелов, Сукач, 2012] подчеркивают, что при решении вырожденных задач ЛП симплекс-методом часто возникают большие последовательности итераций, на которых целевая функция практически не изменяется. Вероятность появления таких вырожденных итераций резко возрастает с увеличением размерности задачи и зачастую делает применение алгоритма симплекс-метода бесполезным. Большинство классических методов теории вырожденного ЛП было посвящено лишь борьбе с заикливанием, избежать вырожденных итераций при использовании таких методов не удавалось. Эти способы сводились либо к специальному выбору выводимого из базиса вектора (лексикографическое правило и правило случайного выбора [Dantzig, 1963]), либо к выбору вводимого в базис вектора (правило Данцига [Dantzig, 1989]), либо к одновременному выбору обоих этих векторов (правило Блэнда [Bland, 1977]).

Актуальная задача исследования: доказать, что прямой мультипликативный алгоритм решения задач ЛП [Свириденко, 2017а] с правилом Данцига выбора ведущего элемента не циклится, но при этом могут возникать последовательности итераций, на которых целевая функция практически не изменяется. Также требуется предложить метод борьбы с вырожденностью, основанный на правиле Данцига выбора ведущего элемента, и показать его эффективность на примере решения задач ЛП на заикливание симплекс-метода, если в процессе решения возникают последовательности итераций, на которых целевая функция практически не изменяется.

- *Постановка второй задачи исследования.* При каждой итерации (модифицированного) симплекс-метода к последовательности мультипликаторов добавляется еще один, и растет трудоемкость умножения, которая линейно зависит от длины последовательности. При этом Романовский [Романовский, 2017] отмечает, что набор мультипликаторов представляет собой последовательность структур, каждая из которых составлена из двух элементов, и можно ожидать, что размер этой последовательности неудобно велик, но точно неизвестен. Он заслуживает серьезного обсуждения.

Актуальная задача исследования: доказать, что прямой мультипликативный алгоритм решения задач ЛП [Свириденко, 2017а] с правилом Данцига выбора ведущего элемента генерирует последовательность мультипликаторов, количество которых не превосходит величины $\min\{n, m\}$.

Список литературы (References)

- Ангелов Т. А., Сукач М. П.* Метод нахождения ближайшей к началу координат точки выпуклого многогранника // Процессы управления и устойчивость: Труды 43-й международной научной конференции аспирантов и студентов / под ред. А. С. Ерёмина, Н. В. Смирнова. — СПб.: Издательский Дом Санкт-Петербургского государственного университета, 2012. — С. 9–14.
- Angelov T. A., Sukach M. P.* Metod nahozhdeniya blizhajshej k nachalu koordinat toчки выпуклого mnogogrannika [Method for finding the point of a convex polyhedron closest to the origin] // Management Processes and Sustainability: Proceedings of the 43rd International Scientific Conference of Graduate Students and Students / ed. A. S. Eremina, N. V. Smirnova. — Saint-Petersburg: Publishing House of St. Petersburg State University, 2012. — P. 9–14 (in Russian).
- Бахшиян Б. Ц., Матасов А. И., Федяев К. С.* О решении вырожденных задач линейного программирования // Автоматика и телемеханика. — 2000. — № 1. — С. 105–117.
- Bakhshiyani B. Ts., Matasov A. I., Fedyayev K. S.* O reshenii vyrozhdennykh zadach lineynogo programmirovaniya [On the solution of degenerate linear programming problems] // Automation and remote control. — 2000. — No. 1. — P. 105–117 (in Russian).
- Габидуллина З. Р.* Теорема отделимости выпуклого многогранника от нуля пространства и ее приложения в оптимизации // Известия вузов. — 2006. — № 12. — С. 21–26.
- Gabidullina Z. R.* Teorema otdelivosti выпуклого mnogogrannika ot nulya prostranstva i yeyo prilozheniya v optimizatsii [The theorem of separability of a convex polyhedron from zero space and its applications in optimization] // Izvestiya vuzov. — 2006. — No. 12. — P. 21–26 (in Russian).
- Гилл Ф., Мюррей У.* Численные методы условной оптимизации. — М.: Мир, 1977.
- Gill Ph. E., Murray W.* Numerical methods for constrained optimization. — National physical laboratory Teddington, Middlesex // Academic Press, 1974. (Russ. ed.: *Gill F., Mjurrej U.* Chislennyye metody uslovnoy optimizatsii. — Moscow: Mir, 1977.)
- 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 Ph., Murray U., Wright M.* Prakticheskaja optimizatsija. — Moscow: Mir, 1985.)
- 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 linejnykh dinamicheskikh sistem bol'shoj razmernosti s razrezhennymi matricami koeficientov [Modeling linear dynamical systems of high dimension with sparse matrices of coefficients] // Informatics and computer technologies — 2011. — Donetsk: Donetsk national technical University, 2011. — P. 199–203 (in Russian).
- Гродецкий М. В.* Решение оптимизационных задач в энергетике при большом числе ограничений типа равенства // International conference “Energy of Moldova – 2012. Regional aspects of development”. — Chisinau, Republic of Moldova — October 4–6. — 2012. — С. 185–187.
- Grodetskiy M. V.* Reshenie optimizatsionnykh zadach v ehnergetike pri bol'shom chisle ogranichenij tipa ravenstva [The solution of optimization tasks in the energy sector with a large number of equality constraints] // International conference “Energy of Moldova – 2012. Regional aspects of development”. — Chisinau, Republic of Moldova — October 4–6. — 2012. — P. 185–187 (in Russian).
- Дмитриева О. А.* Оптимизация выполнения матрично-векторных операций при параллельном моделировании динамических процессов // Наукові праці ДонНТУ. Сер. Обчислювальна техніка та автоматизація. — 2014. — № 1 (26). — С. 94–100.
- Dmitrieva O. A.* Optimizatsija vypolneniya matrichno-vektornykh operacij pri parallelnom modelirovanii dinamicheskikh 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).

