Національна академія наук України
Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова

ЛАПТІН Юрій Петрович

УДК 519.8

МЕТОДИ НЕГЛАДКОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ РОЗВ'ЯЗАННЯ СТРУКТУРОВАНИХ ЗАДАЧ

01.05.01 – теоретичні основи інформатики та кібернетики

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук

Київ – 2016

Дисертацією є рукопис.
Робота виконана в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України.

Науковий консультант:	доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України **Сергієнко Іван Васильович,** Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, директор.
Офіційні опоненти:	доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАН України **Кісельова Олена Михайлівна**, Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара, декан факультету прикладної математики,
	доктор фізико-математичних наук, професор **Семенов Володимир Вікторович**, Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, професор кафедри обчислювальної математики,
	доктор фізико-математичних наук, доцент **Михайлюк Віктор Олексійович**, Східноєвропейський національний університет ім. Лесі Українки, завідувач кафедри прикладної математики та інформатики.

Захист відбудеться «_15_» __квітня_ 2016 р. о (об) ___11___ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.194.02 в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України за адресою:
03680, МСП, Київ-187, проспект Академіка Глушкова, 40.

З дисертацією можна ознайомитися в науково-технічному архіві Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України за адресою:
03680, МСП, Київ-187, проспект Академіка Глушкова, 40.

Автореферат розісланий «_14_» _березня_ 2016 р.

Учений секретар
спеціалізованої вченої ради О.А. ВАГІС

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Оптимізаційні задачі виникають у різних сферах. Це задачі планування, управління, проектування складних технічних об'єктів, технічної і медичної діагностики, а також задачі в інших областях. Для вирішення таких задач розробляються і широко використовуються в даний час різноманітні методи оптимізації і відповідне програмне забезпечення. Реальні задачі, що виникають на практиці, часто виявляються задачами дуже великої розмірності, мають спеціальну структуру і особливості, які мають враховуватися при їх рішенні. Це вимагає розробки нових методів, спеціальних підходів при використанні існуючих алгоритмів.

Ефективними засобами вирішення прикладних задач є методи негладкої оптимізації, r-алгоритм Н.З. Шора. Від самого початку ці методи розроблялися для задач безумовної оптимізації. Для застосування таких методів до задач з обмеженнями як правило використовуються точні штрафні функції. Одна з проблем, яка виникає при такому підході, це оцінювання значень штрафних коефіцієнтів, що вимагає розв’язання допоміжних спеціальних задач. Такі допоміжні задачі можуть бути досить трудомісткими і їх використання не завжди можливо. Зокрема, це неможливо при застосуванні схем декомпозиції для вирішення структурованих задач великої розмірності. На практиці проблема вибору значень штрафних коефіцієнтів часто покладається на користувача. Це іноді приводить до використання завищених значень коефіцієнтів або до повторного багатократного розв’язання початкової задачі при значеннях коефіцієнтів, що збільшуються.

Ще одна проблема виникає у випадку, коли функції, що описують початкову задачу, визначені на обмежених множинах. Застосування методів безумовної оптимізації для таких задач вимагає продовження початкових функцій на весь простір змінних початкової задачі та розробки відповідних підходів.

Практичними задачами, які вимагають розробки спеціальних підходів до оцінювання значень штрафних коефіцієнтів і продовження функцій, визначених на обмежених множинах, є задачі оптимального проектування складних технічних об'єктів і задачі перспективного планування в електроенергетиці.

Іншою сферою застосування методів негладкої оптимізації є задачі побудови класифікаторів при розпізнаванні образів. Особливі проблеми виникають в цій сфері у разі, коли навчальні вибірки виявляються лінійно нероздільними.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Робота є складовою частиною наукових досліджень, що проводилися в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України в рамках науково-дослідних тем:

„Розробка та теоретичне обгрунтування математичних моделей та ефективних алгоритмів оптимізації комплексних систем енергетики” (№ держреєстрації 0102U003210, 2002 –2006);

„Розробка та обгрунтування нових ефективних чисельних методів розв'язування складних задач оптимізації” (№ держреєстрації 0104U000276, 2004 –2007);

„Розробка програмних засобів оптимального проектування при реконструкції та модернізації енергетичних котлоагрегатів ТЕС” (№ держреєстрації 0107U004962, 2007 – 2009);

“Розробити математичні та програмні засоби розв’язування деяких класів структурованих задач оптимізації” (№ держреєстрації 0108U000280, 2008 – 2012);

спільний проект НАН Україні та РФФД "Методи автоматичного інтелектуального аналізу даних в задачах розпізнавання об'єктів зі складними зв'язками" (№ держреєстрації 0108U002564, 2008 – 2009);

„Розробка прототипу програмних засобів оптимального проектування при реконструкції та модернізації енергетичних котлоагрегатів ТЕС надкритичного тиску” (№ держреєстрації 0108U002200, 2008);

спільний проект НАН України та РФФД «Оптимізаційні підходи в задачах машинного навчання та аналізу даних» (№ держреєстрації 0110U004033, 2010 –2011);

”Розробка програмних засобів оптимального проектування енергетичних котлоагрегатів при реконструкції та модернізації ТЕС з урахуванням альтернативних режимів експлуатації” (№ держреєстрації 0114U001862, 2014);

«Розробити послідовні та паралельні алгоритмічні та програмні засоби для розв’язування прикладних екстремальних задач методами негладкої оптимізації» (№ держреєстрації 0113U003146, 2013 – 2015);

спільний проект НАН України та РФФД “Розробка математичних методів розпізнавання та аналізу структурованих об'єктів з взаємно залежними компонентами» (№ держреєстрації 0114U004032, 2014 – 2015);

«Розробити субградієнтні алгоритми розв’язання задач оптимізації з гарантованою точністю» (№ держреєстрації 0114U001055, 2014 – 2016).

Мета і завдання дослідження. Основною метою дисертаційної роботи є формування нових підходів до вирішення складних оптимізаційних задач, розширення сфери застосування методів негладкої оптимізації, підвищення ефективності існуючих алгоритмів.

Об'єкт досліджень – методи вирішення задач оптимізації з обмеженнями.

Предмет дослідження – методи побудови задач безумовної оптимізації, еквівалентних початковим задачам з обмеженнями; методи оцінювання значень коефіцієнтів точних штрафних функцій; негладкі методи вирішення складних прикладних задач оптимізації, схеми декомпозиції блокових задач оптимізації із зв'язуючими змінними.

Методи дослідження. Для вирішення поставлених задач використовуються методи математичного, негладкого і опуклого аналізу, математичне моделювання, проведення обчислювальних експериментів.

Наукова новизна отриманих результатів. Розроблені нові ефективні методи опуклого продовження цільової функції з допустимої області початкової задачі оптимізації на весь простір змінних; при цьому для сформованої задачі безумовної оптимізації забезпечується еквівалентність початковій задачі з обмеженнями.

Розроблені нові методи оцінювання значень коефіцієнтів точних штрафних функцій, що не вимагають вирішення допоміжних задач оптимізації.

Запропоновані нові підходи, що дозволяють використовувати розроблені методи опуклого продовження цільових функцій і методи оцінювання значень коефіцієнтів точних штрафних функцій у схемах декомпозиції по змінних для складних структурованих завдань оптимізації великої розмірності.

Розроблена нова модель мінімізації емпіричного ризику для задач побудови лінійного класифікатора у разі лінійної нероздільної навчальної вибірки, показано, що оптимізаційна задача, що вирішується у відомому методі опорних векторів, є спеціальним випадком лагранжевої релаксації розробленої математичної моделі.

Показано, що спеціальна задача побудови лінійного класифікатора у разі лінійно нероздільної навчальної вибірки поліноміально вирішувана за певних умов.

Практичне значення отриманих результатів. Програмна реалізація методу опуклого продовження цільової функції з використанням r-алгоритму Н.З. Шора показала високу стабільність за відношенням до поганої обумовленості задач спеціального виду.

Використання розроблених методів оцінювання значень коефіцієнтів точних штрафних функцій дозволяє будувати ефективні алгоритми вирішення задач оптимізації з обмеженнями.

Використання розроблених методів оцінювання значень коефіцієнтів точних штрафних функцій у схемах декомпозиції по змінних дозволяє подолати істотні проблеми, що виникають у випадку, коли підзадачі, що генеруються, не мають допустимих рішень при деяких значеннях зв'язуючих змінних.

Розроблені програмні засоби побудови лінійних класифікаторів дозволяють виділяти інформативні ознаки в задачах медичної діагностики.

Розроблені програмні засоби дозволяють вирішувати задачі оптимального проектування складних технічних об'єктів на сучасних теплоелектростанціях, відповідне програмне забезпечення передане в дослідну експлуатацію у Харківське ЦКБ «ЕНЕРГОПРОГРЕС».

Особистий внесок здобувача. Всі наукові результати, що викладені в дисертаційній роботі, отримано автором особисто. У працях, опублікованих у співавторстві, дисертанту належать наступні результати:

[1], [3], [20] – автору належать загальні системні рішення, розробка математичних моделей і оптимізаційного програмного забезпечення виконана спільно з М.Г. Журбенко, відповідність математичних моделей нормам теплотехнічних розрахунків забезпечувалися М.М. Левіним і П.І. Волковицькою;

[7] – сумісні програмна реалізація схеми декомпозиції (з використанням запропонованої дисертантом процедури обчислення ε-субградієнтів) і проведення обчислювальних експериментів;

[9] – автору належать результати, які дозволяють обчислювати ε-субградієнти оптимальних значень підзадач на основі наближених рішень цих підзадач, схема регуляризації початкової задачі, яка використовує процедуру лінійного пошуку допустимої точки, запропоновану М.Г. Журбенко;

[11], [17] – автором запропонована загальна схема декомпозиції оптимізаційних задач з вкладеною структурою, програмна реалізація і обчислювальні експерименти виконані спільно з О.П. Лиховидом, Н.Н. Стрюковою;

[14], [15], [16], [21], [22], [26], [27], [28] – авторами сумісно досліджувалися відомі математичні моделі задач побудови лінійних класифікаторів, дисертантом запропоновані нові моделі й алгоритми їх рішення, програмна реалізація виконувалася спільно з О.П. Лиховидом, використовувалися програми оптимізації, розроблені М.Г. Журбенко;

[12] – автором запропонована схема вирішення вказаних задач, програмна реалізація виконувалася спільно з Д.П. Крошко;

[18] – автором запропонована схема вирішення вказаних задач, програмна реалізація і обчислювальні експерименти виконувалися спільно з О.П. Лиховидом;

[23] – автором запропоновано узагальнення опуклих продовжень функцій з допустимої області на весь простір змінних, Т.А. Бардадим провела дослідження операції інфімальної згортки цільової функції з функцією Мінковського [23, с. 57–60, розділ 1]

[32] – дисертантом запропонована схема виділення інформативних ознак в задачах медичної діагностики, реалізовано відповідне програмне забезпечення.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертаційної роботи пройшли апробацію на Міжнародних науково-технічних конференціях, зокрема: “Системний аналіз та інформаційні технології” SAIT 2005, SAIT 2009, SAIT 2010 (Київ, 2005, 2009, 2010); міжнародні конференції "Classification, Forecasting, Data Mining” CFDM 2009, CFDM 2010, CFDM 2011, CFDM 2012, CFDM 2013 (Варна, Болгарія, 2009, 2010, 2011, 2012, 2013); II Московська конференція «Декомпозиційні методи в математичному моделюванні та інформатиці» (Москва, 2004); міжнародний симпозіум «Питання оптимізації обчислень ПОО-XXXV» (Кацивелі, 2009); міжнародна конференція «Математичні методи розпізнавання образів ММРО-15» (Петрозаводськ, 2011); III Міжнародна конференція „Математичне моделювання, оптимізація та інформаційні технології” (Кишинев, 2012); міжнародна конференція «Конструктивний негладкий аналіз та сміжні питання» (Санкт-Петербург, 2012); міжнародна наукова конференція „Питання оптимізації обчислень (ПОО-XL)” (Київ, 2013); міжнародна конференція по дослідженню операцій (ORM2013) (Москва, 2013); а також докладалися на наукових семінарах в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України.

Публікації. Основні наукові результати дисертації повною мірою викладено в 44 наукових працях, з них 24 роботи [1 – 13, 17 – 25, 29, 30] опубліковано в наукових виданнях з Переліку фахових видань України, серед яких 6 робіт [6, 9, 13, 20, 21, 23] опубліковано у виданнях України, включених у міжнародні наукометричні бази і перекладаються англійською мовою видавництвами "Springer" та "Begell House, Inc."; 8 робіт [14 – 16, 22, 26 – 28, 31] опубліковано в наукових періодичних виданнях іноземних держав; робота [32] опублікована в українському міжнародному науковому журналі не за фахом дисертації, але має прикладне значення; роботи [33 – 44] – тези доповідей на міжнародних наукових конференціях.

