WayScience

3rd International Scientific and Practical Internet Conference

«Importance of Soft Skills for Life and Scientific Success»

ISBN 978-617-8293-21-5

WayScience

3rd International Scientific and Practical Internet Conference

«Importance of Soft Skills for Life and Scientific Success»

ISBN 978-617-8293-21-5

Editorial board of International Electronic Scientific and Practical Journal «WayScience» (ISSN 2664-4819 (Online)

Importance of Soft Skills for Life and Scientific Success: Proceedings of the 3rd International Scientific and Practical Internet Conference, March 7-8, 2024. FOP Marenichenko V.V., Dnipro, Ukraine, 239 p.

ISBN 978-617-8293-21-5

3rd International Scientific and Practical Internet Conference "Importance of Soft Skills for Life and Scientific Success" is devoted to the experience of forming and developing competencies needed by the modern world.

Topics cover all sections of the International Electronic Scientific and Practical Journal "WayScience", namely:

- public administration sciences;
- philosophical sciences;
- economic sciences;
- historical sciences;
- legal sciences;
- agricultural sciences;
- geographic sciences;
- pedagogical sciences;
- psychological sciences;
- sociological sciences;
- political sciences;
- philological sciences;
- technical sciences;
- medical sciences;
- chemical sciences;
- biological sciences;
- physical and mathematical sciences;
- other professional sciences.

Dnipro, Ukraine – 2024

ПОБУДОВА ПОЗИТИВНО ВИЗНАЧЕНИХ МАТРИЦЬ В ЗАДАЧАХ МАТЕМАТИЧНОГО ПРОГРАМУВАННЯ

Антонюк А.О.
Міжнародний науково-технічний університет ім. Ю. Бугая, Київ, Україна
tolik__@ukr.net
Антонюк Н.Г.
Національний університет «Києво-Могилянська академія», Київ, Україна
tolik__@ukr.net
Белих Т.В.
Інститут кібернетики НАН України, Київ, Україна
krainaz@ukr.net

В багатьох задачах математичного програмування широко застосовуються матричні функції. Зокрема, в [1,2] розглядаються задачі мінімізації матричних функцій. Під задачею мінімізації матричної функції (або матричної оптимізації) розуміється така задача, яку зручно формулювати в термінах матричного обчислення. Багато важливих характеристик матриць (власні числа симетричних квадратних матриць, їх суми, їх визначники) представляють собою негладкі функції від елементів матриць. Тому матричні задачі оптимізації часто виявляються негладкими, що суттєво ускладнює їх розв’язки класичними методами. Одна з перших робіт, в якій вивчалися властивості субградієнтів негладких функцій, що виникають у зв'язку з обмеженнями позитивної визначеності, коли обрані параметри входять лише в діагональні елементи матриць, була робота Флетчера [3]. В роботі [4] описані властивості деяких матричних функцій і наведені алгоритми розв’язку матричних задач математичного програмування. Один з найбільш практично ефективних алгоритмів розв'язання такого роду задач – це r-алгоритм [5].

Розглянемо задачу

$$\min\{f(x) \mid f_i(x) \le 0,\ i = 1,...,k,\ x \in M\},$$

де $x \in R^n$, f, f_i – опуклі неперервні функції, M – опукла множина.

Неважко побачити, що до неї зводяться такі матричні екстремальні задачі на графах: знаходження оцінки максимально зваженої внутрішньо стійкої множини вершин графа $G(V,E)$ і побудова оцінки максимального розрізу графа. Наприклад, в першій задачі цільова функція $f(x)= \lambda_{max}(A(x))$, $\varphi(x) = -\lambda_{min}(B(x))$, где λ_{max}, λ_{min} – максимальні і мінімальні власні значення матриці, $A(x) = W + U(x)$, $B(x) = 2I + U(x)$, W – вагова матриця, $U(x)$ – матриця, в якій елементи, що відповідають E, змінні, інші – нульові (вершини графа з'єднані послідовно), $\varphi(x) = \max f_i(x)$. Тут для перевірки виконання умови позитивної визначеності матриці B використовується критерій $\lambda_{min} \ge 0$. Так як $\lambda_{min}(B)$ – вгнута функція від елементів матриці, то $\varphi(x)$ – опукла функція від параметра x, причому цільова функція задачі також буде опуклою. Тому для її розв’язку можна застосовувати вищеописаний алгоритм.