- Зангвилл У. И.* Нелинейное программирование. Единый подход. — М.: Советское радио, 1985.
Zangwill W. I. Nonlinear programming a unified approach. Prentice-Hall, Inc. // Englewood, 1969. (Russ. ed.: *Zangwill U. I.* Nelineynoye programmirovaniye. Yedinyy podkhod. — Moscow: Sovetskoye radio, 1985.)
- Зеленков Г. А., Хакимова А. Б.* Подход к разработке алгоритмов ньютоновских методов оптимизации, программная реализация и сравнение эффективности // Компьютерные исследования и моделирование. — 2013. — Т. 5, № 3. — С. 367–377.
Zelenkov G. A., Hakimova A. B. Podhod k razrabotke algoritmov n'jutonovskih metodov optimizacii, programmaja realizacija i sravnenie jeffektivnosti [Approach to development of algorithms of Newtonian methods of unconstrained optimization, their software implementation and benchmarking] // Computer Research and Modeling. — 2014. — Vol. 5, No. 3. — P. 367–377 (in Russian).
- Казанцев И. Г.* О конструктивном вычислении сечений многомерного куба // Интерэкспо Гео-Сибирь. — 2012. — Т. 1, № 4. — С. 168–171.
Kazantsev I. G. O konstruktivnom vychislenii secheniy mnogomernogo kuba [On the constructive calculation of the cross sections of a multidimensional cube] // Interekspo Geo-Sibir'. — 2012. — Vol. 1, No. 4. — P. 168–171 (in Russian).
- Козлов В. Н.* Системный анализ, оптимизация и принятие решений: учебное пособие. — СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2011. — 244 с.
Kozlov V. N. Sistemnyy analiz, optimizatsiya i prinyatiye resheniy [System analysis, optimization and decision making]: a tutorial. — Saint-Petersburg: Polytechnic University Publishing House, 2011. — 244 p. (in Russian).
- Лачинов В. М., Поляков А. О.* Информодинамика или путь к Миру открытых систем. — СПб.: Изд-во СПбГТУ, 1999.
Lachinov V. M., Polyakov A. O. Informodinamika ili put' k Miru otkrytyh sistem [Informadynamics or the way to the World of open systems]. — Saint-Petersburg: Izd-vo SPbGTU, 1999 (in Russian).
- Малков У. Х.* Обзор путей повышения эффективности мультипликативного алгоритма симплекс-метода // Математические методы решения экономических задач: сборник. — М.: Наука, 1977. — № 7.
Malkov U. Kh. Obzor putey povysheniya effektivnosti mul'tiplikativnogo algoritma simpleks-metoda [Review of ways to increase the efficiency of the multiplicative simplex method] // Mathematical methods for solving economic problems: collection. — Moscow: Nauka, 1977. — No. 7 (in Russian).
- Малозёмов В. Н.* Линейная алгебра без определителей. Квадратичная функция. — СПб.: Изд-во СПбГУ, 1997. — 80 с.
Malozomov V. N. Lineynaya algebra bez opredeliteley. Kvadratischnaya funktsiya [Linear algebra without determinants. Quadratic function]. — Saint-Petersburg: Publishing house of St. Petersburg State University, 1997. — 80 p. (in Russian).
- Малозёмов В. Н.* Воспользуемся теоремой Куна–Таккера // Избранные лекции по экстремальным задачам. Ч. 1 / под ред. проф. В. Н. Малозёмова. — СПб.: Изд-во ВВМ, 2017а. — С. 182–187.
Malozomov V. N. Vospol'zuyemsa teoreмой Kuna–Takquera [We use the Kuhn–Tucker theorem] // Selected lectures on extremal problems. Part 1 / ed. prof. V. N. Malozemova. — Saint-Petersburg: BVM Publishing House, 2017a. — P. 182–187 (in Russian).
- Малозёмов В. Н.* О задаче проектирования нуля на многогранник // Избранные лекции по экстремальным задачам. Ч.1 / под ред. проф. В. Н. Малозёмова. — СПб.: Изд-во ВВМ, 2017б. — С. 220–225.
Malozomov V. N. O zadache proyektirovaniya nulya na mnogogrannik [On the problem of designing a zero on a polyhedron] // Selected lectures on extremal problems. Part 1 / ed. prof. V. N. Malozemova. — Saint-Petersburg: BVM Publishing House, 2017b. — P. 220–225 (in Russian).
- Панферов С. В.* Обобщенный приведенный метод Ньютона: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. — М., 2005.
Panferov S. V. Obobshchennyyu privedennyyu metod N'yutona [The generalized reduced Newton method]: thesis for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences. — Moscow, 2005 (in Russian).
- Пападимитриу Х., Стайглиц К.* Комбинаторная оптимизация. Алгоритмы и сложность. — М.: Мир, 1985.
Papadimitriou Ch. H. Combinatorial optimization: Algorithms and Complexity. — Massachusetts Institute of Technology. National Technical University of Athens. — New Jersey: Prentice-Hall Inc. Englewood Cliffs, 1982. (Russ. ed.: *Papadimitriou H., Stajglic K.* Kombinatornaja optimizacija. Algoritmy i slozhnost'. — Moscow: Mir, 1985.)