Структура і обсяг роботи. Дисертація складається із вступу, шести розділів, висновків, списку використаних джерел (198 найменувань) та двох додатків. Повний обсяг роботи – 287 сторінок, основний текст викладено на 253 сторінках. Робота містить 19 рисунків, 10 таблиць.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обгрунтовано актуальність теми, сформульовано мету та окреслено методи дослідження, висвітлено наукову новизну та практичне значення роботи, а також апробацію результатів дисертації.

Розділ 1 «Огляд літератури». Загальному опису методів негладкої оптимізації присвячено багато публікацій і монографій, зокрема, роботи Н.З. Шора, K.C. Kiwiel, Б.Т. Поляка, В.Ф. Дем’янова і Л.В. Васильева, Е.О. Нурмінського, П.І. Стецюка. Застосуванню методів негладкої оптимізації в задачах дробового програмування присвячені роботи Д.І. Соломона, в неперервних задачах оптимального розбиття множин – роботи Е.М. Кисельової.

Важливу роль у теорії і практиці методів оптимізації відіграють точні штрафні функції. Уперше точні штрафні функції запропоновані в роботах W. Zangwill та І.І. Єреміна. Властивості точних штрафних функцій досліджувалися в роботах Н.З. Шора, Д. Бертсекаса, Б.Н. Пшеничного, Ю.М. Даніліна та багатьох інших. Питанням побудови самих різних форм точних штрафних функцій присвячені роботи Ю.Г. Евтушенко і В.Г. Жадана. Застосування точних штрафних функцій для вирішення прикладних задач розглядалися в роботах В.С. Михалевича, В.А. Трубіна, Н.З. Шора, Е.М. Кисельової, Д.І. Соломона, П.І. Стецюка, Е.О. Нурмінського. Для оцінки значень штрафних коефіцієнтів зазвичай застосовуються вирішення допоміжних спрощених задач. Це не завжди зручно і може бути досить трудомістко.

В опуклому випадку рішення сформованої за допомогою точних штрафних функцій задачі безумовної оптимізації збігаються з рішеннями початкової задачі. Для неопуклих задач ситуація складніша – точки локальних мінімумів початкової задачі є точками локальних мінімумів штрафної функції, проте штрафна функція може мати додаткові локальні мінімуми, які не належать допустимій області початкової задачі. Ці проблеми детально досліджувалися в роботах В.Ф. Дем’янова, G. Di Pillo, F. Facchinei.

Важливою сферою застосування негладкої оптимізації є схеми декомпозиції задач математичного програмування великої розмірності, що мають спеціальну структуру. Такі схеми зводять рішення початкової задачі до вирішення серії задач меншого обсягу (блоків). До цих схем відносяться методи декомпозиції за обмеженнями (G.B. Dantzig і P. Wolfe), за змінними (J.F. Benders) і методи декомпозиції за ресурсами (A.M. Geoffrion). Загальні описи схем декомпозиції можна знайти в роботах Н.З. Шора, В.І. Цуркова, М. Мину, описи застосувань до різних прикладних задач – в роботах В.С. Михалевича, В.А. Трубіна, Н.З. Шора, Д.І. Соломона. Широкі застосування схеми декомпозиції мають у задачах стохастичного програмування (див. роботи Ю.М. Ермольєва, A. Shapiro, D. Dentcheva, A. Ruszczynski).

Методами декомпозиції за змінними є L-shaped метод (R. Van Slyke, R.J.-B. Wets) для задач лінійного програмування (модифікація методу Бендерса), узагальнений алгоритм декомпозиції Бендерса (A.M. Geoffrion) для гладких задач нелінійного програмування; регуляризований метод декомпозиції (A. Ruszczynski). Для цих методів характерні певні проблеми, пов'язані з відсутністю рішень підзадач при деяких значеннях зв'язуючих змінних. У роботах A. Grothey, S. Leyffer, K.I.M. Mckinnon, C. Fabian, Z. Szoke приводиться аналіз таких проблем, підходи до їх подолання. Необхідно зазначити, що в нелінійному випадку навіть з'ясування питання, чи існує рішення підзадачі при заданих значеннях зв'язуючих змінних, може виявитися дуже непростим. Всі ці проблеми легко вирішуються при використанні точних штрафних функцій. Проте традиційні методики оцінювання значень штрафних коефіцієнтів, які засновані на вирішенні допоміжних задач, непридатні до застосування в схемах декомпозиції. Інформації, що отримується при вирішенні окремих підзадач, для цього недостатньо.

У роботах В.Ф. Дем’янова і співавторів обговорюються питання застосування негладкого дискримінантного аналізу до задач діагностики, розпізнавання образів. Для вирішення сформульованих задач в цих роботах використовуються методи негладкої оптимізації. Задачі побудови класифікаторів у розпізнаванні образів досліджувалися багатьма авторами, зокрема: В.Н. Вапником; Ю.І. Журавльовим; Ю.І. Петуніним, Д.А. Клюшиним і співавторами; М.І. Шлезінгером і В. Главач; А.М. Гупалом і І.В. Сергієнко; Е.М. Кисельовою. Класифікатором називається правило віднесення об'єкта (образа) до одного з класів на підставі його вектора ознак. Навчанням класифікатора є підбір параметрів, від яких залежить класифікатор, щоб забезпечити якнайкраще в деякому розумінні розділення навчальних вибірок. Пошук значень параметрів зводиться до задач математичного програмування з обмеженнями.

У разі двох класів для побудови оптимального лінійного класифікатора широко використовується метод опорних векторів (SVM). Для лінійно нероздільної вибірки математична модель, використовувана в методі SVM, може трактуватися як деяка релаксація задачі мінімізації емпіричного ризику або як регуляризація по А.Н. Тіхонову некоректно поставленої задачі (див., наприклад, роботи М.І. Шлезінгера, Л.М. Местецького).

У роботах A. Astorino, M. Gaudioso, A.M. Bagirov вводяться поняття поліедральних та max-min класифікаторів для розділення двох множин. Задачі побудови таких класифікаторів є задачами неопуклої негладкої оптимізації. Близькі задачі розглядаються в роботах А.С. Стрекаловського, Т.В. Груздєвої.

Питання лінійної відокремлюваності у випадку багатьох класів досліджувалися в роботах Ю.І. Петуніна і співавторів. Задачі побудови класифікаторів у випадку багатьох класів розглядалися в роботах K.P. Bennett, O.L. Mangasarian (M-RLP і M-SVM методи), J.C. Platt *(*DAGSVM метод*),* V. Vapnik та співавтори («*один проти всіх*»), U. Krebel, S. Knerr, L. Personnaz, G. Dreyfus *(«кожен проти кожного»).* Опис бібліотеки сучасних програмних засобів (LIBSVM), що реалізують методи опорних векторів для самих різних задач, приведений у роботах C.C. Chang, C.J. Lin.

Задачами оптимального проектування складних технічних об'єктів у електроенергетиці багато займалися в Інституті систем енергетики ім. Л.А. Мелентьєва (ІСЕМ) СВ РАН (А.М. Клер, С.К. Скріпкин, Н.П. Деканова). Для побудови математичних моделей складних теплосилових систем розроблена оригінальна методика і створено відповідний програмно-обчислювальний комплекс. Проблеми оптимізація теплових циклів і процесів ТЕС, оптимізація поверхонь нагріву і теплоенергетичних установок у цілому розглядалися в роботах Л.С. Попиріна, А.І. Андрющенко, А.В. Змачинського, В.А. Медведева, Г.І. Левченко, Б.М. Шлейфера, Д.Б. Літвака. Однією з особливостей даних задач є дискретність деяких конструктивних характеристик об'єктів, що проектуються. З урахуванням цих особливостей для вирішення задач оптимального проектування мають використовуватися відповідні методи дискретного програмування, направленого, локального пошуку. Загальні підходи до побудови таких методів розглядалися в роботах І.В. Сергієнко, В.П. Шило, Л.Ф. Гуляницького.

Для вирішення прикладних задач оптимізації на сьогодні використовується багато різних програмних засобів загального призначення SNOPT, KNITRO, IPOPT та інші. Ці програмні засоби дозволяють ефективно вирішувати нелінійні задачі математичного програмування в багатьох областях, але для оптимального проектування складних технічних об'єктів потрібні додаткові можливості.

Розділ 2 «Опуклі продовження функцій в задачах оптимізації». При вирішенні практичних задач оптимізації часто виникають істотні проблеми, якщо функції, що описують початкову задачу, визначені не на всьому просторі змінних. Можливим підходом до подолання таких проблем є продовження функцій на весь простір змінних. Задачі при цьому стають задачами негладкої оптимізації і вимагають використання відповідних методів рішення. Приклади задач, для яких доцільне застосування продовжень функцій приведені в **підрозділі 2.1**.

Природною вимогою до продовження функцій є збереження опуклості, якщо початкова задача була опуклою. Нові ефективні методи побудови опуклих продовжень розглядаються в підрозділах 2.2 і 2.3. Задачі, які формуються, є задачами безумовної оптимізації.

У **підрозділі 2.2** розглядається задача: знайти

$$f^* = \min\left\{ f(x) : x \in C \right\}, \tag{1}$$

де $C = \left\{ x \in R^n : h(x) \le 0 \right\}$, $f, h : R^n \to R \cup \{+\infty\}$ – опуклі функції, C – компактна множина, $C \subseteq \operatorname{dom} f \bigcap \operatorname{dom} h$. Вважаються заданими точка $x^0 \in \operatorname{int} C$ та число E, $E < f(x^0)$. Положимо

$$\chi_E(x) = E + (f(\pi_C(x)) - E)\frac{\left\| x - x^0 \right\|}{\left\| \pi_C(x) - x^0 \right\|}. \tag{2}$$

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \chi_E(x), \text{ если } x \notin C, \\ f(x), \text{ если } x \in C, \end{cases} \tag{3}$$

$$\psi_E^* = \inf\left\{ \psi_E(x) : x \in R^n \right\} . \tag{4}$$

де $\pi_C(x)$ – точка перетинання відрізку $[x^0, x]$ (луча, що виходить з x^0) з границею множини C.

Лема 2.1. Нехай $E \le f^*$, тоді $\psi_E^* = f^*$ і рішення задач (4) та (1) збігаються.

Теорема 2.1. Нехай f – опукла ліпшицева на C функція, C – замкнена обмежена опукла множина, $C \subset \operatorname{int}\operatorname{dom} f$. Тоді існує кінцеве E^* і для всіх $E \le E^*$ функція $\psi_E(x)$ є опуклою.

Позначимо $g_f(x)$, $g_h(x)$ субградієнти функцій f і h в точці x.

Теорема 2.2. Нехай $E \le E^*$, $h(x^0) < 0$, $\overline{x} = \pi_C(x)$, $x \ne x^0$. Тоді $(g_h(\overline{x}), x^0 - \overline{x}) \ne 0$ і вектор

$$g = g_f(\overline{x}) + \frac{E - f(\overline{x}) - (g_f(\overline{x}), x^0 - \overline{x})}{(g_h(\overline{x}), x^0 - \overline{x})} g_h(\overline{x}) \tag{5}$$

є субградієнт функції $\chi_E(x)$ в точці x.

Одновимірний пошук точки $\pi_C(x)$ може бути реалізований досить ефективно. При заданих f^* та E^* обирається E так, що $E \le f^*$, $E \le E^*$, і рішення безумовної задачі (4) визначає рішення початкової задачі (1). При невідомих f^* та E^* значення E уточнюється у ході розв'язання задачі (4).

Зауваження. Нехай функція h диференційована, тоді субградієнт функцій $\chi_E(x)$, $\psi_E(x)$ інваріантний щодо множення функції $h(x)$ на довільну диференційовану функцію $r : R^n \to R$ таку, що $r(x) > 0, x \in R^n$.

Реалізовані програмні засоби продемонстрували істотні переваги запропонованого підходу при вирішенні погано обумовлених спеціальних задач у порівнянні з існуючими оптимізаційними пакетами.

Узагальнення запропонованого підходу на випадок, коли функція, f не є ліпшицевою на C, розглядається в **підрозділі 2.3.** Позначимо F надграфік функції f на множині C. Положимо $z = (\lambda, x)$, $z \in R \times R^n$. Розглянемо конічну оболонку $\mathrm{K}(E)$ надграфіка F з вершиною у точці $z_E^0 = (E, x^0)$:

$$\mathrm{K}(E) = \left\{ v : v \in R \times R^n,\, v = z_E^0 + \alpha(z - z_E^0), \alpha \geq 0, z \in F \right\}. \tag{6}$$

Множина $\mathrm{K}(E)$ опукла і може розглядатися як надграфік деякої опуклої функції. Цю функцію позначимо $\gamma_E(x)$ і називатимемо конічною апроксимацією функції f на множині C.