Вищевказані задачі на графах відносяться до задач мінімізації матричних параметричних функцій з обмеженнями на позитивну визначеність. Більшість таких задач, як було зазначено раніше, є негладкими. В роботі [6] побудований алгоритм розв’язку загальної матричної задачі оптимізації, що використовує штрафні функції. Якщо всі функції задачі неперервно диференціюються, то алгоритм індукує послідовність, що сходиться до стаціонарної точки вихідної задачі. Тобто знаходиться точка, в якій виконуються умови Каруша – Куна – Таккера [1].

Використання критерію $\lambda_{min} \ge 0$ для перевірки виконання умови позитивної визначеності матриці не завжди є зручним і можливим. Зокрема, серед інших оптимізаційних матричних задач є також задачі мінімізації деякої функції $f(A)$, де матриця A порядку n, визначається видом обмежень на елементи цієї матриці – вони повинні бути такими, щоб матриця A була позитивно визначеною. Але обмеження такого виду неможливо представити в традиційному для оптимізаційних задач вигляді типу, наприклад $g(x) \le 0$.

Підтвердженням цього є приклади досить розповсюджених важливих математичних моделей, що використовують саме позитивно визначені матриці.

При розробці моделей масопереносу в процесах адсорбції багатокомпонентних сумішей речовин із розчинів найбільш розповсюдженими вважаються два підходи. В першому з них моделі представляються у вигляді системи звичайних диференціальних рівнянь, яка має вигляд [7]

$$\dot{x} = B(\Phi(x) - x),$$

де $x \in E^n, \Phi(x)$ – відома вектор-функція рівноважних концентрацій, x – вектор концентрацій речовин, B – матриця (nхn). Аналіз закономірностей кінетики адсорбції та розробка методів розрахунку технології розділення сумішей речовин вимагають знання чисельних величин елементів саме матриці коефіцієнтів B. Задача ідентифікації матриці B може бути зведена до оберненої задачі, тобто до задачі мінімізації функції нев'язки

$$F(B) = \sum_{i=1}^{N} \left\| x_{i\,\exp} - x(t_i, B) \right\|^2$$

де x_{iexp} – експериментально отримані значення концентрацій, $x(t_i,B)$ – значення концентрацій, які отримуються як розв'язок системи рівнянь в моменти часу t_i при певних значеннях матриці B.

Проте елементи матриці B не можна обирати довільно. Це пов'язано з тим, що реальний процес повинен бути стійким в околі точки x_*, для якої $\Phi(x_*) = x_*$. Тобто в процесі мінімізації нев'язки матрицю B слід вибирати таким чином, щоб матриця (похідна правої частини системи) $-B(\Phi'(x_*) - I)$ завжди мала власні числа з позитивними дійсними частинами. Зрозуміло, що якщо вона буде позитивно визначеною, то така вимога буде автоматично виконуватися.

Нехай $\{A\}$ – множина позитивно визначених матриць. Тоді, вважаючи, що існує $(\Phi'(x_*) - I)^{-1}$, для будь-якої матриці $A \in \{A\}$ покладемо

$$B(A) = -A(\Phi'(x_*) - I)^{-1},$$

і бачимо, що матриця $-B(A)(\Phi'(x_*) - I) = A$ буде завжди позитивно визначеною за способом побудови. Отже, задача мінімізіції нев'язки тепер звелася до задачі мінімізації функції $F(B(A))$ на множині позитивно визначених матриць.

Інший підхід до моделювання процесів масопереносу пов'язаний із заданням густин дифузійних потоків компонентів суміші у вигляді узагальненого закону Фіка. В цьому випадку рівняння кінетики адсорбції будуть рівняннями з частковими похідними [8]. Тут надамо кінцевий розв'язок такої системи рівнянь

$$\bar{x} = (I - \frac{6}{\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^2} \exp(-\frac{m^2 \pi^2 t}{r_0^2} D)) x_0 \,,$$

де $\bar{x}$ – середня по об'єму сферичної частинки радіусу r_0 величина адсорбції, x_0 – початкова концентрація речовин. В подальшому формується функція нев'язки, аналогічная попередній задачі. Але, як бачимо, вона також містить матрицю D, яка також повинна бути позитивно визначеною як умова збіжності наведеного матричного ряду.

В [7,8] пропонується схема побудови такої процедури, яка дозволяє установити взаємнооднозначну залежність між позитивною визначеністю матриці A (тобто змінною цільової функції) і деяким довільним «довгим» вектором x розмірності n^2. «Довільність» вектора x означатиме, що в задачі оптимізації на змінну не буде обмежень.