- 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 Б. Т.* Метод Ньютона и его роль в оптимизации и вычислительной математике // Труды ИСА РАН. — 2006. — Т. 28. — С. 48–66.
Poljak B. T. Metod N'jutona i ego rol' v optimizacii i vychislitel'noj matematike [Newton's method and its role in optimization and computational mathematics] // Proceedings of ISA RAS. — 2006. — Vol. 28. — P. 48–66 (in Russian).
- Романовский И. В.* Мультипликативное представление обратной матрицы в модифицированном симплекс-методе // Избранные лекции по экстремальным задачам. Ч. 1 / под ред. проф. В. Н. Малозёмова. — СПб.: Изд-во ВВМ, 2017. — С. 220–225.
Romanovskiy I. V. Mul'tiplikativnoye predstavleniye obratnoy matritsy v modifitsirovannom simpleks-metode [Multiplicative representation of the inverse matrix in the modified simplex method] // Selected lectures on extremal problems. Part 1 / ed. prof. V. N. Malozemov. — Saint-Petersburg: BBM Publishing House, 2017. — P. 220–225 (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., Zelenkov G. A. Vzaimosvjaz' i realizacija kvazin'jutonovskih i n'jutonovskih metodov bezuslovnoj optimizacii [Correlation and realization of quasi-Newton methods of absolute optimization] // Computer Research and Modeling. — 2016. — Vol. 8, No. 1. — P. 55–78 (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 razrezhenykh matric. Nesimmetrichnye linejnye sistemy [Direct multiplicative methods for sparse matrices. Linear Programming] // Computer research and modeling. — 2017a. — 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 razrezhenykh matric. N'jutonovskie metody [Direct multiplicative methods for sparse matrices. Newton methods] // Computer research and modeling. — 2017b. — Vol. 9, No. 5. — P. 679–703 (in Russian).
- Свириденко А. Б.* Прямые мультипликативные методы для разреженных матриц. Квадратичное программирование // Компьютерные исследования и моделирование. — 2018. — Т. 10, № 4. — С. 407–420.
Sviridenko A. B. Prjamyje mul'tiplikativnye metody dlja razrezhenykh matric. Kvadratischnoye programmirovaniye [Direct multiplicative methods for sparse matrices. Quadratic programming] // Computer research and modeling. — 2018. — Vol. 10, No. 4. — P. 407–420 (in Russian).
- Стренг Г.* Линейная алгебра и ее применения. — М.: Мир, 1980.
Strang G. Linear algebra and its applications / Massachusetts Institute of Technology. — Academic Press, New York, San Francisco, London, 1976. (Russ. ed.: *Streng G.* Linejnaja algebra i ee primenenija. — Moscow: Mir, 1980.)
- Схрейвер А.* Теория линейного и целочисленного программирования: в 2 т. — М.: Мир, 1991. — Т. 1. — 360 с.
Schrijver A. Theory of linear and integer programming // Department of Econometrics, Tilburg University and Centrum voor Wickunde en Informatica, Amsterdam. A Wiley-Interscience Publication, John Wiley & Sons, 1990. (Russ. ed.: *Shrejver A.* Teorija linejnogo i celochislennogo programmirovaniya. — Moscow: Mir, 1991.)
- Хакимова А. Б., Зеленков Г. А., Рзун И. Г.* Подход к увеличению эффективности мультипликативного алгоритма симплекс-метода // Динамика неоднородных систем: Труды ИСА РАН. — Вып. 14, Т. 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] // Dynamics of heterogeneous systems: The works of ISA Russian Academy of Sciences. — 2010. — Iss. 14, Vol. 53 (2). — P. 245–251 (in Russian).