Для довільної точки $x \in R^n$, $x \neq x^0$, на лучі, що виходить з точки x^0 та проходить через x, знайдеться точка $\overline{x}$, $\overline{x} \in C$ (можливо не одна) така, що $f(\overline{x}) = \gamma_E(\overline{x})$. Позначимо $\mu_E(x)$ таку точку, найближчу до x^0.

Лема 2.3. Функція $\gamma_E(x)$ може бути представлена у вигляді

$$\gamma_E(x) = E + (f(\mu_E(x)) - E)\frac{\left\| x - x^0 \right\|}{\left\| \mu_E(x) - x^0 \right\|}. \tag{7}$$

Положимо $\varphi_E(x) = \begin{cases} f(x), \text{ якщо } \left\| x - x^0 \right\| \leq \left\| \mu_E(x) - x^0 \right\|, \\ \gamma_E(x), \text{ якщо } \left\| x - x^0 \right\| > \left\| \mu_E(x) - x^0 \right\|. \end{cases}$

Розглянемо задачу: знайти

$$\varphi_E^* = \inf \left\{ \varphi_E(x) : x \in R^n \right\}. \tag{8}$$

Теорема 2.4. Нехай $E \leq f^*$, тоді $\varphi_E^* = f^*$, і рішення задач (8) та (1) збігаються.

Теорема 2.5. Нехай C – опуклий компакт, $C \subseteq \operatorname{dom} f$, $x^0 \in \operatorname{int} C$, $E < f(x^0)$. Тоді $\varphi_E : R^n \to R$ – опукла функція.

Позначимо $f'(y, p)$ похідну функції f в точці $y \in C$ по напряму p. Нехай $x \in C$, $x \neq x^0$, положимо $p = \dfrac{x - x^0}{\left\| x - x^0 \right\|}$, $t^* = \left\| \mu_E(x) - x^0 \right\|$.

Лема 2.4. Має місце співвідношення

$$t^* = \sup \left\{ t : \frac{f(x^0 + tp) - E}{t} > -f'(x^0 + tp, -p),\ t \geq 0, x^0 + tp \in C \right\}. \tag{9}$$

Процедура одновимірного пошуку (9) (пошуку точки $\mu_E(x)$) може бути реалізована досить ефективно.

Теорема 2.6. Нехай точка x така, що $\overline{x} = \mu_E(x)$ – внутрішня точка множини C. Тоді в точці $\overline{x}$ існує субградієнт $\overline{g}$ функції f, для якого виконується

$$f(\overline{x}) - E = (\overline{g}, \overline{x} - x^0) \tag{10}$$

і вектор $\overline{g}$ є субградієнт функції γ_E в точці x.

При відомому f^* призначається $E \le f^*$ і рішення задачі (8) визначає рішення початкової задачі (1). При невідомому f^* значення E уточнюється у ході рішення задачі (8).

Розділ 3 «Використання точних штрафних функцій». Точні штрафні функції є одним з основних засобів формування задач безумовної оптимізації, еквівалентних початковим оптимізаційним задачам з обмеженнями. Для оцінки значень штрафних коефіцієнтів відомими методами вирішуються спрощені допоміжні оптимізаційні задачі, які можуть бути досить трудомісткими.

У даному розділі пропонуються підходи, що дозволяють будувати процедури автоматичного оцінювання значень штрафних коефіцієнтів у ході роботи алгоритму безумовної оптимізації без вирішення складних допоміжних задач.

У **підрозділі 3.1** для опуклої задачі: знайти

$$f^* = \min\left\{ f(x) : x \in C \right\}, \tag{11}$$

де $C = \left\{ x \in R^n : h(x) \le 0 \right\}$, $f, h : R^n \to R$, розглядаються штрафні функції $F_\lambda(x) = f(x) + \lambda \cdot h^+(x)$, $\lambda \in R, \lambda \ge 0$, де $h^+ = \max\{0, h\}$ і задача

$$F_\lambda^* = \min\left\{ F_\lambda(x) : x \in R^n \right\}. \tag{12}$$

Позначимо $F_\lambda^{'}(x,p)$, $f^{'}(x,p)$, $h^{'}(x,p)$ односторонні похідні функцій F_λ, f, h в точці $x \in R^n$ по напряму p;

$p(x,y)$ – вектор, що визначає направлення з точки x в точку y, $p(x,y) = (y-x)/\|y-x\|$, $y \ne x$;

$\pi_C(x,y)$ – точка перетину відрізка $[x,y]$ з границею множини C, $x \notin C$, $y \in C$.

Теорема 3.1. Нехай задані точка $y^0 \in C$, числа $\varepsilon > 0$, $\lambda > 0$, послідовність $x^k \in R^n$, $k = 0,1,...$, сходиться до рішення $\tilde{x}$ задачі (12) та для кожної точки x^k, $x^k \notin C$, $k = 0,1,...$ виконується умова

$$F_\lambda^{'}(\overline{x}^k, p(\overline{x}^k, x^k)) = f^{'}(\overline{x}^k, p(\overline{x}^k, x^k)) + \lambda \cdot h^{'}(\overline{x}^k, p(\overline{x}^k, x^k)) \ge \varepsilon, \tag{13}$$

де $\overline{x}^k = \pi_C(x^k, y^0)$. Тоді $\tilde{x}$ є рішенням задачі (11), тобто $F_\lambda(x)$ – точна штрафна функція.

Теорема 3.2. Нехай $h(y^0) < 0$. Тоді існує $\overline{\lambda} < \infty$ таке, що при будь-якому λ, $\lambda > \overline{\lambda}$, знайдеться $\varepsilon(\lambda) > 0$, при якому для послідовності $x^k \in R^n$, $k = 0,1,...$, що сходиться до рішення $\tilde{x}$ задачі (12), виконується

$$F_\lambda'(\overline{x}^k, p(\overline{x}^k, x^k)) \geq \varepsilon(\lambda), \text{ якщо } x^k \notin C,\ k = 0,1,... \tag{14}$$

де $\overline{x}^k = \pi_C(x^k, y^0)$. Тобто $\tilde{x}$ є рішення задачі (11), $F_\lambda(x)$ – точна штрафна функція.

Таким чином, для контролю значення λ на кожному кроці оптимізаційного алгоритму при рішенні задачі (12) необхідно перевіряти умову (13). При порушенні нерівності (13) штрафний коефіцієнт λ збільшується.

При невдалому виборі точки y^0 штрафні коефіцієнти можуть встановлюватися досить великими. У підрозділі 3.1 розглядаються питання варіювання точки y^0 у ході роботи оптимізаційного алгоритму для зменшення значень коефіцієнта λ.

Підрозділ 3.2 присвячений питанням використання точних штрафних функцій для вирішення неопуклих задач оптимізації: знайти

$$f^* = \min\{f(x) :\ x \in \Omega\}, \tag{15}$$

де $\Omega = \left\{x : h_i(x) \leq 0,\ i = 1,...,m,\ x \in R^n\right\}$, $f, h_i : R^n \to R$ – неперервні функції, що диференціюються за напрямами (у сенсі Адамара), $i = 1,..., m$.

Для неопуклих задач оптимізації використання точних штрафних функцій пов'язане з істотними проблемами. Допустима область задачі може бути багатозв'язною, штрафна добавка і штрафна функція в цілому можуть мати локальні мінімуми поза допустимою областю початкової задачі. У зв'язку з цим відомі методи не завжди можуть гарантувати збіжність до допустимого рішення. Умови, при яких забезпечується збіжність методів до допустимої точки, важко перевіряти при вирішенні практичних задач, часто ці задачі не задовольняють сформульованим умовам збіжності.

Для подолання цих проблем і забезпечення збіжності до допустимої точки в підрозділі використовуються довірчі області (trust region).

Нехай задана точка $y^0 \in \Omega$. Позначимо $B_\rho(y^0) = \left\{x : \left\|x - y^0\right\| \leq \rho,\ x \in R^n\right\}$, де $\rho > 0$ – заданий параметр, і розглянемо задачу

$$f_\rho^* = \min\left\{f(x) : x \in B_\rho(y^0) \cap \Omega\right\}. \tag{16}$$

Положимо $\eta_\rho(x) = \max\left\{0, \left\|x - y^0\right\| - \rho\right\}$, $h(x) = \max\left\{0, h_i(x) : i = 1,...,m\right\}$, $\Phi_{\lambda\beta\rho}(x) = f(x) + \lambda \cdot h(x) + \beta \cdot \eta_\rho(x)$,

$$\Phi^*_{\lambda\beta\rho} = \min\left\{\Phi_{\lambda\beta\rho}(x) : x \in R^n\right\}. \tag{17}$$

Позначимо $p(x,y) = (y - x)/\|y - x\|$, $T_\delta(x,y) = [x, x + \delta p(x,y)] \cap [x, y]$, де $\delta > 0$. Множина $T_\delta(x,y)$ є δ-окрестність точки x на відрізку $[x, y]$.

Теорема 3.5. Нехай $\Phi : R^n \to R$ – неперервна функція, що диференціюється по напрямах; $\tilde{x}$ – локальний мінімум функції Φ на R^n; Ω_B – обмежена замкнена множина, $\Omega_B \subset R^n$, $\operatorname{int} \Omega_B \neq \varnothing$; задані точка $y^0 \in \operatorname{int} \Omega_B$ та послідовність $x^k \in R^n$, $k = 1,2,...$, що сходиться до $\tilde{x}$; для деяких чисел $\delta > 0$, $\varepsilon > 0$ виконуються умови

$$\Phi'(x, p(x^k, y^0)) \le -\varepsilon, \ \ \forall x \in T_\delta(x^k, y^0) \setminus \Omega_B. \tag{18}$$

Тоді для граничної точки $\tilde{x}$ має місце $\tilde{x} \in \Omega_B$.

Теорема 3.6. Нехай задані числа $\rho > 0, \sigma > 0$, функції f, h ліпшицеві на R^n і виконуються умови

$$h'(x, p(x, y^0)) \le -\sigma, \ \forall x \in B_\rho(y^0) \setminus \Omega, \tag{19}$$

Тоді для будь-яких $\delta > 0$, $\varepsilon > 0$ існують числа $\lambda(\varepsilon) > 0$ і функція $\beta(\lambda) > 0$, такі що при $\lambda > \lambda(\varepsilon)$ та $\beta > \beta(\lambda)$ для будь-якої послідовності точок x^k, $k, k = 0,1,...$, що сходиться до локального мінімуму $\tilde{x}$ задачі (17), виконуються умови теореми 3.5, де $\Phi(x) = \Phi_{\lambda\beta\rho}(x)$, $\Omega_B = B_\rho(y^0) \cap \Omega$. Тобто $\tilde{x}$ – рішення задачі (16).

Нехай для вирішення задачі (17) застосовується деякий алгоритм A безумовної мінімізації. Вважаючи $\Phi(x) = \Phi_{\lambda\beta\rho}(x)$, $\Omega_B = B_\rho(y^0) \cap \Omega$, будемо використовувати умови (18), (19) для контролю збіжності послідовності, що генерується, до точки, що належить множині Ω_B. При порушенні цих умов на ітерації k алгоритму A параметри λ, β, ρ уточнюються – виконуються наступні додаткові операції:

1) якщо для поточної точки x_k не виконується умова

$$h'(x, p(x^k, y^0)) \le -\sigma, \ \forall x \in T_\delta(x^k, y^0) \cap \left\{B_\rho(y^0) \setminus \Omega\right\}, \tag{20}$$

то радіус ρ зменшується;

2) для поточної точки x_k перевіряється умова (18) в два етапи:

етап 1 – для $\forall x \in T_\delta(x^k, y^0) \bigcap \left\{ B_\rho(y^0) \setminus \Omega \right\}$, якщо умова (18) не виконується, збільшується коефіцієнт λ;

етап 2 – для $\forall x \in T_\delta(x^k, y^0) \setminus B_\rho(y^0)$, якщо умова (18) не виконується, збільшується коефіцієнт β.

Після отримання наближеного рішення $\tilde{x}$ задачі (16) уточнюється початкова точка $y^0 \in \Omega$ і процес повторюється. В цілому таку схему рішення початкової задачі (15) можна інтерпретувати, як комбінацію методів зовнішніх і внутрішніх штрафів. Також в цьому підрозділі розглядаються можливі процедури перевірки умов (18) і (20).

У **підрозділі 3.3** узагальнюються запропоновані підходи. Формулюються умови для штрафних коефіцієнтів, які не вимагають обчислення похідних.