Введемо деякі поняття. Квадратна дійсна матриця називається позитивно (негативно) визначеною [9], якщо $(Ax,x) > 0$ ($(Ax,x) < 0$) для будь-яких $x \neq 0$. Відомо також, що будь-яка дійсна матриця A може бути єдиним чином представлена у вигляді суми симетричної A_c та кососиметричної $A_к$ матриць, тобто $A = A_c + A_к$, причому $A_c = (A + A^*)/2$ і $A_к = (A - A^*)/2$. Тут

A^* – транспонована до A матриця. Крім того, матриця A буде позитивно визначеною тоді і тільки тоді, коли її симетрична складова A_c також буде позитивно визначеною.

Далі, як відомо [9], будь-яку дійсну симетричну матрицю A_c завжди можна привести до діагонального вигляду Λ деяким ортогональним перетворенням U, тобто $U^*A_cU = \Lambda$. Таким чином, задаючи матриці Λ з позитивними елементами і змінюючи ортогональне перетворення U якімось чином, можна завжди отримати позитивно визначені симетричні матриці $A_c = U\Lambda U^*$. Залишається питання побудови відповідного перетворення U.

Нехай деякий $x \in E^N$, де E^N – евклідів простір і $N = n(n\text{-}1)/2$. Якщо Λ – діагональна матриця, то позначимо через λ вектор з відповідними їй компонентами, причому $\lambda \in E^n$. В [7] якраз і запропоновано спосіб побудови ортогонального перетворення U, за допомогою якого кожному N-вимірному вектору $x \in E^N$ ставиться у відповідність ортогональна матриця $U(x)$. Тоді $A_c(x,\lambda)= U(x)\Lambda U^*(x)$. Тобто, стає можливим побудувати матрицю A_c за допомогою довільних векторів x і λ. Далі, розміщуючи елементи N-вимірного вектора z на місцях під головною діагоналлю матриці $A_к$ і ці ж елементи зі знаком мінус над головною діагоналлю, отримаємо кососиметричні матриці $A_к(z)$ з нульовою діагоналлю. Тобто для матриці A отримано наступне представлення $A = U(x)\Lambda U^*(x) + A_к(z)$, причому на змінні (x,λ,z) не накладаються ніякі обмеження.

Саме це представлення може використовуватися у відповідних задачах математичного програмування, а саме, функція $f(A)$, яку необхідно мінімізувати, набуває вигляду

$$f(A) = f(U(x)\Lambda U^*(x) + A_к(z)),$$

а процес мінімізації буде проходити в просторі змінних(x,λ,z) загальної розмірності n^2.

Таким чином, дана процедура дозволяє звести задачу мінімізації функції $f(A)$ на множині позитивно визначених матриць $\{A\}$ до задачі мінімізації більшої розмірності. Тобто виявляється, що замість задачі мінімізації матричних функцій отримуємо звичайну задачу математичного програмування. Крім того, при такому підході не виникає проблем з негладкими функціями.

Список літератури:

1. О матричных задачах оптимизации [Електронний ресурс] / Э.И. Ненахов // Теорія оптимальних рішень. – 2010. – № 9. – С. 79-85. – Режим доступу: http://nbuv.gov.ua/UJRN/Tor_2010_9_12.

2. Ненахов Э.И. Методы решения негладких выпуклых задач математического программирования и их приложения: Дис... д-ра физ.-мат. наук: 01.05.01 / НАН Украины; Институт кибернетики им. В.М.Глушкова. - К., 2000. - 318 л. - Бібліогр.: л. 299-318.

3. Fletcher R. Semidefinite matrix constrains in optimization // SIAM J. Control Optim. – 1985. – 23. – P. 493–513.

4. Шор Н.З. Задачи минимизации матричных функций и недифференцируемая оптимизация // Обозрение прикладной и промышленной математики. – 1995. – 2, вып. 1. – С. 113–138.

5. Шор Н.З. Методы минимизации недифференцируемых функций и их приложение. – Киев: Наук. думка, 1979. – 199 с.

6. Kanzow C., Nagel C., Kato H., Fukushima M. Successive linearization methods for nonlinear semidefinite programs // Computational Optim. And Appl. – 2005. – 31. – P. 251–273.

7. Михалевич В.С., Редковский Н.Н., Антонюк А.А. Некоторые методы минимизации на множестве неотрицательно определенных матриц // Кибернетика. - 1986. - № 6. – С. 84-97.

8. Антонюк А.А., Марутовский Р.М., Редковский Н.Н. Численное решение обратной задачи нестационарной массопроводности многокомпонентных смесей // Инженерно-физический журнал. – 1987. – Т. 53, №1. – С.113-117.

9. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. – М.: Наука, 1967. – 576 с.