Хакимова А. Б., Хакимов Б. Б. Единый подход к решению задач математического программирования гуманитарной компьютерной клиники // Системные, информационные и технические средства и технологии в профессиональной деятельности, образовании, оздоровлении и профилактике: Сборник статей I-й международной конференции. — 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] // System, information and technical tools and technologies in their professional activities, education, rehabilitation and prevention: A collection of articles I international conference. — Saint-Petersburg, 2003. — P. 88–92 (in Russian).

Циглер Г. М. Теория многогранников. — М.: Изд-во МЦНМО, 2014.

Ziegler G. M. Lectures on Polytopes. — New York: Springer-Verlag Inc., 1995. (Russ. ed.: *Cigler G. M.* Teorija mnogogrannikov. — Moscow: Izd-vo MCNMO, 2014.)

Avis D., Chvátal V. Notes on Bland's pivoting rule. Polyhedral Combinatorics // Mathematical Programming Study. — 1978. — Vol. 8. — P. 24–34.

Bland R. G. New finite pivot rules for simplex method Math // Oper. Res. — 1977. — Vol. 2. — P. 103–107.

Borgwardt K. H. The average number of pivot steps of required by the simplex method is polynomial // Zeitschrift fur Operations Research. — 1982. — Vol. 26, No. 1. — P. 157–177.

Crama Y., Hammer P. L. Bimatroidal independence systems // Mathematical Methods of Operations Research. — 1989. — Vol. 33, No. 3. — P. 149–165.

Dantzig G. B. Linear Programming and Extensions. — Princeton U.P., 1963.

Dantzig G. B. Making Progress During a Stall in the Simplex Algorithm // Linear Algebra and its Applications. — 1989. — Vol. 114/115. — P. 251–259.

Gill P. E., Murray W. Newton-type methods for unconstrained and linearly constrained optimization // Math. Prog. — 1974. — Vol. 28. — P. 311–350.

Goldfarb D., Sit W. T. Worst case behavior of the steepest edge simplex method // Discrete Applied Mathematics. — 1979. — Vol. 1. — P. 277–285.

Jeroslow R. G. The simplex algorithm with the pivot rule of maximizing improvement criterion // Discrete Mathematics. — 1973. — Vol. 4. — P. 367–377.

Klee V., Minty G. J. How good is the simplex algorithm? In Shisha O. (ed.) Inequalities III. — Academic Press, 1972. — P. 159–175.

Smale S. On the average number of steps in the simplex method of linear programming // Mathematical Programming. — 1983. — Vol. 27. — P. 241–262.