Розглядається задача: знайти

$$f^* = \min\left\{ f_0(x) :\ x \in C \right\}, \tag{21}$$

де $C = \left\{ x : f_i(x) \le 0,\, i = 1,...,m,\, x \in R^n \right\}$, $f_i : R^n \to R$, $i = 0,...,m$ – опуклі функції.

Положимо $\Phi_\beta(x) = f_0(x) + \sum\limits_{i=1}^{m} \beta_i f_i^+(x)$, $F_\lambda(x) = f_0(x) + \lambda h^+(x)$,

де $h(x) = \max\left\{ f_i(x),\, i = 1,...,m \right\}$, $f^+(x) = \max\left\{ 0, f(x) \right\}$,

$$\Phi_\beta^* = \min\left\{ \Phi_\beta(x) : x \in R^n \right\}, \tag{22}$$

$$F_\lambda^* = \min\left\{ F_\lambda(x) : x \in R^n \right\}. \tag{23}$$

Лемма 3.4. Нехай множина C замкнена, значення штрафних коефіцієнтів фіксовані, задано число $\varepsilon > 0$ і послідовність точок x_k, $k = 1,2,...$, що сходиться до рішення $\tilde{x}$ задачі (22) (або рішення задачі (23)). Нехай кожній x_k за деяким правилом P поставлена у відповідність точка $z_k = P(x_k),\, z_k \in C,\ k = 1,2,...,$ і виконуються нерівності

$$\varphi(x_k) \ge f_0(z_k) + \varepsilon \left\| z_k - x_k \right\|, \text{ для точок } x_k \notin C,\ k = 1,2,..., \tag{24}$$

де $\varphi(x) = \Phi_\beta(x)$ (відповідно $\varphi(x) = F_\lambda(x)$). Тоді $\tilde{x} \in C$.

Використання функції F_λ. Нехай задані $x \notin C$, правило $P : R^n \to C$. Позначимо

$$\lambda_P(x, \varepsilon) = \max\left(0,\ \frac{f_0(z) + \varepsilon \left\| z - x \right\| - f_0(x)}{h^+(x)} \right), \text{ де } z = P(x), \tag{25}$$

$$\lambda_P(\varepsilon) = \sup\{\lambda_P(x,\varepsilon) : x \notin C\}. \tag{26}$$

Нехай для вирішення задачі (23) застосовується деякий алгоритм A, що сходиться. Оскільки точні штрафні коефіцієнти заздалегідь не відомі, їх значення уточнюються (збільшуються) у ході роботи алгоритму. Позначимо λ_k значення коефіцієнта λ на ітерації k. Для $k=1$ значення $\lambda_1 > 0$ вважається за задане. При побудові алгоритмом A точки x_k на ітерації k використовується значення λ_k. Якщо в точці x_k нерівність (24) виконується при $\lambda = \lambda_k$, вважаємо $\lambda_{k+1} = \lambda_k$, інакше задаємо $\lambda_{k+1} = \lambda_P(x_k,\varepsilon) + R$, де $R > 0$ – заданий фіксований параметр.

Очевидно, що співвідношення (24) виконуються, якщо $\lambda > \lambda_P(\varepsilon)$ і число уточнень коефіцієнтів λ_k буде кінцевим, якщо $\lambda_P(\varepsilon) < \infty$.

Використання штрафних функцій з істотно завищеними значеннями штрафних коефіцієнтів приводить до проблем, пов'язаних з помилками округлення, погіршенням збіжності оптимізаційних алгоритмів. Тому важливою характеристикою правила P є величина $\lambda_P(\varepsilon)$. Надалі розглядатимуться різні підходи до формування правил P.

Розглянемо задачу лінійного програмування

$$f^* = \min\langle c,x\rangle, \tag{27}$$

$$\langle a_i,x\rangle + b_i \le 0,\ i=1,...,m. \tag{28}$$

Лема 3.5. Нехай задача (27)–(28) має єдине оптимальне рішення x^*, $P = P^* : R^n \to x^*$, обмеження, активні в точці x^*, лінійно незалежні, $(u_1^*,..., u_m^*)$ – оптимальні значення двоїстих змінних задачі (27)–(28). Тоді $\lambda_P(0) = \sum_{i=1}^{m} u_i^*$.

Для мінімізації $\lambda_P(\varepsilon)$, слід використовувати в якості правила P для кожної точки x_k рішення допоміжної задачі (побудова оптимального правила P)

$$z_k = P(x_k) = \arg\min_z \left\{ f_0(z) + \varepsilon \left\| z - x_k \right\| : z \in C \right\}. \tag{29}$$

Це задача, звичайно, не простіше початкової. Але оскільки отримуване рішення (точка z_k) використовується для уточнення штрафного коефіцієнта, можна обмежитися грубими наближеннями і використовувати евристичні алгоритми. Нехай $x \notin C$, $y_0 \in C$, $\pi_C(x, y_0)$ – точка перетину відрізка $[x, y_0]$ з границею множини C.

Теорема 3.7. Нехай множина C обмежена, функція f_0 ліпшицева на C, задана точка $y_0 \in C$, $h(y_0) < 0$, $P(x) = \pi_C(x, y_0)$ для $x \notin C$. Тоді $\lambda_P(\varepsilon) < \infty$.

Для покращення якості правила P точка $z_k = \pi_C(x_k, y_0)$ може використовуватися як початкова для уточнення рішення задачі (29). Інший підхід – для кожної точки x_k, $k=1,2,...$, замість початкової точки $y_0 \in C$ використовувати деяку допоміжну точку $y_k \in C$. Питання вибору точок $y_k \in C$ мають розглядатися окремо.

Використання функції Φ_β. Передбачається, що точки x_k, $k=1,2,...$, генеруються алгоритмом, що сходиться, при рішенні задачі (22). Задано правило P: $z_k = P(x_k), z_k \in C,\ k=1,2,...$. Коефіцієнти β уточнюються (збільшуються) у ході роботи алгоритму. Позначимо $\beta^k = \left(\beta_i^k, i=1,...,m\right)$ значення штрафних коефіцієнтів на ітерації k.

При побудові точки x_k на ітерації k використовуються значення β^k. Для точки x_k перевіряється нерівність (24) при значеннях $\beta = \beta^k$.

Якщо ця нерівність виконується, вважаємо $\beta_i^{k+1} = \beta_i^k$, $i=1,...,m$. Інакше позначимо

$$\beta_P(x_k, \varepsilon) = \max\left\{0,\ \frac{f_0(z_k) + \varepsilon \left\|z_k - x_k\right\| - f_0(x_k)}{\sum_{i=1}^{m} f_i^+(x_k)}\right\}, \tag{30}$$

і визначимо

$$\beta_i^{k+1} = \begin{cases} \beta_i^k, \text{ якщо } \beta_i^k \ge \beta_P(x_k, \varepsilon) \text{ або } f_i^+(x_k) = 0, \\ \beta_P(x_k, \varepsilon) + R, \text{ інакше,} \end{cases} \qquad i=1,...,m, \tag{31}$$

де $R > 0$ – заданий фіксований параметр.

Можливості формування правила P, розглянуті для функції F_λ, можуть застосовуватися також і для функції Φ_β.

У підрозділі розглядаються також підходи, що дозволяють зменшити трудомісткість уточнення штрафних коефіцієнтів. Пропонується замість точки $z_k = \pi_C(x_k, y_0)$ для процедури уточнення штрафних коефіцієнтів використовувати точку $z_\delta(x_k)$, що отримується при зрушенні на величину δ з x_k у напрямі на y_0. Тут $\delta > 0$ – фіксований параметр. Такий підхід дозволяє на кожній ітерації оптимізаційного алгоритму за певних умов відмовитися від трудомісткої операції одновимірного пошуку точки $\pi_C(x_k, y_0)$.

Розділ 4 «Схеми декомпозиції по змінним структурованих задач опуклої оптимізації». Розглядаються блочні задачі із зв'язуючими змінними: знайти

$$\min_{x,y}\left\{\sum_{q=1}^{Q} f_q^0(x, y^q) : f_q^i(x, y^q) \le 0,\ i=1,...,I_q,\ q=1,...,Q\right\}, \tag{32}$$

де $x \in R^L$, $y^q \in R^{N_q}$, $f_q^i : R^L \times R^{N_q} \to R$ – опуклі функції, $i=0,\dots,I_q$, $q=1,\dots,Q$.

Нехай зв'язуючі змінні x фіксовані. Положимо

$$\Phi^q(x) = \min\left\{ f_q^0(x,\, y^q) : y^q \in D_q(x) \right\}, \tag{33}$$

де $D_q(x)=\left\{ y^q \in R^{N_q} : f_q^i(x, y^q) \le 0,\, i=1,...,I_q \right\}$. Якщо $D_q(x)=\varnothing$, то $\Phi^q(x) = +\infty$.

Позначимо $W_q = \left\{ x : D_q(x) \ne \varnothing \right\}$. У схемах декомпозиції вирішується наступна координуюча задача, яка еквівалентна початковій задачі (32): знайти

$$\min\left\{ \sum_{q=1}^{Q} \Phi^q(x) : x \in \bigcap_{q=1}^{Q} W_q \right\}. \tag{34}$$

Проблеми, пов'язані із застосуванням схем декомпозиції для нелінійних задач:

- точні рішення окремих підзадач не можуть бути отримані, необхідно використовувати наближені рішення;
- підзадачі можуть не мати допустимих рішень при деяких значеннях зв'язуючих змінних, що вимагає розробки спеціальних прийомів регуляризації вихідної задачі;
- для точних штрафних функцій, які можуть використовуватися при регуляризації вихідної задачі, неможливо оцінити значення штрафних коефіцієнтів існуючими методами – трудомісткість допоміжних задач порівняна з трудомісткістю вихідної задачі.

У **підрозділі 4.1** розглядаються питання обчислення ε-субградієнтів функцій $\Phi^q(x)$. Індекс q, якщо це не викликає неоднозначність, опускатимемо. Розглядається задача (33). Положимо $D = \left\{ (x, y) : f^i(x, y) \le 0,\, i=1,...,I \right\}$.

Теорема 4.1. Нехай D – обмежена множина, $D \in \operatorname{int} \operatorname{dom} f^0$, в точці $(\bar{x}, \bar{y})$ обчислені значення та ε_i-субградієнти $g^i = (g_x^i,\, g_y^i)$ функцій f^i, $\varepsilon_i \ge 0,\, i = 0, 1,..., I$, такі, що для деяких чисел $\bar{u}_i,\, i=1,...,I$, виконується

$$g_y^0 + \sum_{i=1}^{I} \bar{u}_i g_y^i = 0, \tag{35}$$

$$\bar{u}_i \ge 0,\, i=1,...,I. \tag{36}$$

Тоді

1) $\Phi(\bar{x}) \ge f^0(\bar{x}, \bar{y}) - \bar{\varepsilon}$,

2) якщо $\bar{y} \in D(\bar{x})$, то $\bar{\varepsilon}$- субградієнт функції $\Phi(x)$ в точці $x = \bar{x}$ може бути обчислений за формулою

$$g_\Phi^{\bar{\varepsilon}}(\bar{x}) = g_x^0 + \sum_{i=1}^{I} \bar{u}_i g_x^i, \tag{37}$$

де

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon_0 + \sum_{i=1}^{I} \bar{u}_i (\varepsilon_i - f^i(\bar{x}, \bar{y})). \tag{38}$$

Теорема 4.2. Нехай D – обмежена множина, $D \in \operatorname{int} \operatorname{dom} f^0$; в точці $(\bar{x}, \bar{y})$ обчислені значення та ε_i-субградієнти $g^i = (g_x^i, g_y^i)$ функцій f^i, $\varepsilon_i \ge 0, i = 0, 1, ..., I$; задані деякі числа $\bar{u}_i \ge 0, i = 1, ..., I$; для вектора y виконуються умови $L \le y \le U$. Тоді мають місце твердження 1, 2 теореми 4.1, де

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon_0 + \sum_{i=1}^{I} \bar{u}_i (\varepsilon_i - f^i(\bar{x}, \bar{y})) + \sum_{j=1}^{N} \theta_j p_j, \qquad (39)$$

$$p = -\left(g_y^0 + \sum_{i=1}^{I} \bar{u}_i g_y^i \right), \qquad (40)$$

$$\theta_j = \begin{cases} U_j - \bar{y}_j, \text{ если } p_j \ge 0, \\ L_j - \bar{y}_j, \text{ если } p_j < 0. \end{cases} \qquad (41)$$

Нехай $\{ y_1, y_2, ..., y_m \}$ – сукупність точок з R^N, $f^{ik} = f^i(\bar{x}, y_k)$, $g^{ik} = (g_x^{ik}, g_y^{ik})$ – субградієнти функцій $f^i, i = 0, ..., I,$ в точці $(\bar{x}, y_k)$, $k = 1, ..., m$.

Розглянемо нижню апроксимацію задачі (33) при фіксованому $x = \bar{x}$

$$\min_{y,\xi} \xi, \qquad (42)$$

$$f^{ik} + (g_y^{ik}, y - y_k) \le \xi, \quad k = 1, ..., m, i = 0, \qquad (43)$$

$$f^{ik} + (g_y^{ik}, y - y_k) \le 0, \quad k = 1, ..., m, i = 1, ..., I. \qquad (44)$$

Теорема 4.3. Нехай задана точка $\bar{y} \in D(\bar{x})$, ξ^*, y^* – оптимальні рішення, $\bar{u}_{ik}$ – оптимальні значення двоїстих змінних, $k = 1, ..., m$, $i = 0, ..., I$, задачі (42)–(44). Тоді $\xi^* \le \Phi(\bar{x}) \le f^0(\bar{x}, \bar{y})$, $g_\Phi^{\bar{\varepsilon}}(\bar{x}) = \sum_{k=1}^{m} \sum_{i=0}^{I} \bar{u}_{ik} g_x^{ik}$, де $\bar{\varepsilon} = f^0(\bar{x}, \bar{y}) - \xi^*$.

Істотні проблеми виникають, якщо підзадачі не мають рішень при деяких значеннях зв'язуючих змінних. Для подолання цих проблем у **підрозділі 4.2** розглядаються різні прийоми регуляризації у схемах декомпозиції. Всі ці підходи засновані на використанні точних штрафних функцій.

Підрозділ 4.3 присвячений використанню точних штрафних функцій у схемах декомпозиції. Деталізують підходи, викладені в розділі 3. Розглядається задача

$$F^* = \min_x \sum_{q=1}^{Q} f_q^0(x^0, x^q) \qquad (45)$$

при обмеженнях

$$(x^0, x^q) \in C_q = \left\{ (x^0, x^q) : f_q^1(x^0, x^q) \le 0 \right\}, q = 1, ..., Q, \qquad (46)$$

де $f_q^i(x^0, x^q)$ – опуклі власні функції, $i = 0,1$, $x^q \in R^{N_q}$, $q = 0,1,\dots,Q$.

Використання точних штрафних функцій дозволяє привести задачу (45)–(46) до вигляду: знайти

$$\min_x \sum_{q=1}^{Q} \left[f_q^0(x^0, x^q) + \beta_q f_q^+(x^0, x^q) \right]. \tag{47}$$

Координуюча задача (34) та підзадачі (33) також виявляються задачами безумовної оптимізації. Тут $f_q^+(x^0, x^q) = \max\left\{0, f_q^1(x^0, x^q)\right\}$.

Позначимо $x = (x^q, q = 0,..,Q)$, $C = \left\{x : (x^0, x^q) \in C_q,\ q = 1,...,Q\right\}$,

y_0 – початкова точка така, що $f_q^1(y_0^0, y_0^q) < 0,\ q = 1,...,Q$.

x_k – точка, отримана на k-ій ітерації при мінімізації штрафної функції (47),

$z_k = P(x_k)$ – точка, отримана за правилом P, $z_k \in C$, $k = 1,2,...$.

Задача (29) побудови оптимального правила P має вигляд

$$z_k = P(x_k) = \arg\min_z \left\{ \sum_{q=1}^{Q} f_q^0(z^0, z^q) + \varepsilon \left\| z - x_k \right\| : (z^0, z^q) \in C_q, q = 1,...,Q \right\}. \tag{48}$$

Наближене розв'язання задачі (48) виконується послідовно по етапах $q = 0,...,Q$. На этапі $q = 0$ визначаємо $\overline{z}_k = \pi_C(x_k, y_0)$. Значення зв'язуючих змінних на подальших етапах змінюватися не будуть $z_k^0 = \overline{z}_k^0$. На этапі $q = 1,...,Q$ виконується окрема обробка блоку q. Якщо $f_q^1(z_k^0, \overline{z}_k^q) = 0$, визначаємо $z_k^q = \overline{z}_k^q$. У випадку $f_q^1(z_k^0, \overline{z}_k^q) < 0$ знаходиться наближене рішення задачі (48) для блоку q. Зв'язуючі змінні і змінні решти блоків вважаються зафіксованими. Коефіцієнти β^{k+1} перераховуються відповідно до співвідношень (30), (31).

Для задач з обмеженими областями визначення функцій пропонується (**підрозділ 4.4**) використовувати методи опуклого продовження, описані в розділі 2. Функції підзадач мають бути ліпшицевими. У **підрозділі 4.5** описуються особливості програмної реалізації схеми декомпозиції для спеціального класу задач, наводяться результати обчислювальних експериментів, обговорюються можливості підвищення ефективності алгоритмів, що розробляються.

Підрозділ 4.6 присвячений блоковим задачам лінійного програмування з вкладеною структурою. У **пункті 4.6.1** вважається за задане дерево (V, E). Кожній вершині $q \in V$ відповідає оптимізаційна задача, залежна від параметрів. Вектор параметрів позначимо x^q, вектор змінних, по яких проводиться оптимізація – y^q. Задачі, відповідні різним вершинам дерева (V, E), є зв'язаними. Зв'язок полягає у тому, що якщо вершина q є безпосередній потомок вершини p, то $x^q = (x^p, y^p)$. Записи $f^q(x^q)$ та $f^q(x^p, y^p)$ вважаються еквівалентними, де q – безпосередній потомок вершини p.

Позначимо $S(q)$ множину безпосередніх потомків вершини q. Оптимізаційна задача для вершини $q \in V$ має вигляд: знайти

$$\varphi^q(x^q) = \min_{y^q} \left\{ c^q y^q + \sum_{s \in S(q)} \varphi^s(x^q, y^q) \right\}, \tag{49}$$

при обмеженнях

$$A^q y^q \le d^q - B^q x^q. \tag{50}$$

Нехай для кожного $q \in V$ задана нижня кусочно-лінійна апроксимація $H^q(x^q, y^q) = \max_i \left\{ (h_x^{qi}, x^q) + (h_y^{qi}, y^q) + \eta_i,\ i = 1, ..., I^q \right\}$ для функції $\sum_{s \in S(q)} \varphi^s(x^q, y^q)$ у формулі (49). Розглянемо оціночні задачі:

l-апроксимація задачі (49)–(50)

$$\psi^q(x^q) = \min_{y^q} \left\{ c^q y^q + H^q(x^q, y^q) \right\}, \tag{51}$$

при обмеженнях

$$A^q y^q \le d^q - B^q x^q, \tag{52}$$

ld-апроксимація задачі (49)–(50)

$$\xi^q(x^q) = \min_{y^q} \left\{ c^q y^q + \sum_{s \in S(q)} \psi^s(x^q, y^q) \right\}, \tag{53}$$

при обмеженнях

$$A^q y^q \le d^q - B^q x^q. \tag{54}$$

ld-апроксимація є блочною задачею лінійного програмування із зв'язуючими змінними. Для пошуку ε^q-оптимального рішення цієї задачі використовується метод декомпозиції (**$P(\varepsilon^q)$-процедура**) за змінними y^q. На кожній ітерації k методу декомпозиції уточнюється також апроксимація $H^q(x^q, y^q)$, рішення задачі (51)–(52) визначає $\psi^q(x^q)$ – оцінку знизу для $\xi^q(x^q)$. Поточна точка y_k^q і значення $\xi^q(x^q, y^q) = c^q y_k^q + \sum_{s \in S(q)} \psi^s(x^q, y_k^q)$ використовуються для уточнення оцінки зверху для $\xi^q(x^q)$. Пошук припиняється, якщо $\xi^q(x^q, \bar{y}^q) - \psi^q(x^q) \le \varepsilon^q$, де $\bar{y}^q$ – якнайкраще отримане допустиме рішення задачі (53)–(54).

Позначимо: I^q – множина індексів параметрів вершини $q \in V$, тобто $x^q = (x_i, i \in I^q)$; $x = (x_i, i \in \bigcup_{q \in V} I^q)$. Якщо задано вектор $\bar{x}$, то також задані значення змінних $\bar{y}^q$ для кожної вершини $q \in V$, що не є висячею. Вектор $\bar{x}$ називатимемо допустимим, якщо для кожної невисячої вершини виконуються обмеження (50), а для висячих вершин обмеження (50) визначають непорожні множини.

Позначимо V^* множину висячих вершин дерева (V,E), $\varepsilon=(\varepsilon^q,\, q\in V\setminus V^*)$, $\varepsilon\geq 0$. Апроксимації $H^q(x^q,y^q),\, q\in V\setminus V^*$ назвемо ε-сбалансованими в допустимій точці $\overline{x}$, якщо

$$0\leq c^q\overline{y}^q+\sum_{s\in S(q)}\psi^s(\overline{x}^q,\overline{y}^q)-\psi^q(\overline{x}^q)\leq\varepsilon^q,\; q\in V\setminus V^*. \tag{55}$$

$A(\varepsilon)$**-алгоритм** – пошук (послідовне застосування $P(\varepsilon^q)$-процедур) допустимої точки x та побудова ε-сбалансованих апроксимацій $H^q(x^q,y^q),\, q\in V$ в цій точці. Вектор ε забезпечує узгодження точності вирішення ld-апроксимацій для всіх вершин дерева (V,E).

Алгоритм вирішення сукупності задач (49)–(50) для всіх вершин дерева (V,E) полягає в ітеративному застосуванні $A(\varepsilon)$-алгоритма. Вважаються за задані початкові значення вектора $\varepsilon=(\varepsilon^q, q\in V)$. На кожній ітерації уточнюються (зменшуються) значення компонент вектора ε і застосовується $A(\varepsilon)$-алгорітм. Процес припиняється при досягненні необхідної точності.

У **пункті 4.6.2** розглядається стохастична модель планування інвестицій в електроенергетиці. Як основа для цієї моделі узята відома постановка задачі. Для формування дерева підзадач (V,E) використовується сценарний підхід. Для вирішення застосовується схема, описана в пункті 4.6.1. Обчислювальні експерименти проводилися на задачах двох-, трьох-, чотирьох- і п'ятиетапного планування. Розроблені програмні засоби виявилися досить ефективними.

У **пункті 4.6.3** розглядається задача перспективного планування в електроенергетиці з урахуванням добових неравномерностей споживання електроенергії. Розроблена математична модель для енергосистеми, яка описується сукупністю електрогенеруючих та керуючих об'єктів. Як керуючі використовуються енергоакумулюючі об'єкти (ГАЕС), маневрені енергоблоки ТЕС, а також електротермічні споживачі-регулятори.

За певних обмежень на змінні сформульована модель є багатоетапною лінійною задачею стохастичного програмування (у загальному випадку – нелінійною і неопуклою). Для вирішення використовувалися сценарний підхід і розроблені програмні засоби. Ці задачі також вирішувалися досить ефективно.

Розділ 5 «Використання негладкої оптимізації в задачах побудови алгоритмів класифікації». У підрозділі 5.1 розглядаються задачі побудови лінійних класифікаторів. Найбільш дослідженими є класифікатори для розділення двох класів. Найбільш складними є задачі побудови класифікаторів для лінійно нероздільних навчальних вибірок.

Лінійним дискримінантним класифікатором для m класів називається відображення

$$a(x,W)=\arg\max_i\left\{\left\langle w^i,x\right\rangle+w_0^i : i=1,...,m\right\},\ x,w^i\in R^n, w_0^i\in R,\ i=1,...,m, \quad (56)$$

де $W=\left((w^1,w_0^1),...,(w^m,w_0^m)\right)$ – параметри класифікатора. Функції $f_i(w^i,w_0^i,x)=\left\langle w^i,x\right\rangle+w_0^i,\ i=1,...,m$ називаються лінійними дискримінантними функціями. Навчальна вибірка – кінцеві непересічні множини $\Omega_i, i=1,...,m$, $\Omega_i=\left\{x^t : t\in T_i\right\}$, $T=\bigcup_{i=1}^m T_i$.

Класифікатор $a(x,W)$ правильно розділяє точки з $\Omega_i, i=1,...,m$, якщо $a(x,W)=i$, для всіх $x\in\Omega_i, i=1,...,m$. Позначимо

$g^t(W)=\min\left\{(w^i-w^j,x^t)+w_0^i-w_0^j : j\in\{1,...,m\}\setminus i, i=i(t)\right\}$ – просвіт класифікатора $a(x,W)$ в точці x^t, $t\in T$, тут $i(t)$ – номер множини Ω_i, якій належить x^t, $t\in T$;

$g(W)=\min\left\{g^t(W): t\in T\right\}$ – просвіт класифікатора $a(x,W)$ на сукупності множин $\Omega_i, i=1,...,m$; класифікатор $a(x,W)$ правильно розділяє точки з $\Omega_i, i=1,...,m$, якщо $g(W)>0$;

$\eta(W)$ – норма класифікатора (вектора $(w^1,...,w^m)$), наприклад, $\eta(W)=\sqrt{\sum_{i=1}^m\sum_{k=1}^n\left(w_k^i\right)^2}$.

Задача побудови оптимального класифікатора

$$g^*=\max_W\left\{g(W):\eta(W)=1\right\}. \quad (57)$$

Функція $g(W)$ – угнута, $\eta(W)$ – опукла. В цілому задача (57) є задачею неопуклого програмування, але у разі лінійної роздільності множин $\Omega_i, i=1,...,m$, обмеження $\eta(W)=1$ можна замінити на $\eta(W)\le 1$, і ця задача стає задачею опуклого програмування, для вирішення якої існують ефективні алгоритми.

У разі лінійної нероздільності множин $\Omega_i, i=1,...,m$, для вирішення задачі (57) в загальному випадку невідомі ефективні алгоритми і для пошуку наближених рішень використовуються різні евристичні алгоритми. Найбільш відомим і широко використовуваним є метод опорних векторів (SVM).

Для лінійно нероздільних множин має місце $g^*\le 0$. В цьому випадку для двох класів рішення задачі (57) мінімізує полосу неправильної класифікації, поза якою точки навчальної вибірки класифікуються правильно. Замість евклідової норми в обмеженні задачи (57) можуть також використовуватися інші норми. Трудомісткість рішення цієї задачі істотно залежить від використовуваної норми.

Теорема 5.2. Нехай множини Ω_1,Ω_2 лінійно нероздільні, в задачі (57) для двох класів використовується норма $\eta(W)=\|w\|_\infty=\max\left\{\left|w_j\right|:\ j=1,...,n\right\}$.

Тоді задача (57) поліноміально вирішувана (досить вирішити $2n$ задач лінійного програмування).

У разі довільного числа класів, $m \geq 2$, формулюється задача мінімізації емпіричного ризику (числа точок, які класифікуються неправильно) для лінійно нероздільних множин. Нехай задано $\delta > 0$ – параметр надійності класифікації. Точки $x^t, t \in T$, для яких $g^t(W) < \delta$, розділяються (класифікуються) класифікатором $a(x,W)$ ненадійно.

Задача мінімізації емпіричного ризику з урахуванням надійності δ має вигляд: знайти

$$Q^* = \min_{w,y} \left\{ \sum_{t \in T} y_t \right\} \tag{58}$$

при обмеженнях

$$(w^i - w^j, x^t) + w_0^i - w_0^j \geq \delta - B_t \cdot y_t,\ j \in \{1,..., m\} \setminus i,\ t \in T_i,\ i = 1,..., m, \tag{59}$$

$$\eta(W) \leq 1, \tag{60}$$

$$\sum_{t \in T_i} y_t \leq |T_i| - 1,\ i = 1,..., m, \tag{61}$$

$$0 \leq y_t \leq 1, t \in T, \tag{62}$$

$$y_t = 0 \vee 1, t \in T, \tag{63}$$

де $B_t, t \in T$ – досить великі позитивні числа. Якщо $y_t = 1$, то точка x^t виключається з навчальної вибірки.

Задача (58)–(63) – частково цілочисельна. Для її вирішення мають розроблятися наближені алгоритми. Для обчислення оцінки знизу q^* для величини Q^* та побудови допустимих рішень пропонується використовувати неперервну релаксацію задачі (58)–(63), яка приводиться до вигляду

$$q^* = \min \sum_{t \in T} d^t(W) \tag{64}$$

при обмеженнях

$$\eta(W) \leq 1, \tag{65}$$

$$\sum_{t \in T_i} d^t(W) \leq |T_i| - 1, i = 1,..., m, \tag{66}$$

$$d^t(W) \leq 1, t \in T, \tag{67}$$

де $d^t(W)$ – опуклі кусочно-лінійні функції.

У **пункті 5.1.5** показано, що відомі математичні моделі, які використовуються в методі SVM опорних векторів і методі робастного лінійного програмування (K.P. Bennett, O.L. Mangasarian), є окремим випадком лагранжевої релаксації (при спеціальному виборі множників Лагранжа) задачі (58)–(62). У **пункті 5.1.6** приведені результати обчислювальних експериментів, що показують ефективність використання методів негладкої оптимізації у задачах з великим числом точок в навчальних множинах.

У **підрозділі 5.2** розглянуті класифікатори, в яких як дискримінантні функції використовуються опуклі кусочно-лінійні функції. За допомогою таких класифікаторів можна забезпечити правильне розділення точок для будь-якої сукупності кінцевих непересічних множин. Проте задачі побудови таких класифікаторів є неопуклими і для їх вирішення невідомі ефективні алгоритми.

Разом з лінійними дискримінантними класифікаторами у випадку багатьох класів у **підрозділі 5.3** розглянуті послідовні лінійні класифікатори, засновані на формуванні лінійних класифікаторів для кожної пари множин з навчальної вибірки. Умовою послідовної лінійної роздільності множин (роздільності за допомогою таких класифікаторів) є неперетинання опуклих оболонок цих множин. Звідси випливає, що можливості послідовних лінійних класифікаторів ширше в порівнянні з лінійними дискримінантними класифікаторами.

Важливим застосуванням підходів, що розробляються, є задачі виділення інформативних ознак у медичній діагностиці. У **підрозділі 5.4** представлені розроблені алгоритми виділення найбільш інформативних ознак у задачах діагностики на підставі експресії генів людини. Робота виконувалася спільно з Інститутом генетики НАН України. Розглядалася задача побудови класифікаторів для чотирьох класів. Формувався послідовний лінійний класифікатор. Задачі виділення інформативних ознак вирішувалися для кожної пари класів. Початкова розмірність признакового простору – 25000 генів. В результаті застосування запропонованого підходу кількість інформативних ознак вдавалося скорочувати до 20÷50, що відповідає припущенням фахівців у прикладній області.

Розділ 6 «Задачі оптимального проектування складних технічних об'єктів». Тут приводяться підходи, що дозволяють враховувати структурні особливості складних задач оптимізації. Розглядаються проблеми, пов'язані з такими підходами, і питання програмної реалізації цих підходів.

У **підрозділі 6.1** аналізуються загальні характеристики задач проектування енергетичних котлоагрегатів. Компонентами енергетичного котлоагрегата є – топка, радіаційні, ширмові і конвективні перегрівачі, економайзери, підігрівачі повітря та ін. Зв'язки між компонентами визначаються тепловою схемою котлоагрегата. Проектована конструкція має працювати в декількох альтернативних режимах, які визначаються використовуваним паливом і величиною навантаження. При цьому для всіх режимів роботи котлоагрегата мають виконуватися технологічні обмеження (обмеження за температурою стінок труб, коефіцієнтам запасу міцності тощо).

Якість проектованої конструкції оцінюється одним або декількома цільовими критеріями. Як такі критерії розглядаються вартість, матеріаломісткість та приведені витрати. У розроблених моделях склад компонент, теплова схема, структурні характеристики всіх поверхонь нагріву (шахова або коридорна компоновка, прямоточне або протиточне включення по пару, типи обребрення й ін.) передбачаються заданими. Також вважаються заданими для кожного режиму характеристики теплоносіїв на входах і виходах пароводяних трактів, температура повітря на вході повітряного тракту.

При формуванні конкретної задачі оптимізації задається список варійованих конструктивних параметрів котлоагрегата (для кожної поверхні нагріву – діаметри і товщина стінок труб, число петель та ін.) і критерій якості конструкції. В результаті рішення задачі оптимального проектування визначаються значення варійованих конструктивних параметрів і значення всіх необхідних розрахункових характеристик (температура і обсяг теплоносія в різних точках теплової схеми, температура стінок труб поверхонь нагріву та інші характеристики). Всі змінні в моделі є неперервними величинами. В результаті рішення оптимізаційної задачі можуть бути отримані дробові значення для величин, які змістовно повинні мати дискретні значення (наприклад, число петель, сортамент труб). Для таких змінних отримані значення округляються до найближчих дискретних значень.

У наступних підрозділах розглядаються дві оптимізаційні моделі проектування котлоагрегатів – модель проектування на номінальний режим експлуатації і модель проектування, що враховує альтернативні режими експлуатації.

У моделі проектування на номінальний режим експлуатації витрата палива і значення керуючих параметрів (рециркуляція газів і величини вприскувань) вважаються заданими. Розрахунки для режимів роботи на часткових навантаженнях, на альтернативному паливі виконують після рішення оптимізаційної задачі для перевірки отриманих рішень.

Набагато складнішою є модель проектування, що враховує альтернативні режими експлуатації. В результаті рішення такої оптимізаційної задачі, окрім значень конструктивних характеристик котлоагрегата, мають також визначатися для кожного режиму витрата палива і оптимальні значення керуючих характеристик. У моделі враховуються технологічні обмеження для всіх режимів експлуатації.

В цілому задачі оптимального проектування (вибору раціональних значень конструктивних характеристик) енергетичного котлоагрегата формулюються як задачі математичного програмування. Число змінних і обмежень в таких задачах після можливих спрощень досягає декількох тисяч. Система обмежень включає лінійні та нелінійні рівняння і нерівності.

У **підрозділі 6.2** розглядаються математичні моделі, в яких враховується тільки номінальний режим роботи котлоагрегата. Важливим моментом при формулюванні математичних моделей оптимального проектування є вибір незалежних змінних задач оптимізації. У початковій задачі слід визначити значення конструктивних характеристик котлоагрегата.

Одним з підходів є вибір цих величин як незалежних змінних. Як наслідок, в результаті розрахунків визначаються значення теплосприйняття поверхонь нагріву. При цьому на кожній ітерації оптимізаційних алгоритмів мають вирішуватися складні системи нелінійних рівнянь великої розмірності.

У разі, коли в математичній моделі враховується тільки номінальний режим роботи котлоагрегата, можливий альтернативний підхід – вибір теплосприйняття поверхонь нагріву як незалежні змінні. Одна з конструктивних характеристик поверхонь нагріву в цьому випадку отримується в результаті розрахунку (наприклад, для конвективних поверхонь такою характеристикою є число петель). При такому підході система рівнянь задачі розпадається на сукупність слабозв'язаних блоків, що дозволяє будувати ефективніші алгоритми.

Аналогічні особливості характерні для математичних моделей інших складних технічних об'єктів. Для опису структури таких моделей вводиться поняття «обчислювальний модуль», який характеризується наборами вхідних і вихідних параметрів і реалізує обчислення значень вихідних параметрів при заданих значеннях вхідних, а також – субградієнти вихідних параметрів. Відповідно до об'єктно-орієнтованого підходу будується ієрархія класів (бібліотека класів RBL – Recursive Block Library), базовим класом якої є клас «обчислювальний модуль». Бібліотека RBL включає клас «система рівнянь» і клас агрегації ациклічної мережі обчислювальних модулів. Вказані класи дозволяють рекурсивно будувати нові об'єкти з тих, що вже існують. Бібліотека RBL містить також класи формування і вирішення оптимізаційних задач. При реалізації конкретних застосувань прикладні класи мають успадковуватися від базових класів бібліотеки RBL.

Наводяться приклади опису структури деяких задач оптимального проектування котлоагрегатів. Особливістю запропонованих математичних моделей є те, що системи нелінійних рівнянь окремих модулів мають невелику розмірність і можуть бути ефективно вирішені. Прийнятий підхід дозволяє виконати редукцію початкової задачі великої розмірності до задачі істотно меншій розмірності. Для вирішення скороченої задачі використовується модифікація негладкого методу оптимізації – r-алгоритма Н.З. Шора.

Запропонована схема рішення задачі оптимального проектування в обчислювальному відношенні виявилася дуже ефективною, проте в процесі рішення не враховувалися обмеження альтернативних режимів експлуатації. Це приводить до необхідності подальших істотних доопрацювань отримуваних конструкцій традиційними методами проектування.

У **підрозділі 6.3** для подолання цих проблем розглядається узагальнена модель, що враховує альтернативні режими експлуатації. В узагальненій моделі для кожного режиму експлуатації використовується ефективна модель з урахуванням одного режиму, а зв'язок між різними режимами забезпечується за допомогою точних штрафних функцій.

У **підрозділі 6.4** описується прототип системи автоматизованого проектування «Комплексні розрахунки і оптимізація котельних установок» (КРОКУС), розроблений для підготовки вихідних даних і аналізу результатів рішень оптимізаційних задач.

У **підрозділі 6.5** розглядаються особливості реалізації оптимізаційної підсистеми. Приведено опис рекурсивної бібліотеки класів моделювання складних об'єктів – RBL, опис методик теплотехнічних розрахунків. Сформовані задачі вирішуються методом негладких штрафних функцій і модифікованим r-алгоритмом. Для використовуваних в задачах функцій задаються обмеження областей визначення.

Розроблений прототип системи автоматизованого проектування переданий у дослідну експлуатацію в Харківське ЦКБ «ЕНЕРГОПРОГРЕС». За наслідками роботи можна зробити висновки про те, що реалізовані програмні засоби дозволяють істотно скоротити час вироблення технічних рішень на етапах тендерного і ескізного проектування; понизити вартість, матеріаломісткість, експлуатаційні витрати проектованих конструкцій; підвищити якість приймаємих рішень.

ВИСНОВКИ

Роботи, результати яких викладені в дисертації, були ініційовані необхідністю узагальнити і обгрунтувати підходи, приведені в розділі 6, що дозволили реалізувати ефективну схему рішення складної практичної задачі. Істотною проблемою була обмеженість областей визначення використовуваних функцій. Природним рішенням було продовження функцій з допустимої області задачі на весь простір змінних.

Для обгрунтування запропонованих підходів потрібно було розробити такі процедури продовження функцій, які зберігали б опуклість побудованої задачі, якщо початкова задача з обмеженнями була опуклою. Ці питання розглядаються в розділі 2. Розроблені нові ефективні методи побудови задач безумовної оптимізації еквівалентних початковим задачам з обмеженнями. Опукла задача безумовної оптимізації, що формується, залежить від одного числового параметра, значення якого визначається у ході роботи оптимізаційного алгоритму. Реалізовані програмні засоби продемонстрували істотні переваги при вирішенні погано обумовлених спеціальних задач у порівнянні з існуючими оптимізаційними пакетами.

Розроблені методи опуклого продовження характеризувалися корисною властивістю – для оцінювання значення параметра, від якого залежить задача безумовної оптимізації, не потрібно вирішувати трудомісткі допоміжні задачі. Це кардинально відрізнялося від ситуації, характерної для відомих методів застосування точних штрафних функцій.

Розділ 3 присвячений опису нових підходів при використанні точних штрафних функцій, що не вимагають вирішення складних допоміжних задач для оцінки штрафних коефіцієнтів. Штрафні коефіцієнти уточнюються у ході роботи алгоритму безумовної оптимізації штрафної функції. На кожній ітерації алгоритму для поточної точки x_k має деяким чином визначатися допоміжна допустима точка y_k початкової задачі (може використовуватися на всіх ітераціях одна і та ж початкова допустима точка). Розглядаються різні процедури оцінки штрафних коефіцієнтів. Від правила вибору допоміжної точки y_k залежать встановлювані значення штрафних коефіцієнтів. Приводяться умови, при яких встановлюються кінцеві значення штрафних коефіцієнтів. Формулюється задача визначення якнайкращого правила вибору допоміжної точки. Така задача не простіше початкової, але для визначення штрафних коефіцієнтів можуть використовуватися наближені алгоритми. У розділі приводиться оцінка величини штрафних коефіцієнтів, яка може встановлюватися при використанні спеціального правила вибору допоміжної точки. Ця оцінка для задач лінійного програмування збігається з відомими класичними результатами. Запропоновані підходи корисні при використанні алгоритмів негладкої оптимізації, r-алгоритма Н.З. Шора для вирішення задач оптимізації з обмеженнями.

Особливе значення мають запропоновані підходи в методах декомпозиції блокових задач оптимізації із зв'язуючими змінними. У таких методах виникають істотні проблеми в ситуаціях, коли підзадачі не мають рішень при деяких значеннях зв'язуючих змінних. Ці проблеми можуть бути вирішені при використанні точних штрафних функцій. Проте допоміжні спрощені задачі, рішення яких необхідні для оцінки значень штрафних коефіцієнтів традиційними методами, виявляються дуже трудомісткими. Запропоновані підходи дозволяють подолати ці проблеми.

В розділі 4 розглядаються проблеми застосування схем декомпозиції по змінним для вирішення структурованих нелінійних задач опуклої оптимізації. У розділі сформульовані умови, при виконанні яких може бути обчислений ε-субградієнт оптимального значення підзадачі на підставі наближеного рішення цієї підзадачі. Описані процедури обчислення ε-субградієнта оптимального значення на основі кусочно-лінійної апроксимації, отриманої в процесі вирішення цієї підзадачі.

Розглядаються різні прийоми регуляризації вихідних задач, що забезпечують існування допустимих рішень підзадач при будь-яких значеннях зв'язуючих змінних. Всі ці прийоми засновані на використанні точних штрафних функцій. Деталізуються підходи до оцінювання значень штрафних коефіцієнтів, викладені в розділі 3, щодо схем декомпозиції. Для задач з обмеженими областями визначення функцій пропонується використовувати методи опуклого продовження, описані в розділі 2. Функції підзадач мають бути ліпшицевими.

Розглядається узагальнення блокових задач із зв'язуючими змінними – блокові задачі лінійного програмування з вкладеною структурою. Ці задачі виникають у таких прикладних областях, як моделювання в економіці, багатоетапне стохастичне програмування та ін. У підрозділі описуються схема декомпозиції для задач такого типу, особливості програмної реалізації і результати обчислювальних експериментів для задач планування інвестицій в електроенергетиці.

Розділ 5 присвячений задачам побудови класифікаторів, що відносять кожну точку простору ознак до одного з m класів $m \geq 2$. Істотні проблеми в цій області виникають у разі, коли навчальні вибірки (множини) виявляються лінійно нероздільними. Для лінійно нероздільних множин формулюється нова модель мінімізації емпіричного ризику. Запропонована задача є частково цілочисельною. Для обчислення оцінки оптимального рішення і побудови наближених рішень пропонується використовувати неперервну релаксацію такої задачі. Проводиться порівняння з відомими математичними моделями.

У випадку двох класів для лінійно нероздільних множин розглянуто задачу побудови смуги мінімальної ширини, поза якою точки навчальної вибірки класифікуються правильно. Розглянута задача неопукла. У загальному випадку для цієї задачі невідомі ефективні методи пошуку глобального мінімуму. Але задача виявляється поліноміально вирішуваною при використанні спеціальної норми в просторі ознак. Отриманий результат може використовуватися для формування наближених рішень у загальному випадку.

Для випадку багатьох класів у розділі розглянуті послідовні лінійні класифікатори, що мають ширші можливості в порівнянні з лінійними класифікаторами. Через це у випадку багатьох класів доцільніше використовувати послідовні лінійні класифікатори.

Важливими прикладними задачами є задачі виділення інформативних ознак. Розроблені алгоритми і програмні засоби вирішення таких задач, які використовувалися при виділенні найбільш інформативних ознак у задачах діагностики на підставі експресії генів людини (спільно з Інститутом генетики НАН України).

Приведені результати обчислювальних експериментів, що показують ефективність використання методів негладкої оптимізації у задачах побудови класифікаторів з великим числом точок в навчальних множинах.

У розділі 6 розглядаються прикладні задачі оптимального проектування в електроенергетиці, актуальність яких визначається необхідністю у реконструкції і модернізації енергоблоків теплоелектростанцій, що виробили свій ресурс. Енергоблоки є складними технічними об'єктами, що складаються з великого числа зв'язаних між собою окремих компонент. Для оптимізації конструктивних характеристик таких об'єктів були розроблені математичні моделі, що дозволяють виконувати редукцію вихідних задач великої розмірності до задач істотно меншій розмірності. В результаті редукції формується негладка неопукла задача. Для її вирішення використовується модифікація негладкого методу оптимізації – r-алгоритма Н.З. Шора. Розроблені програмні засоби передані в дослідну експлуатацію в Харківське ЦКБ «ЕНЕРГОПРОГРЕС».

Автор висловлює глибоку подяку академіку НАН України І.В. Сергієнко, член-кореспонденту НАН України П.С. Кнопову, професору Ю.М. Даніліну за підтримку та цінні поради, співробітникам відділу методів негладкої оптимізації Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України за співпрацю при виконанні робіт, старшому науковому співробітнику Т.А. Бардадим за допомогу і корисні зауваження.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Лаптин Ю.П. Система математических моделей расчета и оптимизации конструктивных решений энергетических паровых котлов / Ю.П. Лаптин, В.А. Медведев, П.И. Волковицкая // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 1994. – С. 17–22.
2. Лаптин Ю.П. Объектно-ориентированные средства оптимизационного моделирования сложных объектов / Ю.П. Лаптин // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2001. – С. 31–37.
3. Лаптин Ю.П. Разработка программных средств оптимизации сложных технических объектов / Ю.П. Лаптин, Н.Г. Журбенко // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2002. – С. 3–12.
4. Лаптин Ю.П. Использование средств оптимизации в системе автоматизированного проектирования энергетических котлоагрегатов КРОКУС / Ю.П. Лаптин, Н.Г. Журбенко, М.М. Левин, П.И. Волковицкая // Энергетика и электрификация. – 2003. – № 7. – С. 41–51.
5. Лаптин Ю.П. ε-субградиенты в методах декомпозиции по переменным для некоторых задач оптимизации / Ю.П. Лаптин // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2003. – № 2. – С. 75 – 82.
6. Лаптин Ю.П. Декомпозиция по переменным для некоторых задач оптимизации / Ю.П. Лаптин // Кибернетика и системный анализ. – 2004. – № 1. – С. 98–104.
7. Лаптин Ю.П. Решение блочных нелинейных задач оптимизации со связывающими переменными / Ю.П. Лаптин, Н.Г. Журбенко, В.Н. Кузьменко // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2004. – № 3. – С. 142–149.
8. Лаптин Ю.П. Решение одного класса задач оптимизации с нелинейными ограничениями / Ю.П. Лаптин // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2005 – № 4. – С. 134–139.
9. Лаптин Ю.П. Некоторые вопросы решения блочных нелинейных задач оптимизации со связывающими переменными / Ю.П. Лаптин, Н.Г. Журбенко // Кибернетика и системный анализ. – 2006. – № 2. – С. 47–55.
10. Лаптин Ю.П. Некоторые задачи построения описанных эллипсоидов / Ю.П. Лаптин // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2006. – № 5. – С. 67–75.
11. Лаптин Ю.П. Один подход к решению оптимизационных задач с вложенной структурой. / Ю.П. Лаптин, А.П. Лиховид // Теория оптимальных решений. –

Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2007. – № 6. – С. 90–99.
12. Лаптин Ю.П. Некоторые нелинейные оптимизационные задачи сетевой структуры / Ю.П. Лаптин, Д.Л. Крошко // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2009. – № 8. – С. 127–135.
13. Лаптин Ю.П. Один подход к решению нелинейных задач оптимизации с ограничениями / Ю.П. Лаптин // Кибернетика и системный анализ. – 2009. – № 3. – С. 182–187.
14. Laptin Yu. Exact discriminant function design using some optimization techniques / Yu. Laptin, A. Vinogradov // Classification, Forecasting, Data Mining. International Book Series “INFORMATION SCIENCE & COMPUTING”, Numder 8, Sofia, Bulgaria. – 2009. – P. 14–19.
15. Laptin Yu.P. Approaches to Construction of Linear Classifiers in the Case of Many Classes / Yu.P. Laptin, A.P. Likhovid, and A.P. Vinogradov // Pattern Recognition and Image Analysis. – 2010. – Vol. 20, N 2. – P. 137–145.
16. Laptin Yu.P. Minimization of empirical risk in linear classifier problem / Yu.P. Laptin, Yu. Zhuravlev, A.P. Vinogradov // New Trends in Classification and Data Mining, ITHEA, Sofia, Bulgaria. – 2010. – P. 9–15.
17. Лаптин Ю.П. Решение некоторых задач планирования в условиях неопределенности / Ю.П. Лаптин, А.П. Лиховид, Н.Н. Стрюкова // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2010. – № 9. – С. 62–71.
18. Лаптин Ю.П. Использование выпуклых продолжений функций для решения нелинейных задач оптимизации / Ю.П. Лаптин, А.П. Лиховид // Управляющие системы и машины. – 2010. – № 6. – С. 25–31.
19. Лаптин Ю.П. Некоторые вопросы использования негладких штрафных функций / Ю.П. Лаптин // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2011. – № 10. – С. 127–135.
20. Лаптин Ю.П. О разработке программного обеспечения задач оптимального проектирования теплоэнергетических установок / Ю.П. Лаптин, Н.Г. Журбенко, М.М. Левин, П.И. Волковицкая // Кибернетика и системный анализ. – 2011. – № 1. – С. 116–127.
21. Лаптин Ю.П. Минимизация эмпирического риска и задачи построения линейных классификаторов / Ю.П. Лаптин, Ю.И. Журавлев, А.П. Виноградов. // Кибернетика и системный анализ. – 2011. – № 4. – С. 155–164.
22. Лаптин Ю.П. Построение нелинейных классификаторов в случае многих классов / Ю.П. Лаптин, Ю.И. Журавлев, А.П. Виноградов // Applicable Information vodels. ITHEA, Sofia, 2011. – P. 7–13.
23. Лаптин Ю.П. Некоторые подходы к регуляризации нелинейных задач оптимизации / Ю.П. Лаптин, Т.А. Бардадым // Проблемы управления и информатики. – 2011. – № 3. – С. 57–68.

24. Лаптин Ю.П. Некоторые вопросы определения коэффициентов негладких штрафных функций / Ю.П. Лаптин // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2012. – С. 73–79.
25. Лаптин Ю.П. Использование штрафных функций для решения некоторых задач оптимизации / Ю.П. Лаптин // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2013. – С. 95–101.
26. Laptin Yu. Nonsmooth optimization methods in the problems of constructing a linear classifier / Yu. Laptin, Yu. Zhuravlev, A. Vinogradov, N. Zhurbenko, A. Likhovid // International Journal “Information Models and Analyses”. – 2012. – Vol. 1, N 2. – P. 103–111.
27. Laptin Yu. A comparison of some approaches to the recognition problems in case of two classes / Yu. Laptin, Yu. Zhuravlev, A. Vinogradov, A. Likhovid // Int. Journal "Information models and analyses". – 2013. – Vol. 2, N 2. – P. 103–111.
28. Laptin Yu. Comparison of Some Approaches to Classification Problems, and Possibilities to Construct Optimal Solutions Efficiently / Yu. Laptin, Yu. Zhuravlev, A. Vinogradov // Pattern Recognition and Image Analysis. – 2014. – Vol. 24, N 2. – P. 189–195.
29. Лаптин Ю.П. Точные штрафные функции в схемах декомпозиции по переменным / Ю.П. Лаптин // Теория оптимальных решений. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2014. – С. 39–48.
30. Лаптин Ю.П. Решение невыпуклых задач оптимизации с использованием точных штрафных функций / Ю.П. Лаптин // Компьютерная математика. – Киев: Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины. – 2014. – № 1. – С. 119–130.
31. Лаптин Ю.П. Вопросы построения точных штрафных функций / Ю.П. Лаптин // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 10: Прикладная математика. – 2013. – Вып. 4. – С. 21–31.
32. Лаптин Ю.П. Определение молекулярных подклассов глиобластом на основе анализа экспрессии генов / В.В. Дмитренко, П.И. Стецюк, Ю.П. Лаптин и др. // Цитология и генетика. – 2014. – Т. 48, № 6. – С. 45–55.
33. Лаптин Ю.П. Использование декомпозиции по переменным для нелинейных задач оптимизации / Ю.П. Лаптин, Н.Г. Журбенко, В.Н. Кузьменко // Декомпозиционные методы в математическом моделировании и информатике. Тезисы докладов 2-й Московской конференции (21–24 июня 2004). – М.: ВЦ РАН, 2004. – С. 64–65.
34. Лаптин Ю.П. Декомпозиция блочных задач оптимизации со связывающими переменными / Ю.П. Лаптин, Н.Г. Журбенко, В.Н. Кузьменко // Матеріали VII Міжнародної науково-технічної конференції “Системний аналіз та інформаційні технології.” 28 червня – 02 липня 2005, Київ, Україна. – С. 49.
35. Лаптин Ю.П. Оптимальное проектирование сложных объектов энергетики / Ю.П. Лаптин, М.Г. Журбенко, Д.А. Коваленко, М.М. Левін, П.И. Волковицька // Системний аналіз та інформаційні технології. Матеріали

XI Міжнародної науково-технічної конференції. 26–30 травня 2009, Київ, 2009. – С. 137.
36. Лаптин Ю.П. Некоторые подходы к решению нелинейных задач оптимизации с ограничениями / Ю.П. Лаптин // Праці міжнародного симпозіуму «Питання оптимізації обчислень (ПОО-XXXV)», том 1. – Київ, 2009. – С. 436–440.
37. Лаптин Ю.П. Сценарный подход к планированию инвестиций в электроэнергетику в условиях неопределенности / Ю.П. Лаптин, А.П. Лиховид, Н.Н. Стрюкова // Системний аналіз та інформаційні технології: матеріали XII Міжнародної науково-технічної конференції SAIT 2010, Київ, 25–29 травня 2010. – С. 277.
38. Лаптин Ю.П. Задачи построения линейных классификаторов в случае многих классов / Ю.П. Лаптин, Ю.И. Журавлев, А.П. Виноградов // Российская конференция «Дискретная оптимизация и исследование операций»: Материалы конференции 27 июня – 3 июля 2010. – Алтай, Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2010. – С. 187.
39. Лаптин Ю.П. Задачи построения линейных и нелинейных классификаторов в случае многих классов / Ю.П. Лаптин, Ю.И. Журавлев, А.П. Виноградов // Труды конференции ММРО-15, Петрозаводск, 11–17 сентября, 2011. – С. 72–74.
40. Лаптин Ю.П. Использование некоторых точных вспомогательных функций в задачах оптимизации / Ю.П. Лаптин, Т.А. Бардадым, Е.И. Щетинин // Труды III Международной конференции „Математическое моделирование, оптимизация и информационные технологии”, 19–23 марта. Кишинеу, Республика Молдова, 2012. – С. 394–404.
41. Laptin Yu. P. Some Approaches for Construction Exact Auxiliary Functions in Optimization Problems / Yu. P. Laptin, T.A. Bardadym // Международная конференция «Конструктивный негладкий анализ и смежные вопросы», тезисы докладов, Санкт-Петербург, 18–23 июня 2012. – С. 102–104.
42. Лаптин Ю.П. Некоторые подходы к формированию точных штрафных функций / Ю.П. Лаптин, Е.И. Шор // Праці міжнародної наукової конференції „Питання оптимізації обчислень (ПОО-XL)”. – К.: Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, 2013. – С. 143–144.
43. Лаптин Ю.П. Использование выпуклых продолжений при формировании точных штрафных функций / Ю.П. Лаптин, Т.А. Бардадым // Праці міжнародної наукової конференції „Питання оптимізації обчислень (ПОО-XL)”. – К.: Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, 2013. – С. 41–142.
44. Лаптин Ю.П. Определение коэффициентов штрафа и формирование точных штрафных функций / Ю.П. Лаптин // VII Московская международная конференция по исследованию операций (ORM2013), Труды, Том 2. – М.: ВЦ РАН, 2013. – С. 39–41.

АНОТАЦІЯ

Лаптін Ю.П. Методи негладкої оптимізації розв’язання структурованих задач. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.05.01 – теоретичні основи інформатики та кібернетики. – Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ, 2016.

Дисертація присвячена дослідженню та вирішенню проблем, що виникають при використанні сучасних методів негладкої оптимізації для вирішення складних оптимізаційних задач. Розроблено нові ефективні методи побудови задач безумовної оптимізації еквівалентних вихідним задачам з обмеженнями. Ці методи засновані на опуклому продовженні цільової функції з допустимої області вихідної задачі оптимізації на весь простір змінних. Програмні реалізації запропонованих підходів з використанням r-алгоритма Н.З. Шора показали високу ефективність і стійкість за відношенням до поганої обумовленості задач спеціального типу. Розроблено нові методи оцінювання коефіцієнтів точних штрафних функцій, які не потребують вирішення допоміжних задач оптимізації. Отримані результати дозволяють подолати суттєві проблеми в схемах декомпозиції за змінними, пов'язані з відсутністю рішень підзадач при деяких значеннях зв'язуючих змінних. Розроблено нову модель мінімізації емпіричного ризику для задачі побудови лінійного класифікатора у випадку лінійно нероздільної навчальної вибірки. Показано, що спеціальна задача побудови лінійного класифікатора для двох класів у випадку лінійно нероздільної навчальної вибірки поліноміально вирішувана за певних умов. Показано перевагу використання послідовних бінарних лінійних класифікаторів у випадку багатьох класів. Розроблено програмні засоби, які дозволяють вирішувати задачі оптимального проектування складних технічних об'єктів на сучасних теплоелектростанціях. Відповідне програмне забезпечення передано у дослідну експлуатацію в Харківське ЦКБ «ЕНЕРГОПРОГРЕС».

Ключові слова: негладка оптимізація, опуклі продовження, точні штрафні функції, методи декомпозиції, лінійні класифікатори, лінійна роздільність множин, оптимальне проектування, складні технічні об'єкти.

АННОТАЦИЯ

Лаптин Ю.П. Методы негладкой оптимизации решения структурированных задач. – Рукопись.

Диссертация на соискание научной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.05.01 – теоретические основы информатики и кибернетики. – Институт кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины, Киев, 2016.

Диссертация посвящена иссследованию и решению проблем, возникающих при использовании современных методов негладкой оптимизации для решения сложных оптимизационных задач. Разработаны новые эффективные методы построения задач безусловной оптимизации эквивалентных исходным задачам с ограничениями. Эти методы основаны на выпуклом продолжении целевой функций с допустимой области исходной задачи оптимизации на все пространство переменных. Программные реализации предложенных подходов с использованием r-алгоритма Н.З. Шора показали высокую эффективность и устойчивость по отношению к плохой обусловленности задач специального вида. Разработаны новые методы определения значений коэффициентов точных штрафных функций, не требующие решения вспомогательных задач оптимизации. Полученные результаты позволяют преодолеть существенные проблемы в схемах декомпозиции по переменным, связанные с отсутствием решений подзадач при некоторых значениях связывающих переменных. Разработана новая модель минимизации эмпирического риска для задачи построения линейного классификатора в случае линейно неразделимой обучающей выборки. Показано, что специальная задача построения линейного классификатора для двух классов в случае линейно неразделимой обучающей выборки полиномиально разрешима при определенных условиях. Показано преимущество использования последовательных бинарных линейных классификаторов в случае многих классов. Разработаны программные средства, которые позволяют решать задачи оптимального проектирования сложных технических объектов на современных теплоэлектростанциях. Соответствующее программное обеспечение передано в опытную эксплуатацию в Харьковское ЦКБ «ЭНЕРГОПРОГРЕС».

Ключевые слова: негладкая оптимизация, выпуклые продолжения, точные штрафные функции, методы декомпозиции, линейные классификаторы, линейная разделимость множеств, оптимальное проектирование, сложные технические объекты.

REFERENCE

Laptin Yu. Methods of nonsmooth optimization for solving structured problems. – Manuscript.

Thesis submitted for a doctor’s degree in physical-mathematical sciences by specialty 01.05.01 – theoretical bases of information and cybernetics. – V.M. Glushkov Institute of Cybernetics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2016.

The thesis is devoted to research and solve problems arising from the use of modern methods of nonsmooth optimization to solve complex optimization problems. New effective methods of constructing unconstrained optimization problem, which are equivalent to the original problem with the restrictions, have been developed. These methods are based on convex extension of objective functions from the feasible set of the original optimization problem to the whole space of variables. Software implementation of the proposed approaches using r-algorithm of Shor showed high efficiency and stability with respect to ill-conditioning problems of a special kind. New methods have been developed to determine the values of the coefficients of exact penalty functions that do not require decision of auxiliary optimization problems. The obtained results allow to overcome considerable difficulties in decomposition schemes over the variables associated with the lack of sub solutions for some values of linking variables. The new model is designed to minimize the empirical risk for the problem of constructing a linear classifier in the case of a linearly inseparable training sample. It is shown that under certain conditions, in the case of linearly inseparable training sample for two classes, the special task of constructing linear classifier is polynomially solvable. The advantage of using sequential binary linear classifiers in the case of many classes is shown. The software is developed that solve the problem of optimal design of complex technical objects in modern thermal power stations. Corresponding software was passed into experimental operation in the «ENERGOPROGRES» CKB in Kharkov.

Key words: nonsmooth optimization, convex extension, exact penalty function, decomposition method, linear classifier, linear separability of sets, optimal design, complex technical objects.

Підписано до друку 03.03.2016. Формат 60.84/16. Папір офс.
Друк цифровий. Ум. друк. арк. 2,37. Ум. фарбо-відб. 2,32.
Обл.-вид. арк. 2,0. Зам. 19. Тираж 100 прим.

Редакційно-видавничий відділ
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України
03680, МСП, Київ-187, проспект Академіка Глушкова, 40